Aplicação de Regressão Polinomial à Curva de Tensão-Deformação para determinar o módulo de tenacidade

Kauan Henrique da Silva Izidoro

[1]Faculdade de Tecnologia SENAI Gaspar Ricardo Junior
18090-110 – Sorocaba – SP – Brazil

cnttkauan@gmail.com

Abstract. *This paper presents an analytical solution for calculating the modulus of toughness from the stress-strain curve of materials. This curve is obtained through tests performed with specific testing machines for analyzing the deformation of materials. The modulus of toughness is determined by calculating the area under the stress-strain curve. The analytical method used to fit the curve was polynomial regression, highlighting the use of machine learning techniques to improve the accuracy and efficiency of data processing.*

Resumo. *Este artigo apresenta uma solução analítica para o cálculo do módulo de tenacidade a partir da curva tensão-deformação de materiais. Esta curva é obtida por meio de ensaios realizados com máquinas de ensaio específicas para análise da deformação de materiais. O módulo de tenacidade é determinado pelo cálculo da área sob a curva tensão-deformação. O método analítico utilizado para ajuste da curva foi a regressão polinomial, destacando o uso de técnicas de aprendizado de máquina para melhorar a precisão e eficiência do processamento de dados.*

1. Introdução

O estudo da resistência de materiais e sua capacidade de deformação sob diferentes condições de carga é crucial para diversas aplicações em engenharia e ciências materiais. Uma das propriedades mais importantes nesse contexto é o módulo de tenacidade, que quantifica a energia necessária para provocar a fratura de um material. Este módulo pode ser determinado a partir da curva tensão-deformação, obtida por meio de ensaios experimentais com máquinas de ensaio de resistência de materiais. A curva tensão-deformação revela a relação entre a tensão (força por unidade de área - MPa) e a deformação (variação no comprimento ou volume) de um material durante o processo de carregamento.

O cálculo do módulo de tenacidade tradicionalmente envolve a determinação da área sob essa curva, representando a energia total absorvida até a ruptura do material. No entanto, o processo de ajuste da curva tensão-deformação e a estimação do módulo de tenacidade podem ser desafiadores, especialmente quando se lida com grandes volumes de dados e com a necessidade de alta precisão nos resultados.

Neste artigo, propomos uma solução analítica para a determinação da curva que modela a relação tensão-deformação, utilizando a regressão polinomial (método de mínimos quadrados) como método para o ajuste. A regressão polinomial permite modelar de forma eficaz as relações não lineares presentes em muitos materiais, proporcionando um ajuste preciso da curva experimental. Além disso, destacamos o uso de técnicas de aprendizado de máquina para aprimorar a precisão e a eficiência do processamento dos dados, oferecendo uma abordagem inovadora para otimizar o cálculo do módulo de tenacidade em diferentes contextos materiais.

O objetivo deste trabalho é apresentar e validar a metodologia proposta, comparando seu desempenho com outros métodos analíticos como o uso da interpolação por spline cúbica, que foi uma das motivações desde trabalho, demonstrando suas vantagens em termos de precisão, robustez e aplicabilidade em cenários complexos de análise de materiais.

2. Revisão de literatura

A determinação do módulo de tenacidade a partir da curva tensão-deformação é uma área amplamente investigada na ciência dos materiais e na engenharia mecânica. Métodos tradicionais, como a integração numérica direta da curva experimental, apresentam limitações relacionadas à dependência da qualidade dos dados experimentais e ao alto custo computacional para análises mais complexas no contexto do ajuste de curvas experimentais, técnicas de interpolação, como o spline cúbico, têm sido frequentemente empregadas para modelar relações não lineares entre tensão e deformação. Estudos como os de [Nelson Bertarello, 2024] demonstraram que a interpolação spline oferece alta precisão em curvas suaves, mas apresenta desafios quando aplicada a materiais com comportamento não linear acentuado, como polímeros e ligas metálicas.

Por outro lado, métodos baseados em regressão polinomial têm se mostrado eficazes para ajustar curvas experimentais em diversas aplicações industriais e científicas. Segundo Bishop (2006), a regressão polinomial, quando combinada com o método de mínimos quadrados, é capaz de representar de forma precisa a relação entre variáveis, mesmo em cenários com dados ruidosos. Essa abordagem tem a vantagem de fornecer um modelo matemático compacto e interpretável, que pode ser facilmente integrado em sistemas computacionais.

Com o avanço das técnicas de aprendizado de máquina, a combinação de métodos tradicionais de ajuste de curvas com estratégias automatizadas para pré-processamento de dados tem ganhado destaque. Ferramentas como o scikit-learn [Pedregosa et al., 2011] e bibliotecas de processamento numérico como o NumPy [Harris et al., 2020] têm facilitado a aplicação de algoritmos de regressão em larga escala, aumentando a eficiência no processamento de dados experimentais.

Em relação à análise de curvas tensão-deformação, normas técnicas como a ASTM D638 [ASTM, 2024] fornecem diretrizes padronizadas para a realização de ensaios em polímeros. Tais normas garantem a qualidade dos dados experimentais e a reprodutibilidade dos resultados. No entanto, ainda há uma lacuna na aplicação de técnicas modernas, como aprendizado de máquina, para automatizar e otimizar o ajuste das curvas experimentais seguindo essas normas.

Com base nessa revisão, observa-se que há uma oportunidade de integrar métodos tradicionais, como a regressão polinomial, com técnicas computacionais modernas para aprimorar a análise de curvas tensão-deformação. Este trabalho busca preencher essa lacuna, propondo uma abordagem que combina precisão, eficiência e robustez no cálculo do módulo de tenacidade.

3. Metodologia

Neste trabalho, foi utilizado o método de mínimos quadrados para ajustar um polinômio à curva tensão-deformação obtida experimentalmente. O método é amplamente empregado na análise de dados devido à sua capacidade de minimizar a soma dos erros quadráticos entre os valores observados e os valores estimados pelo modelo.

Como preprocessamento, foi necessário a normalização dos dados adotando a normalização MinMaxScaler() presente na biblioteca Sklearn, com isso deixando os dados em um intervalo de 0 a 1. Treinamentos de machine learning supervisionado possuem a etapa de divisão dos dados ou features dedicadas a treino e a teste, esta etapa foi feita novamente com ferramentas disponiveis na biblioteca Sklearn.

Durante o treinamento, foi usado como parâmetro o valor do indicador MAE (Mean Absolute Error) para que o modelo finalize seu treino quando em um intervalo determinado de expoente o valor desta métrica seja minímo.

3.1. Formulação Teórica

O método de mínimos quadrados busca encontrar os coeficientes β que minimizam a soma dos quadrados dos resíduos r_i, definidos como a diferença entre os valores observados y_i e os valores preditos pelo modelo $\hat{y}_i$:

$$r_i = y_i - \hat{y}_i$$

A função objetivo é dada por:

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} r_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Para um modelo polinomial de grau m, a predição $\hat{y}_i$ é expressa como:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_m x_i^m$$

Substituindo essa equação na função objetivo e aplicando derivadas parciais, o sistema de equações normal é obtido para determinar os coeficientes β.

3.2. Abordagem Matricial

A formulação matricial do método de mínimos quadrados permite resolver o problema de forma eficiente para qualquer conjunto de dados. Seja $\mathbf{X}$ a matriz de design, $\mathbf{y}$ o vetor de observações e β o vetor de coeficientes do modelo:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix}$$

A solução para os coeficientes β é dada pela equação:

$$\beta = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

Essa abordagem utiliza operações matriciais, como transposição e inversão, para encontrar a solução ótima.

Transposição matricial:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \quad A^\top = \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}$$

Inversão matricial:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \quad A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$$

A implementação do método foi realizada utilizando a biblioteca NumPy, amplamente empregada em ciência de dados e aprendizado de máquina devido à sua eficiência na manipulação de arrays e operações matriciais.

4. Resultados

Para analisar os resultados do treino deste modelo, foram usados dados separados em etapas anteriores de forma a avaliar a precisão do modelo para dados conhecidos. Foram usados as seguintes métricas para validação:

- **MSE (Mean Squared Error)**: O MSE é a média dos quadrados das diferenças entre os valores reais e as previsões do modelo. Quanto menor o MSE, melhor o modelo, pois ele indica uma menor discrepância entre os valores preditos e reais. O MSE penaliza erros maiores de forma mais severa, já que os erros são elevados ao quadrado.
- **MAE (Mean Absolute Error)**: O MAE é a média das diferenças absolutas entre os valores reais e as previsões. Ele fornece uma ideia clara do erro médio, sendo mais intuitivo que o MSE, já que não penaliza erros grandes de forma tão acentuada. Quanto menor o MAE, melhor o modelo.
- **R^2 (Coeficiente de Determinação)**: O R^2 indica a proporção da variabilidade nos dados que é explicada pelo modelo. Seus valores variam de 0 a 1, sendo que um R^2 próximo de 1 indica que o modelo explica quase toda a variabilidade dos dados, enquanto um R^2 próximo de 0 indica que o modelo tem um poder explicativo muito baixo. Em alguns casos, valores negativos de R^2 podem ocorrer, o que significa que o modelo é pior do que uma simples média dos valores reais.
- **RMSE (Root Mean Squared Error)**: O RMSE é a raiz quadrada do MSE e fornece uma medida do erro em unidades da variável de interesse. Como o MSE, ele penaliza mais fortemente erros maiores, mas sua interpretação é mais fácil, pois mantém as mesmas unidades dos dados originais. Quanto menor o RMSE, melhor o modelo.

  Esses resultados mostram que o modelo treinado é eficaz para prever a relação entre tensão e deformação nos dados de teste, o que valida sua aplicação para estimativas precisas em contextos semelhantes. Contudo, é importante considerar a possibilidade de melhoria no modelo, utilizando maiores expoentes ou ajustando seus parâmetros para melhorar sua previsão, porém mantendo a atenção em métricas reais para avaliação.

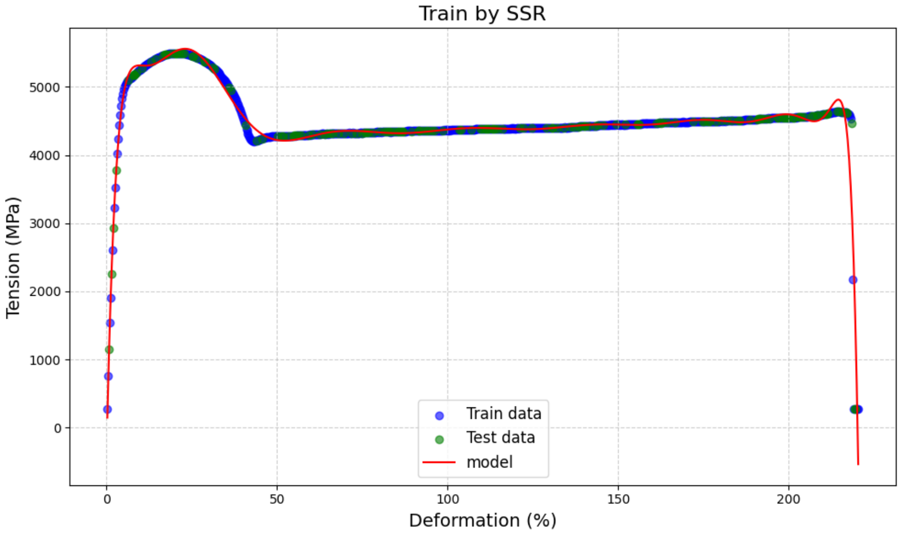

Figura 1. SSR Training

Métrica	**Valor**
MSE (Mean Squared Error)	`0.00140`
RMSE (Root Mean Squared Error)	`0.03747`
MAE (Mean Absolute Error)	`0.01186`
R^2 Score	`0.91652`

Tabela 1. Métricas de Avaliação do Modelo

Referências

ASTM (2024). Standard test method for tensile properties of plastics. `https://www.astm.org/d0638-14.html`. Access: 14 dez. 2024.

Bishop, C. M. (1984). *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer, 2nd edition.

georgia (2024). The method of least squares. `https://textbooks.math.gatech.edu/ila/least-squares.html`. Access: 14 dez. 2024.

numpy (2024). Poly1d function. `https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.poly1d.html`. Access: 14 dez. 2024.

skleanr (2024). Polynomial and supervised learning. `https://scikit-learn.org/stable/modules/linear_model.html#polynomial-regression-extending-linear-models-with-basis-functions`. Access: 14 dez. 2024.

[ASTM 2024] [Bishop 1984] [numpy 2024] [skleanr 2024] [georgia 2024]