UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

DOUGLAS RICARDO SANSÃO

PREVISÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS DE MATERIAIS
COMPÓSITOS USANDO ELEMENTOS FINITOS E APRENDIZADO DE
MÁQUINA

São Carlos

DOUGLAS RICARDO SANSÃO

PREVISÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS DE MATERIAIS COMPÓSITOS USANDO ELEMENTOS FINITOS E APRENDIZADO DE MÁQUINA

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo A. Chinelatto

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

Sansão, Douglas Ricardo

S194p

Previsão de propriedades mecânicas de materiais compósitos usando elementos finitos e aprendizado de máquina / Douglas Ricardo Sansão; orientador Marcelo A. Chinelatto. São Carlos, 2021.

Monografia (Graduação em Engenharia Mecânica) -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2021.

1. Propriedades mecânicas. 2. Elementos finitos. 3. Aprendizado de máquina. 4. Materiais compósitos. I. Título.

FOLHA DE AVALIAÇÃO OU APROVAÇÃO

AGRADECIMENTOS

À minha família, pelo apoio.

À todos os professores que fizeram parte da minha formação, contribuindo de alguma forma para a elaboração desse trabalho.

Ao professor Dr. Marcelo A. Chinelatto e seu aluno de doutorado, Lucas Henrique Staffa, pela orientação nesse trabalho.

Ao professor Leopoldo, pelo auxílio na disponibilização do software COMSOL Multiphysics.

RESUMO

SANSAO, D. R. Previsão de propriedades mecânicas de materiais compósitos usando elementos finitos e aprendizado de máquina. 2020. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

O objetivo desse trabalho é obter um modelo de aprendizado de máquina para previsão de propriedades mecânicas de materiais compósitos. Primeiramente, foi estabelecido um elemento representativo de volume (RVE) em três dimensões de um compósito reforçado com fibras. Usando o método de elementos finitos (FEM) com condições de contorno periódicas, obtevese o módulo de elasticidade longitudinal, transversal e o módulo de cisalhamento para um compósito reforçado com fibras de vidro de fração volumétrica 50%. Previsões usando modelos analíticos foram comparadas com os resultados obtidos com FEM. Em seguida, módulos de elasticidade longitudinal, transversal e módulo de cisalhamento foram obtidos usando FEM para diversas combinações de fração volumétrica e propriedades da fibra e da matriz constituintes do compósito. Posteriormente, um algoritmo de árvore de decisão com método de Boosting (BDT – Boosted-Decision-Tree) foi treinado e os resultados foram avaliados em termos dos erros percentuais absolutos. Para o módulo de cisalhamento, obteve-se um erro de 3,7% para o BDT versus 30,6% dos modelos analíticos, se mostrando um algoritmo promissor para previsão de propriedades mecânicas.

Palavras-chave: Propriedades mecânicas; Elementos finitos; Materiais compósitos; Aprendizado de máquina; Árvore de decisão.

ABSTRACT

SANSAO, D. R. Prediction of mechanical properties of composite materials using finite element method and machine learning. 2016. 198 f. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

The aim of this work is to obtain a machine learning model for predicting mechanical properties of composite materials. First, a three-dimensional representative volume element (RVE) of a fiber-reinforced composite was established. Using finite element method (FEM) with periodic boundary conditions, the longitudinal and transversal elasticity moduli and shear modulus were obtained for a composite with 50% volume fraction of glass fiber. The predictions using analytical models were compared with results obtained with FEM. Then, the longitudinal, transversal elasticity and shear moduli were obtained for various combinations of volumetric fraction and fiber and matrix properties that make up the composite. Subsequently, a Boosted-Decision-Tree (BDT) was trained and the results were evaluated in terms of absolute percentage errors. For the shear module, an error of 3.7% was obtained for BDT versus 30.6% of analytical models, showing a promising algorithm for predicting mechanical properties.

Keywords: Mechanical properties; Finite element analysis; Composite materials; Machine learning; Decision-tree regression.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Classificação de compósitos de acordo com a geometria	32
Figura 2 - Orientação geométrica considerada	33
Figura 3 - Classificações de algoritmos de aprendizado de máquina	35
Figura 4 - Ilustração do algoritmo de árvore de decisão	36
Figura 5 - Regressão com árvore de decisão com diferentes profundidades	37
Figura 6 – Exemplo de (a) ajuste demasiado (b) baixo ajuste e (c) ajuste bom	38
Figura 7 - Ilustração de funções de base (a) lineares (b) quadráticas e (c) cúbicas	41
Figura 8 - Corpo genérico tridimensional	42
Figura 9 - Arranjo de fibras. (a) célula unitária quadrada e (b) célula unitária hexagonal	45
Figura 10 - Ilustração do modelo físico	46
Figura 11 - Faces com condições periódicas de contorno	46
Figura 12 - Malhas geradas para diferentes valores de <i>Dmax/L</i>	48
Figura 13 - Ilustração do conjunto de dados obtidos	49
Figura 14 - MAPE versus <i>Dmax/</i> L	51
Figura 15 - Modelos analíticos e solução obtida com FEM	52
Figura 16 - MAPE versus profundidade da árvore para conjunto de treino e teste	53
Figura 17 - MAPE versus profundidade de árvore - intervalo expandido	53
Figura 18 - MAPE E2 em função de vf	54

SUMÁRIO

1. IN	TRODUÇÃO	31
2. RI	EVISÃO BIBLIOGRÁFICA	32
2.1.	Materiais compósitos	32
2.2.	MODELOS ANALÍTICOS PARA PREVISÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS	33
2.3.	Aprendizado de máquina	35
2.4.	MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	39
3. M	ETODOLOGIA	45
3.1.	Modelo físico	45
3.2.	Convergência do FEM	47
3.3.	COMPARAÇÃO COM MODELOS ANALÍTICOS	48
3.4.	GERAÇÃO DOS DADOS	48
3.5.	ÁRVORE DE DECISÃO E ADABOOST	49
4. RI	ESULTADOS	51
4.1.	Convergência de malha	51
4.2.	PREVISÃO COM MODELOS ANALÍTICOS	51
4.3.	DECISION TREE	53
4.4.	BOOSTED DECISION TREE	54
5. CO	ONCLUSÕES	56
6 REE	ERÊNCIAS	57

1. INTRODUÇÃO

Materiais compósitos começaram a ser utilizados industrialmente em meados do século XX. Desde então, de artigos simples utilizados cotidianamente até aplicações em estruturas na indústria aeroespacial, os materiais compósitos ocupam lugar destacado entre os materiais de engenharia. Isto se deve naturalmente às vantagens que possuem relativamente aos materiais tradicionais, entre as quais sobressaem a facilidade de processamento, a elevada rigidez e resistência mecânica e o baixo peso específico de muitos desses materiais [1].

A determinação das propriedades mecânicas de compósitos a partir das propriedades mecânicas de seus constituintes tem sido amplamente explorada nas últimas décadas. Há várias abordagens analíticas na literatura para obter as propriedades do material, porém esses modelos são aproximados e sua precisão geralmente é baixa [2]. Por este motivo, a maioria dos autores obtém as propriedades macroscópicas de compósitos usando simulações de elementos finitos (FEM). Simulações FEM de alta fidelidade podem produzir previsões muito precisas [3], porém o tempo computacional associado a essas simulações em certo grau limita sua aplicabilidade.

Com os avanços recentes em processamento computacional, aprendizado de máquina tem se mostrado uma ferramenta potente em inúmeras aplicações, sendo amplamente utilizada na detecção de *spam*, reconhecimento de voz, mecanismos de sugestões em sites de compras, entre outras [4]. Na engenharia, algoritmos de aprendizado de máquina também tem sido aplicados para prever fadiga de metais [5], otimização de novos materiais [6] e em materiais compósitos [7]. O ponto crucial dessa ferramenta é que, uma vez fornecido os dados e treinado um algoritmo, o processamento computacional para previsão de propriedades é ordens de magnitude menor se comparado com uma simulação por elementos finitos.

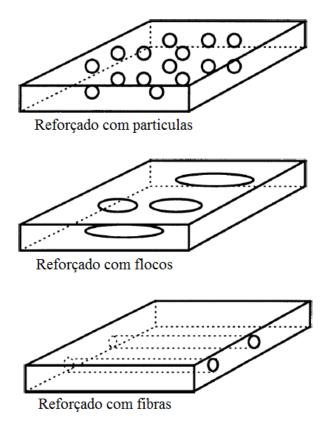
No mesmo sentido dos trabalhos citados, o objetivo desse trabalho é contribuir com a literatura aplicando técnicas orientadas à dados em ciência dos materiais. Primeiro, um modelo de elemento de volume representativo (RVE) de um compósito de fibras unidirecionais foi estabelecido. Foram aplicadas condições de contorno periódicas a fim de obter as propriedades mecânicas do compósito originado pela repetição dos RVE. Módulos de elasticidade longitudinal, transversal e módulo de cisalhamento foram obtidos para diferentes frações volumétricas e propriedades mecânicas da fibra e da matriz. Posteriormente, um algoritmo de aprendizado de máquina, *Descision tree regression*, juntamente com outro algoritmo, *AdaBoost*, foram aplicados a fim de prever as propriedades mecânicas do compósito resultante. Por fim os resultados serão comparados com modelos analíticos.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Materiais compósitos

Materiais compósitos podem ser definidos como uma estrutura composta de dois ou mais materiais macroscopicamente identificáveis que, combinados, resultam em um material com propriedades superiores [8]. Os três constituintes de um compósito são o reforço, a matriz e a interface. O reforço é o elemento de suporte de carga do composto, a matriz é o meio de ligação para o reforço, enquanto a interface é a superfície de contato comum entre o reforço e a matriz. De acordo com a geometria, podemos classificar em três grandes grupos de compósitos: os reforçados com partículas, flocos e fibras, ilustrado na Figura 1.

Figura 1 - Classificação de compósitos de acordo com a geometria



Fonte: Kaw (2016)⁹

Nos últimos anos, tem havido um aumento considerável no uso de compósitos reforçados com fibra [10]. Compósitos reforçados com fibra têm sua importância devido à sua alta resistência e módulo específicos em comparação com metais. Compósito desse tipo foram inicialmente desenvolvidos para aplicações leves e de alta resistência em aeronaves, mas agora

encontraram uma variedade de aplicações que vão desde a aeroespacial até compósitos automotivos e, da mesma forma, muitos outros campos [1].

Para a obtenção de propriedades mecânicas de compósitos reforçados com fibra, geralmente duas abordagens são consideradas: macromecânica e micromecânica [10]. Na primeira, o compósito é considerado globalmente, normalmente assumindo-o como sendo contínuo, ortotrópico e homogêneo. Na abordagem micromecânica, a análise é feita na ordem da matriz e da fibra, onde tipicamente são consideradas células unitárias das quais combinando características dessa célula pode-se obter as propriedades gerais do material.

2.2. Modelos analíticos para previsão de propriedades mecânicas

Antes de apresentar os modelos analíticos, faz-se necessário algumas considerações. Confirme ilustrado na Figura 2, a direção 1 (x_1) será considerada longitudinal, paralela à orientação das fibras. Tanto a fibra quanto a matriz são consideradas isotrópicas e linearmente elásticas, enquanto o compósito resultante é considerado transversalmente isotrópico, também linearmente elástico.

 x_2 x_3

Figura 2 - Orientação geométrica considerada

Fonte: VIGNOLI (2019)²

Regra das misturas (ROM)

A regra das misturas (abreviadamente ROM, *Rule of Mixtures*) é baseada em uma análise simples assumindo que as fibras e a matriz podem ser modeladas como elementos em

paralelo ou em série, de acordo com a carga aplicada. Na direção longitudinal, o módulo de elasticidade é dada pela Equação 1 abaixo [11].

$$E_1 = E_f v_f + E_m v_m$$
 Eq. (1)

onde E_1 é o módulo de elasticidade do compósito na direção longitudinal, E_f e E_m são módulos de elasticidade da fibra e da matriz, respectivamente, v_f e v_m são as frações volumétricas da fibra e da matriz, respectivamente. As propriedades transversais são dadas pelas Equações 2 e 3.

$$E_2 = \frac{E_f E_m}{E_f v_m + E_m v_f}$$
 Eq. (2)

$$G_{12} = \frac{G_f G_m}{G_f v_m + G_m v_f}$$
 Eq. (3)

Modelo de Halpin-Tsai

Para o módulo de elasticidade na direção longitudinal, a equação é a mesma da regra das misturas. Para as propriedades transversais, os autores [12] propuseram as Equações 4 e 5.

$$E_2 = E_m \left(\frac{1 + \xi \eta v_f}{1 - \eta v_f} \right)$$
 Eq. (4)

$$G_{12} = G_m \left(\frac{1 + \xi \eta v_f}{1 - \eta v_f} \right)$$
 Eq. (5)

onde

$$\eta = \frac{\left(\frac{\phi_f}{\phi_m}\right) - 1}{\left(\frac{\phi_f}{\phi_m}\right) + \xi}$$
 Eq. (6)

 ϕ sendo E ou G para E_2 e G_{12} , respectivamente. ξ é um parâmetro que pode ser calibrado experimentalmente. Uma recomendação geral quando não há dados experimentais é usar $\xi = 2$ [25].

Modelo de Chamis

Além dos modelos citados anteriormente, Chamis [13] propôs incluir a presença de vazios microestruturais (v_v sendo a fração de vazios) na predição das propriedades. As propriedades segundo o modelo de Chamis são dadas pelas Equações 7, 8 e 9.

$$E_1 = E_m + (1 - v_v)v_f(E_f - E_m)$$
 Eq. (7)

$$E_2 = \frac{E_m}{1 - \sqrt{v_f (1 - v_v)} \left(1 - \frac{E_m}{E_f}\right)}$$
 Eq. (8)

$$G_{12} = \frac{G_m}{1 - \sqrt{v_f (1 - v_v) \left(1 - \frac{G_m}{G_f}\right)}}$$
 Eq. (9)

Notemos que, caso a presença de vazios seja desprezada ($v_v=0$), o modelo de Chamis é muito parecido com a regra das misturas, exceto pela raiz da fração volumétrica nas propriedades transversais.

2.3. Aprendizado de máquina

O objetivo do aprendizado de máquina é obter modelos a partir de dados [14]. Em um problema geral, tem-se um conjunto de dados do qual se deseja obter uma ou mais variáveis de saída, usualmente quantitativas (preços de ações, por exemplo) ou categóricas (e-mail spamnão spam) usando variáveis de entrada. Pode-se dizer que o aprendizado de máquina se baseia no princípio do raciocínio indutivo, ou seja, que as informações de um conjunto de exemplos fornecem informação para generalização do todo [15]. Pode-se classificar os algoritmos de aprendizado de máquina de acordo com a Figura 3.

Aprendizado Indutivo

Supervisionado (preditivo)

Classificação

Regressão

Agrupamento

Associação

Sumarização

Figura 3 - Classificações de algoritmos de aprendizado de máquina

Fonte: BARRETO (2018)¹⁵

Em algoritmos supervisionados, o objetivo é encontrar uma função (hipótese) a partir dos dados de treinamento (exemplos). Algoritmos descritivos, por sua vez, buscam explorar ou descrever um conjunto de dados. Para tal, não há rótulos pré estabelecidos (por isso são também

chamados de métodos não supervisionados). Um exemplo seria observar um conjunto de dados de empresas e agrupá-las de acordo com algum critério de semelhança entre elas [15].

Árvore de decisão

Árvore de decisão é um dos algoritmos supervisionados de aprendizado de máquina que pode ser usado tanto para classificação quanto para regressão. Há várias implementações diferentes na literatura, sendo a mais conhecida delas a CART (*Classification and Regression Tree*) [16]. Nessa implementação, um nó de decisão é sempre dividido em dois nós (partição binária). A Figura 4 ilustra a ideia do algoritmo no caso de regressão.

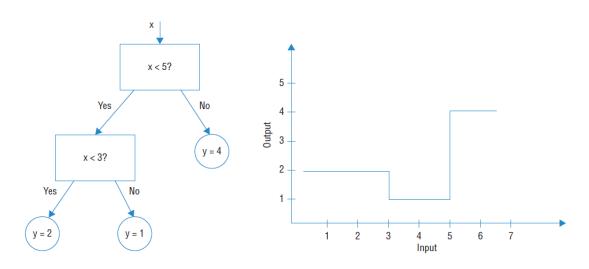


Figura 4 - Ilustração do algoritmo de árvore de decisão

Fonte: BOWLES (2015)17

O critério de divisão é minimizar alguma função de impureza dos conjuntos gerados na partição. No caso de um problema de classificação, a função de impureza comumente utilizada é o índice de Gini, enquanto na regressão são os erros quadráticos dos conjuntos gerados [18]. O processo se repete nó após nó até um número de profundidade estabelecido. A profundidade da árvore está diretamente relacionada com o grau de ajuste do modelo. Um exemplo visual de uma regressão com árvore decisão para profundidade 2 e profundidade 5 se encontra na Figura 5.

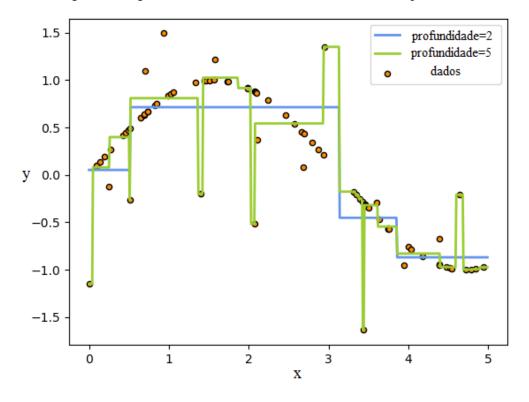


Figura 5 - Regressão com árvore de decisão com diferentes profundidades

Fonte: Adaptado de PEDREGOSA (2011)¹⁹

Boosting

Boosting é um método para melhorar o desempenho de algum algoritmo de aprendizagem. Assim, essa técnica não é utilizada de forma isolada, mas sim usando algum outro algoritmo, como árvores de decisão ou redes neurais, com o objetivo de tornar algum algoritmo, chamado de algoritmo de base, em um algoritmo "forte". Assim, uma sequência de modelos $h_1 \dots h_n$, obtidos a partir de algum algoritmo base, são combinados para formar um modelo final h_f . Um dos algoritmos mais conhecidos de Boosting é o AdaBoosting (Adaptive Boosting). No AdaBoost, os dados do conjunto de treino são ponderados por peso (na inicialização, todos os exemplos recebem $\frac{1}{N}$, sendo N o número de exemplos). Os modelos $h_1 \dots h_n$ são obtidos em sequência e em cada iteração os pesos são rebalanceados de acordo com o erro de previsão [20].

Overfitting

Overfitting pode ser considerado como "ajustar demais" o modelo aos dados. O grau de ajuste do modelo está diretamente relacionado com a capacidade de generalização do modelo à novos dados. Por isso, uma prática muito comum ao aplicar algoritmos de aprendizado de máquina é dividir o conjunto de dados disponível em dois: um conjunto de treino e outro de teste. Assim, obtém-se o modelo usando o conjunto de treino e se avalia o erro de previsão no conjunto de teste [17]. A Figura 6 ilustra uma regressão com diferentes graus de ajuste, onde MLE (Maximum Likehood Estimator) é o estimador de máxima verossimilhança para uma regressão polinomial de diferentes graus.

Figura 6 – Exemplo de (a) ajuste demasiado (b) baixo ajuste e (c) ajuste bom

Fonte: Adaptado de DEISENROTH et al. (2020)²⁰

Medidas de erro

Uma vez obtido um modelo preditivo, é preciso definir medidas de qualidade de previsão. Assim, seja \hat{y}_i o valor predito de y_i . A média dos erros quadráticos, MSE (*Mean Squared Error*) é dado pela Equação 10.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 Eq. (10)

O MSE, por sua vez, reflete a ordem de grandeza de y_i . Em termos relativos, a média percentual dos erros absolutos (*Mean Average Percentage Error*) é dado pela Equação 11:

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|$$
 Eq. (11)

Outra métrica bastante utilizada em problemas de regressão é o coeficiente de determinação, R^2 [17]. O coeficiente de determinação é dado pela Equação 12.

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \bar{y}_{i})^{2}}$$
 Eq. (12)

Se o R^2 é igual a 1, implica que $\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = 0$ e, portanto, o modelo ajusta completamente os dados. Se $R^2 = 0$, tem-se que $\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2$ e, portanto, o modelo ajusta os dados tanto quanto a reta horizontal \bar{y}_i . Contra intuitivamente ao nome "R dois", o coeficiente de determinação pode ser negativo. Isso ocorre quando a previsão modelo é pior do que a média dos dados \bar{y}_i . Cabe citar, no entanto, que o coeficiente de determinação só é valido no caso de modelos lineares.

2.4. Método dos elementos finitos

Como o próprio nome do método sugere, o método dos elementos finitos, ou abreviadamente FEM (Finite Element Method) consiste em obter uma solução de um sistema físico a partir de um número finito de elementos [22]. Esse sistema, por sua vez, pode ser modelado como discreto ou contínuo. No caso discreto, o sistema é descrito por variáveis em um número finitos de pontos, ou seja, por um conjunto finito de equações algébricas. Como exemplo, pode-se citar um problema massa-mola composto por um número finito de molas interconectadas à massas pontuais das quais se pode obter diretamente (conhecido como método direto) as equações que governam o sistema. Sistemas discretos são comumente bem abordados em cursos introdutórios ao FEM. No entanto, boa parte dos problemas físicos são modelados como sistemas contínuos. No caso contínuo, o sistema é descrito por variáveis em um número infinito de pontos e a resposta do sistema é obtida com um conjunto de equações diferenciais. As leis da física para problemas dependentes do espaço e do tempo são geralmente expressas por equações diferenciais parciais (EDPs) e, para a grande maioria das geometrias e problemas, essas EDPs não podem ser resolvidas analiticamente. Em vez disso, uma aproximação das soluções dessas equações pode ser construída. Nesse trabalho, o método dos elementos finitos será utilizado para obter essas aproximações.

Descrição do método

Para a descrição do método, serão usadas as notas de Barbarulo [23]. Por critério de simplificação, seja um problema físico unidimensional descrito pela equação diferencial e condição de contorno abaixo.

$$-u''(x) = f(x)$$
 Eq. (13)
 $u(0) = u(L) = 0$

Seja v = v(x) uma função suave (*i.e.*, v pertence ao espaço de funções infinitamente diferenciáveis C^{∞}), denominada função teste. Multiplicando a equação diferencial pela função teste, integrando no domínio e integrando por partes, obtém-se

$$\int_{0}^{L} u'(x) v'(x) dx = \int_{0}^{L} f(x) v(x) dx$$
 Eq. (15)

Se uma solução u satisfaz o problema inicial, ela irá satisfazer o problema na forma integral. Nota-se que, se no problema inicial fosse requerido uma função u duas vezes diferenciável, na forma integral seria necessário obter uma função que seja no mínimo uma vez diferenciável. Por isso, essa formulação é chamada de formulação fraca.

O próximo passo é a aproximação da função u=u(x). Na proposta de Galerkin [22], faz-se:

$$u \approx u_h$$
 Eq. (16)

$$u_h(x) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \varphi_i(x)$$
 Eq. (17)

onde φ_i são chamadas de funções de base e α_i são os coeficientes para aproximar u_h . A Figura 7 ilustra três funções de base de diferentes graus.

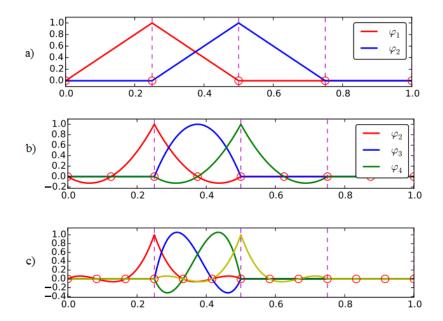


Figura 7 - Ilustração de funções de base (a) lineares (b) quadráticas e (c) cúbicas

Fonte: MARDAL e LANGTANGEN (2019)²⁴

Depois, faz-se $v(x)=\varphi_j(x)$ para todas as funções base. Substituindo na formulação integral, obtém-se a equação 18 abaixo.

$$\sum_{i}^{N} \int_{0}^{L} \alpha_{i} \varphi_{i}(x) \varphi_{j}(x) dx = \int_{0}^{L} f(x) \varphi_{j}(x) dx$$
 Eq. (18)
$$j = 1 \dots N$$

ou, de forma abreviada,

$$[K]{\alpha} = {F}$$
 Eq. (19)

onde

$$K_{ij} = \int_0^L \varphi_i(x)\varphi_j(x)dx$$
 Eq. (20)

$$F_j = \int_0^L f(x)\varphi_j dx$$
 Eq. (21)

$$\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_N]^T$$
 Eq. (22)

Equações para o problema proposto

Seja o equilíbrio de um corpo genérico tridimensional da Figura 8. O corpo é sujeito à forças de superfície f^{Sf} , forças de volume f^B , e forças concentradas R_C^i , onde i denota o ponto de aplicação da carga. Os deslocamentos do corpo medidos a partir da configuração indeformada são medidos no sistema de coordenadas X, Y, Z e são denotados por U, onde

$$\boldsymbol{U}(X,Y,Z) = \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}$$
 Eq. (23)

As deformações correspondentes de U são

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{XX} & \varepsilon_{YY} & \varepsilon_{ZZ} & \varepsilon_{XY} & \varepsilon_{YZ} & \varepsilon_{ZX} \end{bmatrix}^T$$
 Eq. (24)

e as tensões são

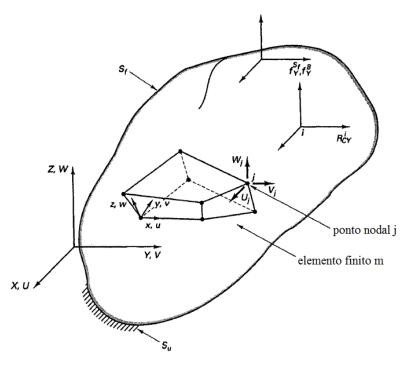
$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{XX} & \sigma_{YY} & \sigma_{ZZ} & \sigma_{XY} & \sigma_{YZ} & \sigma_{ZX} \end{bmatrix}^T$$
 Eq. (25)

onde,

$$\sigma = C\varepsilon + \sigma'$$
 Eq. (26)

em que \boldsymbol{C} é a matriz de elasticidade do material e $\boldsymbol{\sigma}'$ denota o estado inicial de tensão.

Figura 8 - Corpo genérico tridimensional



Fonte: BATHE (2019)²²

Pode-se usar o princípio dos trabalhos virtuais para a formulação do FEM. Usando o princípio dos trabalhos virtuais, as equações de equilíbrio, compatibilidade e constitutivas são satisfeitas. O princípio dos trabalhos virtuais estabelece que [22]:

$$\int_{V} \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^{T} \boldsymbol{\sigma} dV = \int_{V} \overline{\boldsymbol{U}}^{T} \boldsymbol{f}^{B} dV + \int_{S_{f}} \overline{\boldsymbol{U}}^{Sf} \boldsymbol{f}^{Sf} dS + \sum_{i} \overline{\boldsymbol{U}}^{i} \boldsymbol{R}_{C}^{i}$$
 (Eq. 27)

onde \overline{U} são os deslocamentos virtuais e $\overline{\varepsilon}$ são as deformações virtuais correspondentes. Em seguida, discretizando o volume V em m elementos finitos e usando o princípio dos trabalhos virtuais, pode-se finalmente formular [22]:

$$KU = R (Eq. 28)$$

Onde K é a matriz de rigidez global:

$$K = \sum_{m} \int_{V(m)} \mathbf{B}^{(m)^{T}} \mathbf{C}^{(m)} \mathbf{B}^{(m)} dV^{(m)}$$
 (Eq. 29)

R é o vetor de carregamento dado por

$$R = R_B + R_S - R_i + R_C \tag{Eq. 30}$$

onde,

$$\mathbf{R}_{B} = \sum_{m} \int_{V(m)} \mathbf{H}^{(m)}^{T} \mathbf{f}^{B(m)} dV^{(m)}$$
 (Eq. 31)

$$\mathbf{R}_{S} = \sum_{m} \int_{S_{1}^{(m)}, \dots, S_{q}^{(m)}} \mathbf{H}^{S(m)}^{T} \mathbf{f}^{S(m)} dS^{(m)}$$
 (Eq. 32)

$$\mathbf{R}_{i} = \sum_{m} \int_{V(m)} \mathbf{B}^{(m)T} \boldsymbol{\sigma}^{\prime(m)} dV^{(m)}$$
 (Eq. 33)

 R_C corresponde às cargas concentradas. $H^{(m)}$ é chamada de matriz de funções de interpolação, que é estabelecida a partir da escolha de um elemento, número de nós e graus de liberdade do elemento. $B^{(m)}$ e $H^{S(m)}$ são chamadas de matriz de deslocamento-deformação e matriz de interpolação dos deslocamentos de superfície, respectivamente. Ambas são obtidas através de $H^{(m)}$.

Condições Periódicas de contorno

Condições periódicas de contorno são utilizadas para garantir repetibilidade de uma célula unitária. Há várias formas de empregar condições de contorno periódicas e todas elas se caracterizam por [25]:

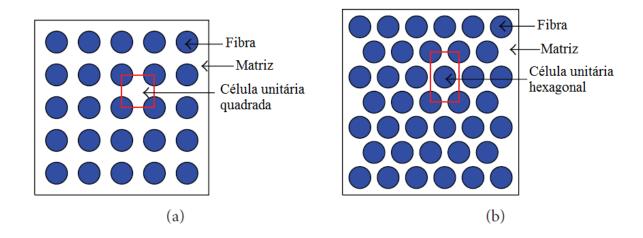
- 1. Garantir que o deslocamento relativo nas bordas da unidade simulada é idêntico à aqueles da borda oposta.
- 2. Os resultados obtidos independem do número de células usadas na simulação.

3. METODOLOGIA

3.1. Modelo físico

Nesse trabalho, será considerado um compósito reforçado por fibras unidirecionais. Pode-se encontrar na literatura dois tipos de abordagens para a geometria da seção transversal das fibras: seção quadrada e hexagonal [10]. A Figura 9 mostra a seção transversal de um compósito de fibras real e sua modelização.

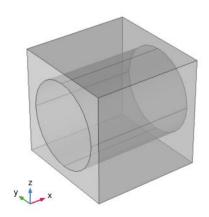
Figura 9 - Arranjo de fibras. (a) célula unitária quadrada e (b) célula unitária hexagonal



Fonte: BHASKARA (2014)¹⁰

Usando o software COMSOL Multiphysics, foi criado um modelo de célula unitária tridimensional em cubo de elemento de volume representativo (RVE) de seção quadrada, sendo a fibra de seção circular. Várias considerações foram feitas: os materiais da fibra e da matriz são considerados isotrópicos, homogêneos e linearmente elásticos. A presença de vazios ou microfraturas que podem ser originadas na fabricação desse tipo de compósito será desconsiderada. Também será considerado que a fibra e a matriz estão perfeitamente combinadas. Uma ilustração do modelo está na Figura 10.

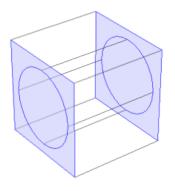
Figura 10 - Ilustração do modelo físico

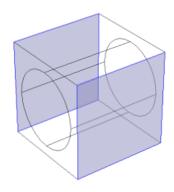


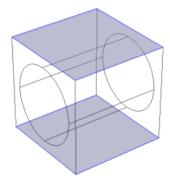
Fonte: Autor.

O RVE cúbido tem lado L, com um cilindro interno de raio r_f representando a fibra, cujo centro do cilindro é centro da face yz. Essa célula, por sua vez, se repete na estrutura do compósito. Para simular esse comportamento, condições de contornos periódicas foram aplicadas. A figura 11 ilustra as faces onde foram aplicadas as condições periódicas de contorno.

Figura 11 - Faces com condições periódicas de contorno







Fonte: Autor.

A partir de carregamentos em diferentes direções, pode-se obter as propriedades homogeneizadas do compósito. A homogeneização é obtida a partir das equações 34 e 35.

$$\bar{\varepsilon}_i = \int_V \varepsilon_i dV$$
 (Eq. 34)

$$\bar{\sigma}_i = \int_V \sigma_i dV$$
 (Eq. 35)

Assim, obtém-se o tensor de rigidez. Para materiais ortotrópicos, tem-se que a relação constitutiva é

$$\begin{bmatrix} \sigma_{1} \\ \sigma_{2} \\ \sigma_{3} \\ \sigma_{4} \\ \sigma_{5} \\ \sigma_{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{23} & C_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(C_{22} - C_{23})} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{1} \\ \varepsilon_{2} \\ \varepsilon_{3} \\ \varepsilon_{4} \\ \varepsilon_{5} \\ \varepsilon_{6} \end{bmatrix}$$
Eq. (36)

A partir do tensor homogeneizado C, obteve-se o módulo de elasticidade longitudinal E_1 , módulo de elasticidade transversal E_2 e o módulo de cisalhamento G_{12} fazendo [10]:

$$E_1 = C_{11} - \frac{2C_{12}^2}{(C_{22} + C_{23})}$$
 Eq. (37)

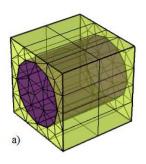
$$E_2 = \frac{\left[c_{11}(c_{22} + c_{23}) - 2c_{12}^2\right](c_{22} - c_{23})}{\left(c_{11}c_{22} - c_{12}^2\right)}$$
Eq. (38)

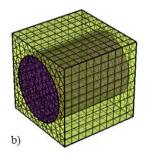
$$G_{12} = \frac{1}{2}(C_{22} - C_{23})$$
 Eq. (39)

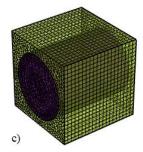
3.2. Convergência do FEM

Uma vez que serão realizadas inúmeras simulações, é preciso escolher a malha de forma a balancear tempo computacional e a precisão. Para gerar a malha, usou-se o sistema de geração estatístico do COMSOL, com elementos quadriláteros no interior do RVE e triangulares nas faces da fibra. Essa configuração permitiu acelerar significativamente o tempo de processamento com pouca diferença nos erros de convergência. Primeiro, uma simulação usando funções de interpolação de terceiro grau, tamanho máximo D_{max} de cada elemento de 5% de L, sendo L o lado do RVE cúbico, e assumiu-se essa solução como sendo a solução exata. O tamanho máximo D_{max} se refere a maior distância entre dois pontos de cada elemento. Em seguida, reduziu-se o grau do polinômio interpolador para de segundo grau e variou-se o tamanho máximo dos elementos, obtendo assim diferentes soluções para diferentes tamanhos da malha. A Figura 12 ilustra malhas geradas para a) $\frac{D_{max}}{L} = 0.5$ b) $\frac{D_{max}}{L} = 0.1$ c) $\frac{D_{max}}{L} = 0.05$.

Figura 12 - Malhas geradas para diferentes valores de D_{max}/L







Fonte: Autor.

3.3. Comparação com modelos analíticos

Simulando um compósito reforçado com fibra de vidro, obteve-se dados de módulo de elasticidade longitudinal E_1 , transversal E_2 , e o módulo de cisalhamento G_{12} e comparou-se com os modelos analíticos. Para as simulações de convergência de malha e de comparação com os modelos analíticos, considerou-se um compósito de fibra de vidro como fase de reforço e epóxi como matriz. As propriedades desses materiais estão na Tabela 1.

Tabela 1 - Propriedades da matriz e fibra de vidro

Propriedade	Fibra de Vidro	Matriz de Epóxi
Densidade $(\frac{g}{cm^3})$	2,5	1,15
Módulo de Elasticidade (GPa)	72,8	3,76
Módulo de Cisalhamento (GPa)	30,4	1,28
Coeficiente de poisson	0,2	0,39

Fonte: ROBERT (1999)¹¹

3.4. Geração dos dados

Primeiramente, 1000 combinações aleatórias de dados foram geradas, variando-se a fração volumétrica, módulo de elasticidade e cisalhamento da fibra e da matriz. Essas combinações foram geradas como distribuições uniformes dentro dos intervalos indicados na Tabela 2.

Tabela 2 – Intervalo de propriedades da fibra e matriz para simulações

Propriedade	Mínimo	Máximo
Fração volumétrica	0,05	0,75
Módulo de elasticidade da matriz (Gpa)	5	10
Módulo de cisalhamento da matriz (Gpa)	1	5
Módulo de elasticidade da fibra (Gpa)	50	150
Módulo de cisalhamento da fibra (Gpa)	5	50

Fonte: Autor.

Para variar a fração volumétrica, o raio da fibra r_f foi parametrizado em função de v_f simplesmente fazendo

$$r_f = \sqrt{\frac{v_f}{\pi \cdot L}} = \sqrt{\frac{v_f \cdot V}{\pi \cdot L}} = \sqrt{\frac{v_f \cdot L^2}{\pi}}$$
 Eq. (40)

Em seguida, essas combinações foram carregadas no software COMSOL, onde obteve-se os resultados de módulo de elasticidade longitudinal E_1 , transversal E_2 e o módulo de cisalhamento G_{12} do compósito para cada uma dessas simulações. Como elementos finitos, foram utilizados elementos quadriláteros e funções interpoladoras de segundo grau. Uma visualização das simulações obtidas se encontra na Figura 13.

Figura 13 - Ilustração do conjunto de dados obtidos

	Parâmetros				Resultados			
	v_f	E_m	G_m	E_f	G_f	E1	E2	G12
0	0.48	7.600000e+09	4.170000e+09	1.390000e+11	1.800000e+10	7.067121e+10	1.856350e+10	7.292388e+09
1	0.17	8.910000e+09	1.270000e+09	1.400000e+11	4.600000e+10	3.119393e+10	1.166959e+10	5.905773e+09
2	0.36	9.040000e+09	4.580000e+09	1.420000e+11	2.500000e+10	5.690500e+10	1.676563e+10	7.539605e+09
3	0.59	6.250000e+09	3.110000e+09	5.100000e+10	3.000000e+10	3.265232e+10	1.695101e+10	9.152172e+09
4	0.26	9.800000e+09	2.610000e+09	8.800000e+10	2.600000e+10	3.013148e+10	1.447014e+10	7.017454e+09

Fonte: Autor.

3.5. Árvore de decisão e AdaBoost

Primeiro, obteve-se um modelo usando árvore de decisão e depois um modelo usando *AdaBoost* com árvores de decisão. Para treinar os algoritmos, dividiu-se o conjunto de dados em outros dois conjuntos: conjunto de treino e conjunto de teste. A divisão foi feita de forma aleatória na proporção 80/20, ou seja, 800 pontos para treino e 200 para teste. Diversas árvores de profundidade *p* foram treinadas, avaliando-se o erro percentual absoluto da previsão no

conjunto de treino e de teste com o objetivo de obter a melhor profundidade, evitando assim overfitting. Estabeleceu-se como profundidade ótima da árvore quando $r_p < 0.05$, sendo r_p foi definido por:

$$r_p = \left| \frac{e^{p-1} - e^p}{e^{p-1}} \right|$$
 Eq. (41)

onde e^p é o erro percentual absoluto da árvore de profundidade p.

Com o AdaBoost, fez-se a análise da profundidade ótima da mesma forma descrita anteriormente, onde usou-se 50 modelos de árvore de decisão.

4. RESULTADOS

4.1.Convergência de malha

A Figura 14 ilustra o erro percentual absoluto (MAPE) das soluções obtidas com elementos quadráticos em relação à solução assumida como exata. Assim, para gerar os dados que serão utilizados no treinamento do algoritmo de aprendizado de máquina, foi escolhido $\frac{D_{max}}{L} = 0.1$, o que resultou em aproximadamente 100 simulações por hora e um erro percentual menor que 5% em relação à solução assumida como exata.

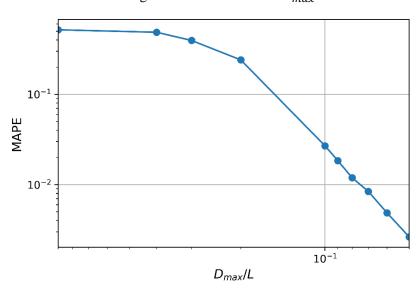


Figura 14 - MAPE versus D_{max}/L

Fonte: Autor.

4.2. Previsão com modelos analíticos

Na figura 15, encontram-se os resultados das propriedades da fibra em relação às propriedades da matriz para cada um dos modelos analíticos e de simulação. Como se pode notar, os modelos analíticos preveem bem o módulo de elasticidade na direção longitudinal. No entanto, o mesmo não pode ser dito em relação à E_2 e G_{12} . No caso de G_{12} , todos os modelos subquantificam o módulo de cisalhamento e tendem a divergir na medida que a fração volumétrica da fibra aumenta. No caso em que a fração volumétrica é 70%, por exemplo, essa diferença chega a ser maior que o dobro em relação à regra das misturas.

14 -FEM - ROM Chamis 12 Halpin-Tsai 10 E_1/E_{m} 0.4 V_f 0.3 0.5 FEM ROM Chamis Halpin-Tsai 0.4 **V**f 0.1 0.2 0.3 0.5 0.6 0.7 FEM ROM Chamis Halpin-Tsai 0.4 **V**f 0.7 0.3 0.5 0.6

Figura 15 - Modelos analíticos e solução obtida com FEM

Fonte: Autor

4.3. Decision tree

Variando-se a profundidade da árvore e obtendo os erros percentuais absolutos para o conjunto de treino e de teste, pode-se obter o gráfico da Figura 16.

0.14
0.12
0.10
0.08
0.08
0.04
0.02
0.00
4 6 8 10 12 14

Figura 16 - MAPE versus profundidade da árvore para conjunto de treino e teste

Fonte: Autor

Da figura 16, pode-se observar que aumentando a profundidade da árvore, o erro do conjunto de treino sempre diminui, uma vez que novos ramos são criados. No entanto, o mesmo não acontece para o erro no conjunto de teste. Na medida em que o erro para o conjunto de teste se mantém constante, obtém-se um modelo de árvore mais complexo (de maior profundidade) porém sem melhorar a previsão para dados não usados no treinamento do algoritmo. Para profundidades de 10 a 30, a Figura 17 ilustra melhor a oscilação do erro no conjunto de teste para profundidades maiores.

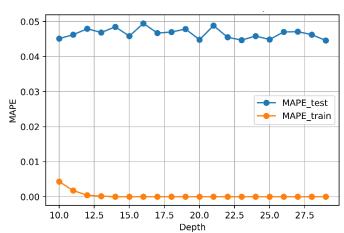


Figura 17 - MAPE versus profundidade de árvore - intervalo expandido

Fonte: Autor

4.4. Boosted Decision Tree

Por questão de breviedade, serão discutido os resultados para o módulo de elasticidade transversal E_2 , uma vez que a mesma análise se extende para E_1 e G_{12} . A profundidade máxima da árvore foi estabelecida quando o erro para o conjunto de teste não diminui mais do que 5%. No caso de E_2 , obteve-se uma profundidade de 9. Obteve-se então uma nova árvore de profundidade 9 com novos dados de treino divididos aleatoriamente. A Figura 18 mostra os erros percentuais absolutos para o módulo de elasticidade E_2 para cada um dos modelos analíticos e para a *Boosted Decision Tree* (BDT) em função da fração volumétrica Pode-se observar que os erros da árvore da regressão são baixos (média em torno de 3,6%) e, ao contrário dos modelos analíticos, os erros não variam em função da fração volumétrica. O erro para a regra das misturas, por exemplo, chega a ser maior que 30% para frações volumétricas altas.

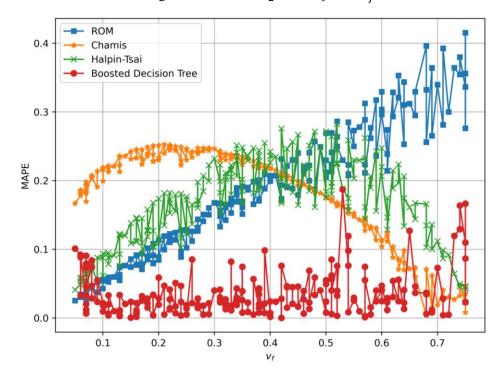


Figura 18 - MAPE E_2 em função de v_f

Fonte: Autor.

Tabela 3 - Erros percentuais absolutos médios para cada um dos modelos e propriedades (%)

	E1	E2	G12
Boosted Decision Tree	3.641	3.505	3.679
Decision Tree	5.894	4.537	6.454
Halpin-Tsai	0.003	16.196	26.212
Chamis	0.003	18.733	29.120
ROM	0.003	17.527	35.457

Fonte: Autor.

Os erros absolutos médios para cada um dos modelos se encontra na Tabela 3. Somente usando uma árvore de decisão, obteve-se um erro médio de 5,6%, enquanto usando *AdaBoost* com 50 árvores de decisão, esse erro cai para 3,6%. Para o módulo de elasticidade longitudinal, todos os modelos analíticos predizem bem, com erros menores 0.003% (os valores foram truncados na terceira casa decimal, sendo arredondados para cima). Isso em parte decorre das hipóteses realizadas inicialmente da não presença de fissuras, vazios e perfeita união da fibra e da matriz. Assim, o módulo de elasticidade na direção longitudinal do compósito acaba sendo uma mera ponderação dos módulos de elasticidade da fibra e da matriz. Inclusive, pode-se inferir que boa parte dessa diferença de 0,003% é proveniente, na verdade, de erros na simulação de elementos finitos. No módulo de elasticidade transversal e de cisalhamento, o modelo BDT é significativamente melhor na previsão das propriedades mecânicas. Se comparado com a regra das misturas, por exemplo, essa diferença chega a ser maior que 30 pontos percentuais.

5. CONCLUSÕES

Nesse trabalho, foi utilizado o método dos elementos finitos em um elemento de volume representativo de um compósito reforçado com fibra a fim de obter os módulos de elasticidade longitudinal, transversal e o módulo de cisalhamento. Condições periódicas de contorno foram aplicadas e 1000 simulações foram realizadas, variando-se a fração volumétrica e as propriedades mecânicas da matriz e da fibra. Posteriormente, um algoritmo de aprendizado de máquina, *Decision Tree* e uma variação *Boosted* desse algoritmo foram treinados em 1000 simulações de elementos finitos a fim de obter um modelo de previsão para as propriedades do compósito. Os resultados obtidos foram comparados com três modelos analíticos encontrados na literatura.

Obteve-se um erro percentual absoluto médio de 3,5% e 3,6% para o módulo de elasticidade transversal e módulo de cisalhamento, respectivamente, enquanto os modelos analíticos preveem essas propriedades com erros maiores que 15%, chegando a mais de 35% no caso da regra das misturas. Além disso, os erros provenientes do modelo de aprendizado de máquina independem da fração volumétrica do compósito. O modelo obtido com *Boosted Decision Tree* só perde na previsão do módulo de elasticidade longitudinal, porém com um erro percentual ainda baixo (3,6%).

Como sugestões para trabalhos futuros, sugere-se:

- Considerar a fibra como transversalmente isotrópica (como no caso de fibra de carbono).
- Incluir a presença de vazios distribuídos aleatoriamente no RVE.
- Gerar mais dados de simulações, com intervalos maiores para as propriedades da matriz.

6. REFERÊNCIAS

- [1] MOURA, Marcelo F.S.F. de; MORAIS, Alfredo B. de; MAGALHÃES, António G. de. Materiais Compósitos Materiais, Fabrico e Comportamento Mecânico. 2010.
- [2] VIGNOLI, L. L. et al. Comparative analysis of micromechanical models for the elastic composite laminae. *Composite Part B: Engineering*, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.106961. Acesso em: jan. 2021.
- [3] PATHAN, M. V.; TAGARIELLI, V. L.; PATSIAS, S. Numerical predictions of the anisotropic viscoelastic response of uni-directional fibre composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.compositesa.2016.10.029.
- [4] SHALEV-SHWARTZ S.; BEN-DAVID S. Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms, 2014.
- [5] AGRAWAL A. et al., Exploration of data science techniques to predict fatigue strength of steel from composition and processing parameters, 2014.
- [6] ABUEIDDA, D. W.; *et al.* Prediction and optimization of mechanical properties of composites using convolutional neural networks, 2019.
- [7] CHEN, C.T.; GU G. Machine learning for composite materials. Department of Materials Science and Engineering, University of California, 2019.
- [8] NIJSSEN, R.P.L. Composite Materials an introduction. 1. ed. Netherlands: Inholland University of Applied Sciences; 2015.
- [9] KAW, A. K. Mechanics of Composite Materials. 2. ed., 2006. ISBN 0-8493-1343-0.
- [10] BHASKARA S. et al. Effect of Fiber Geometry and Representative Volume Element on Elastic and Thermal Properties of Unidirectional Fiber-Reinforced Composites, 2014.
- [11] ROBERT M. J. Mechanics of composite materials. 2 Ed., 1999.
- [12] HALPIN J.C.; TSAI S.W. Effects of environmental factors on composite materials, 1969.
- [13] CHAMIS C.C. Mechanics of composite materials: past, present, and future. 1989.
- [14] DEY A. Machine Learning Algorithms: A Review, 2016.

- [15] BARRETO, C. A. S. Uso de técnicas de aprendizado de máquina para identificação de perfis de uso de automóveis baseado em dados automotivos, 2018.
- [16] CZAJKOWSKI M.; KRETOWSKI M. The role of decision tree representation in regression problems Anevolutionary perspective, 2016.
- [17] BOWLES M. Machine Learning in Python: Essential Techniques for Predictive Analysis, 2015.
- [18] LOH W.Y. Classification and regression trees, 2011.
- [19] PEDREGOSA, F. et al.; Scikit-learn: Machine learning in Python. Journal of machine learning research, 2011. Disponível em: https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/tree/plot_tree_regression.html. Acesso em: Janeiro de 2020.
- [20] DEISENROTH, M.P. et al. Mathematics for machine learning. Cambridge University Press, 2020.
- [21] FREUND, Y., SCHAPIRE, R.E. Experiments with a new boosting algorithm. Proceedings of the Thirteenth International Conference on Machine Learning, 1996.
- [22] BATHE K. J. Finite Element Procedures in Engineering Analysis, 1982. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- [23] PUEL, G.; BARBARULO, A. Simulation of multiphysic couplings with FEM, 2020. CentraleSupélec.
- [24] MARDAL K.A.; LANGTANGEN H.P. Introduction to Numerical Methods for Variational Problems, 2019.
- [25] MIZZI L. et al. Implementation of periodic boundary conditions for loading of mechanical metamaterials and other complex geometric microstructures using finite element analysis, 2020.
- [26] HALPIN J.C.; KARDOS J.L. The Halpin-Tsai equations: a review, 1976.