

**Leandro Fontoura Cupertino**

**Modelagem do módulo de Young em  
nanocompósitos através de Inteligência  
Computacional**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica do Departamento de Engenharia Elétrica da PUC-Rio

Orientador : Prof. Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco  
Co-Orientador: Prof. José Roberto Moraes d'Almeida

Rio de Janeiro  
Agosto de 2009

**Leandro Fontoura Cupertino**

**Modelagem do módulo de Young em  
nanocompósitos através de Inteligência  
Computacional**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica do Departamento de Engenharia Elétrica do Centro Técnico Científico da PUC–Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Prof. Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco**

Orientador  
Departamento de Engenharia Elétrica — PUC–Rio

**Prof. José Roberto Moraes d’Almeida**

Co–Orientador  
Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia —  
PUC–Rio

**Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Junior**

Programa de Engenharia Química — UFRJ

**Prof. Flávia Cassiola**

Petrobrás

**Prof. Marley M. B. R. Vellasco**

Departamento de Engenharia Elétrica — PUC–Rio

**Prof. José Eugênio Leal**

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico — PUC–Rio

Rio de Janeiro, 17 de Agosto de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

### **Leandro Fontoura Cupertino**

Graduou-se em Engenharia Elétrica na Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

#### Ficha Catalográfica

Cupertino, Leandro Fontoura

Modelagem do módulo de Young em nanocompósitos através de Inteligência Computacional / Leandro Fontoura Cupertino; orientador: Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco; co-orientador: José Roberto Moraes d'Almeida. — 2009.

82 f.: il.(color.) ; 30 cm

Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

Inclui bibliografia.

1. Engenharia Elétrica – Teses. 2. Nanocompósitos. 3. Módulo de Young. 4. Redes neurais artificiais. 5. Algoritmos genéticos. I. Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti. II. d'Almeida, José Roberto Moraes. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

CDD: 621.3

## Agradecimentos

Aos meus pais pelos conselhos e constante incentivo ao estudo durante toda minha vida.

À minha namorada Nicole pelo amor, paciência e ajuda nas revisões.

Aos meus orientadores professores Marco Aurélio Pacheco e José Roberto d'Almeida pelo estímulo e parceria na realização desse trabalho.

Aos amigos Omar Paranaíba, Anderson Singulani e Iury Steiner, pelo apoio e pelas discussões sobre o tema.

Aos meus amigos e colegas da PUC-Rio, do ICA e da UERJ que sempre me apoiaram.

Ao CNPq e à PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

## Resumo

Cupertino, Leandro Fontoura; Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti; d'Almeida, José Roberto Moraes. **Modelagem do módulo de Young em nanocompósitos através de Inteligência Computacional**. Rio de Janeiro, 2009. 82p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Materiais compósitos são a base de muitos produtos, devido à sua capacidade de aperfeiçoar certas propriedades. Recentemente, a utilização de nanocargas na fabricação de compósitos vem sendo amplamente estudada, pois a partir de concentrações baixas de nanocargas, as propriedades começam a melhorar, possibilitando a criação de materiais leves e com uma grande gama de propriedades. Uma das propriedades mecânicas mais estudadas é o módulo de Young, que mensura a rigidez de um material. Alguns dos modelos existentes para essa propriedade em nanocompósitos pecam na precisão ou são limitados em função da fração máxima de nanopartículas admissível no modelo. Outros se adequam apenas a uma determinada combinação de matriz/carga preestabelecida. O objetivo deste trabalho é utilizar Redes Neurais Artificiais como um aproximador capaz de modelar tal propriedade para diversas matrizes/cargas, levando em consideração suas características, sem perder a precisão. A validação do aproximador é realizada comparando o resultado com outros modelos propostos na literatura. Uma vez validada, utiliza-se Algoritmos Genéticos em conjunto com tal rede para definir qual seria a configuração ideal para três casos de estudo: um que maximize o valor do módulo de Young, outro que maximize o módulo relativo e um terceiro que maximize o módulo relativo e minimize a quantidade de carga utilizada, diminuindo os custos de projeto. As técnicas de Inteligência Computacional empregadas na modelagem e síntese de materiais nanoestruturados se mostraram boas ferramentas, uma vez que geraram uma boa aproximação dos dados utilizados com erros inferiores a 5%, além de possibilitarem a determinação dos parâmetros de síntese de um material com o módulo de Young desejado.

## Palavras-chave

Nanocompósitos; módulo de Young; redes neurais artificiais; algoritmos genéticos.

## Abstract

Cupertino, Leandro Fontoura; Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti (Advisor); d'Almeida, José Roberto Moraes. **Modeling Young's modulus of nanocomposites through Computational Intelligence**. Rio de Janeiro, 2009. 82p. MSc Dissertation — Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Composite materials became very popular due to its improvements on certain properties achieved from the mixture of two different components. Recently, the use of nanofillers in the manufacture of composites has been widely studied due to the improvement of properties at low concentrations of nanofillers, enabling the creation of lightweight materials. Some of the existing models for the Young modulus of the nanocomposites have low accuracy or are limited in terms of the maximum filler fraction possible. Others are appropriate only for a given combination of matrix and filler. The objective of this work is to use Artificial Neural Networks as a function approximation method capable of modeling such property for various matrix/nanofillers, taking into account their characteristics, without losing accuracy. The validation of this approximator is performed comparing its results with other models proposed in the literature. Once validated, a Genetic Algorithm is used with the Neural Network to define which would be the ideal setting for three case studies: one that maximizes the value of composite's Young's modulus, other that maximizes the relative modulus and a third one that maximizes the relative modulus and minimizes the amount of load used, reducing the cost of project. Computational Intelligence techniques employed on the modeling and synthesis of nanostructured materials proved to be adequate tools, since it generated a good approximation of the data with errors lower than 5%, and determined the material's parameters for synthesis with the desired Young's modulus.

## Keywords

Nanocomposites; Young's modulus; artificial neural networks; genetic algorithms.

# Sumário

1	Introdução	15
1.1	Motivação	17
1.2	Objetivos	18
1.3	Organização do Trabalho	18
2	Materiais Compósitos	20
2.1	Nanocompósitos	21
2.2	Matrizes	22
2.3	Partículas	23
2.3.1	Esféricas	24
2.3.2	Baculiformes	24
2.3.3	Lamelares	25
2.4	Propriedades beneficiadas	26
2.5	Modelagem do Módulo de Young	28
2.5.1	Regra das misturas	29
2.5.2	Modelos empíricos	30
3	Inteligência Computacional	32
3.1	Redes Neurais	32
3.1.1	Histórico	33
3.1.2	Estrutura de uma Rede	34
3.1.3	Tratamento dos dados	37
3.1.4	Treinamento	38
3.2	Algoritmos Genéticos	43
3.2.1	Representações	45
3.2.2	Operadores	46
3.2.3	Múltiplos objetivos	47
4	Modelagem e síntese de materiais assistida por IC	49
4.1	Modelagem do módulo de Young por redes neurais	49
4.1.1	Aquisição e análise dos dados	50
4.1.2	Tratamento dos dados	52
4.1.3	Configuração dos experimentos	54
4.2	Comparação entre modelos	55
4.3	Síntese de Materiais por Algoritmos Genéticos	55
5	Resultados	57
5.1	Redes Neurais	57
5.1.1	Tratamento dos dados	57
5.1.2	Escolha da melhor RNA	58
5.1.3	Comportamento dos nanocompósitos	64
5.2	Comparação entre modelos	67
5.3	Algoritmo Genético	68

6	Conclusão e trabalhos futuros	72
A	Dados experimentais	79



## Lista de figuras

1.1	Importância relativa dos metais, polímeros, compósitos e cerâmicas em função do tempo.	16
1.2	Utilização de nanocompósitos na indústria em 2005 e projeção de mercado para 2011. Valores em milhões de dólares.	17
2.1	Comparação entre materiais monolíticos convencionais e materiais compósitos.	21
2.2	Arquitetura molecular dos polímeros.	23
2.3	Estrutura molecular dos nanotubos de carbono: armchair (a), zig-zag (b) e chiral (c).	24
2.4	Estrutura molecular da montmorilonita.	26
2.5	Permeabilidade a gás em polímeros (a) e nanocompósitos (b).	27
2.6	Teste de tração em materiais.	27
2.7	Curva tensão por deformação em um material.	28
2.8	Curva tensão-deformação de um compósito de fibra contínua, mostrando como ela está relacionada com as das fibras e da matriz.	29
3.1	Representação gráfica de um neurônio artificial.	34
3.2	Exemplo de uma rede neural não recorrente.	36
3.3	Exemplo de uma rede neural recorrente com duas entradas e duas saídas.	37
3.4	Treinamento supervisionado de uma rede neural.	39
3.5	Validação cruzada. Ilustração de dois momentos distintos do treinamento: generalização da rede (a) e supertreinamento (b).	43
3.6	Dependência entre o ponto inicial e o erro final obtido.	44
3.7	Cruzamento de um ponto.	47
4.1	Representação esquemática da RNA desejada.	50
4.2	Histograma e o percentual cumulativo de cada uma das características dos compósitos.	52
4.3	Representação esquemática da solução do AG.	56
5.1	Normalizações referentes à classe e ao módulo de Young da matriz.	58
5.2	Normalização referente à classe da partícula.	58
5.3	Normalização uniforme e por partes da fração mássica da partícula.	59
5.4	Normalização uniforme e por partes do diâmetro da partícula.	59
5.5	Normalização uniforme e por partes da razão de aspecto da partícula.	59
5.6	Normalização uniforme e por partes do módulo de Young relativo do compósito.	60
5.7	Resultados da melhor rede para os conjuntos de treinamento, validação e teste.	64
5.8	Correlação entre os valores alvo e os obtidos pela melhor rede para cada conjunto.	65
5.9	Módulo relativo do nanocompósito em função da concentração da carga.	66

5.10	Curvas de nível referentes ao $E_r$ , em função do diâmetro e concentração de $\text{CaCO}_3$ em iPP.	66
5.11	Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de PA6/Nanoargila.	67
5.12	Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de SBR/Nanoargila.	68
5.13	Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de NBR/Nanoargila.	69
5.14	Aplicação dos modelos analíticos e da RNA ao compósito de CNBR/Nanoargila.	69

## Lista de tabelas

3.1	Funções de ativação e suas respectivas derivadas.	35
4.1	Polímeros utilizados como matriz no desenvolvimento da rede.	51
4.2	Partículas utilizadas como carga no desenvolvimento da rede.	51
4.3	Enumeração das matrizes e cargas utilizadas.	53
4.4	Valores utilizados para a normalização linear uniforme e por partes.	54
4.5	Diferenças entre experimentos.	54
4.6	Configuração comum a todos os experimentos.	55
4.7	Diferenças entre conjuntos.	56
5.1	Resultados do experimento 1 (classes com normalização linear).	60
5.2	Resultados do experimento 2 (classes com normalização por partes).	61
5.3	Resultados do experimento 3 (propriedades intrínsecas com normalização linear).	62
5.4	Resultados do experimento 4 (propriedades intrínsecas com normalização linear).	62
5.5	Comparação entre os algoritmos de treinamento	63
5.6	Parâmetros de configuração utilizados na execução do AG.	70
5.7	Resultados dos três casos de estudo do AG.	70
A.1	Dados retirados de tabelas disponíveis na literatura.	79
A.2	Dados retirados de tabelas disponíveis na literatura. (continuação)	80
A.3	Dados retirados de gráficos disponíveis na literatura.	81
A.4	Dados retirados de gráficos disponíveis na literatura. (continuação)	82

## Sumário de Notações

### Notações Gerais

$\nu$	Coefficiente de Poisson
$E_c$	Módulo do compósito
$E_d$	Módulo de Young da fase dispersa
$E_m$	Módulo de Young da matriz
$E_r$	Módulo de Young relativo
$G$	Módulo de cisalhamento
$K$	Módulo volumétrico
$m_d/m_c$	Fração mássica da fase dispersa
$ID_d$	Identificação da fase dispersa
$ID_m$	Identificação da matriz
% m/m	Percentual mássico
% v/v	Percentual volumétrico
AG	Algoritmos Genéticos
IC	Inteligência Computacional
MAPE	Erro percentual médio absoluto
MSE	Erro quadrático médio
RNA	Redes Neurais Artificiais
SSE	Soma dos erros quadráticos
$D_d$	Diâmetro da fase dispersa (carga)
$RA_d$	Razão de aspecto da fase dispersa (carga)

### Matrizes

CNBR	Borracha nitrílica carboxilada
E-glass-PP	Polipropileno com fibras de vidro
iPP	Polipropileno isotático
N66	Náilon 66
NBR	Borracha de nitrilo butadieno
OS	Poliestireno
PA6	Poliamida 6
PE	Polietileno
PLLA	Ácido L-polilático
PMMA	Polimetilmetacrilato
PP	Polipropileno
PTFE	Politetrafluoretileno
PU	Poliuretano
PVC	Cloreto de Polivinila
SBR	Borracha de estireno-butadieno
UP	Poliéster não saturado

## Cargas

CaCO <sub>3</sub>	Carbonato de cálcio
CB	Negro de fumo
CNF	Nanofibra de carbono
CNT	Nanotubo de carbono
DWCNT	Nanotubo de carbono de parede dupla
DWCNT-NH <sub>2</sub>	Nanotubo de carbono de parede dupla aminofuncionalizado
g-HAP	Hidrocarboneto aromático enxertado
HAP	Hidrocarboneto aromático
MMT	Montmorilonita
MWCNT	Nanotubo de carbono de paredes múltiplas
MWCNT-NH <sub>2</sub>	Nanotubo de carbono de paredes múltiplas aminofuncionalizado
SiO <sub>2</sub>	Sílica (dióxido de silício)
SWCNT	Nanotubo de carbono de parede única
TiO <sub>2</sub>	Titânia (dióxido de titânio)

*Size matters not. Look at me. Judge me by my  
size, do you?*

**Master Yoda**, *Star Wars Episode V: The Empire Strikes Back*.