



Lara Cristina Pereira de Araújo

Previsão do acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de metais policristalinos baseado em Aprendizado de Máquina

Dissertação de Mestrado

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

Orientador: Prof. Helon Vicente Hultmann Ayala
Coorientador: Prof. Renato Bichara Vieira

Rio de Janeiro
Setembro 2023



Lara Cristina Pereira de Araújo

Previsão do acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de metais policristalinos baseado em Aprendizado de Máquina

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo:

Prof. Helon Vicente Hultmann Ayala

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

Prof. Renato Bichara Vieira

Coorientador

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

Prof. Marco Antônio Meggiolaro

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

Prof. Daniel Mauricio Muñoz Arboleda

FGA — Universidade de Brasília

Rio de Janeiro, 22 de setembro de 2023

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

Lara Cristina Pereira de Araújo

Graduou-se em Engenharia Mecânica no UDF — Centro Universitário do Distrito Federal em 2019.

Ficha Catalográfica

Araújo, Lara Cristina Pereira de

Previsão do acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de metais policristalinos baseado em Aprendizado de Máquina / Lara Cristina Pereira de Araújo; orientador: Helon Vicente Hultmann Ayala; coorientador: Renato Bichara Vieira. – 2023.

65 f.: il. color.; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2023.

Inclui bibliografia

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Acúmulo de deformação plástica. 3. Aprendizado de máquina. 4. Contornos de grãos. 5. PCA. I. Ayala, Helon Vicente Hultmann. II. Vieira, Renato Bichara. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

A minha mãe, irmã, família e ao meu namorado, Leonel,
pelo apoio e encorajamento.

Agradecimentos

A Deus e a Virgem Maria Santíssima por estar sempre comigo, me fortalecendo e me conduzindo durante todo o trabalho.

A minha mãe, Maria dos Anjos, pela educação, amor, carinho e cuidado de sempre.

Ao meu namorado, Leonel, por todo suporte, compreensão, apoio e cuidado durante todo o período do trabalho, seu apoio foi fundamental durante esse processo.

A minha irmã, Cristiane, pelo suporte e entender tudo o que passei durante esse período.

A minhas tias, Alvina e Angelina, pelo apoio e força que me deram nesse período.

Aos meus amigos da PUC-Rio, Lara Alvim e Guilherme Bessa, por toda ajuda nesse processo.

Aos meus orientadores, Helon e Renato, pela ajuda, paciência, estimo e parceria na realização deste trabalho.

À PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, o que fez com que esse trabalho pudesse ser realizado.

A todos os meus familiares e amigos que de alguma forma ou de outra me estimularam e ajudaram nesse processo.

“O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior — Brasil (CAPES) — Código de Financiamento 001”

Resumo

Araújo, Lara Cristina Pereira de; Ayala, Helon Vicente Hultmann (Orientador); Vieira, Renato Bichara (Coorientador). **Previsão do acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de metais policristalinos baseado em Aprendizado de Máquina**. Rio de Janeiro, 2023. 65p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Métodos de aprendizado de máquina vêm sendo bastante utilizados na área de mecânica dos sólidos devido ao grande volume de dados disponíveis na literatura. A motivação deste trabalho foi o estudo do acúmulo de deformação plástica na escala de grãos, pois o uso do aprendizado de máquina pode ser uma significativa contribuição para criar modelos capazes de prever o acúmulo de deformações. O objetivo deste trabalho foi aprimorar a previsão do acúmulo de deformação plástica propondo um novo método de previsão de acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de um material policristalino, usando modelos de aprendizado de máquina. Este trabalho utilizou-se de dados experimentais da literatura para estruturar três bancos de dados, os que consideraram somente os contornos de grãos. Nas previsões foram utilizados os seguintes métodos: *Decision Tree*, *Random Forest*, *Stochastic Gradient Descent*, *K-Nearest Neighbors*, *Gradient Boosting Regressor* e Análise de Componentes Principais (PCA). Na avaliação dos modelos foram empregados os métodos de validação cruzada e reamostragem de *Monte Carlo*. As métricas de erro aplicadas foram o coeficiente de determinação (R^2) e o coeficiente de correlação de Pearson (R). Os resultados apontaram que as previsões foram coerentes e de boa qualidade, melhorando os valores médios do coeficiente de Pearson em aproximadamente 30% comparados aos valores da literatura. Para o R^2 a média de valores alcançada foi de 0.85. Conclui-se que o uso do método de aprendizado de máquina se mostra confiável na previsão do acúmulo de deformação plástica no contorno do grão de um material policristalino.

Palavras-chave

Acúmulo de deformação plástica; Aprendizado de máquina; Contornos de grãos; PCA.

Abstract

Araújo, Lara Cristina Pereira de; Ayala, Helon Vicente Hultmann (Advisor); Vieira, Renato Bichara (Co-Advisor). **Prediction of plastic strain accumulation at grain boundaries of polycrystalline metals based on Machine Learning**. Rio de Janeiro, 2023. 65p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Machine learning methods have been widely used in the area of solid mechanics due to the large volume of data available in the literature. The motivation for this work was the study of the accumulation of plastic strain at the grain scale. Because the use of machine learning can be a significant contribution to creating models capable of predicting the accumulation of deformation. The objective of this work was to improve the prediction of plastic strain accumulation by proposing a new method for predicting the accumulation of plastic strains in grain boundaries of a polycrystalline material, using machine learning models. This work uses experimental data from the literature to structure three databases, which only consider grain boundaries. The following methods were used in the predictions: Decision Tree, Random Forest, Stochastic Gradient Descent, K-Nearest Neighbors, Gradient Boosting Regressor, and Principal Component Analysis (PCA). Monte Carlo cross-validation and resampling methods were used to evaluate the models. The error metrics applied were the coefficient of determination (R^2) and the Pearson correlation coefficient (R). The results indicate that the predictions were coherent and of good quality, improving the average Pearson coefficient values by approximately 30% compared to literature values. For R^2 , the average value achieved was 0.85. It is concluded that the use of the machine learning method proves to be reliable in predicting the accumulation of plastic strain at the grain boundary of a polycrystalline material.

Keywords

Plastic strains accumulation; Machine learning; Grain boundary; PCA.

Sumário

1	Introdução	17
1.1	Motivação	17
1.2	Revisão da literatura	18
1.3	Objetivos	20
1.4	Contribuições	21
1.5	Organização do trabalho	22
2	Aprendizado de Máquina	23
2.1	Aprendizado Supervisionado	23
2.1.1	Decision Tree	24
2.1.2	Random Forest	25
2.1.3	Stochastic Gradient Descent	25
2.1.4	K-Nearest Neighbors	26
2.1.5	Gradient Boosting	26
2.2	Análise de componentes principais (PCA)	28
2.3	Definições de Parâmetros	29
2.3.1	Hiperparâmetros	30
2.3.2	Validação Cruzada	30
2.3.3	Modelagem baseada em reamostragem	31
2.3.4	Métricas	31
3	Descrição geral dos dados	33
4	Uso de Random Forest para prever o acúmulo de deformação plástica nos contornos de grãos de um material policristalino	36
4.1	Descrição do banco de dados	36
4.2	Procedimento	37
4.3	Resultados	37
4.3.1	Amostra 1	38
4.3.2	Amostra 2	39
4.3.3	Amostra 3	39
4.4	Discussão dos resultados	40
5	Previsão do acúmulo de deformação plástica nos contornos de grãos de materiais policristalinos usando PCA e métodos de aprendizado supervisionado	44
5.1	Preparação das amostras	44
5.2	Procedimento	44
5.3	Resultados	45
5.4	Discussão dos resultados	57

6	Conclusões gerais e trabalhos futuros	60
7	Referências	62

Lista de Figuras

Figura 1 Tipos de aprendizado de máquina utilizados neste trabalho	23
Figura 2 Estrutura do algoritmo de <i>Decision Tree</i>	24
Figura 3 Estrutura do algoritmo de <i>Random Forest</i>	25
Figura 4 Exemplo de KNN para um modelo de classificação	26
Figura 5 Estrutura do algoritmo de <i>Gradient Boosting Regressor</i>	27
Figura 6 Exemplo da redução de dimensionalidade do PCA	29
Figura 7 Modelos de busca de hiperparâmetros	30
Figura 8 Modelo de validação cruzada	31
Figura 9 (a) Descrição do mapa EBSD com base na calorimetria do primeiro ângulo de Euler com as marcações <i>Vickers</i> ; (b) Os contornos obtidos de (a) tomando mudanças na orientação $>7.^\circ$. Adaptado de Vieira & Lambros [26]	34
Figura 10 (a) Campos de deformação residuais medidos nas regiões do manto nas coordenadas globais; e (b) Campos de deformação residuais medidos nas regiões do manto nos quadros de coordenadas locais	34
Figura 11 Representação esquemática do ângulo geométrico do contorno do grão	35
Figura 12 (a) Medidas de contorno de grão nas regiões do manto para a amostra 1. (b) Campo de deformações previstas equivalentes utilizando o BD1 para treinamento	39
Figura 13 (a) Medidas de contorno de grão nas regiões do manto para a amostra 2. (b) Campo de deformações previstas equivalentes utilizando o BD2 para treinamento	40
Figura 14 (a) Medições de contorno de grão nas regiões do manto para a amostra 3. (b) Campo de deformação previsto equivalente usando BD3 para treinamento. (c) Campo de deformação previsto equivalente usando BD4 para treinamento	41
Figura 15 Seção onde foi medido o coeficiente de correlação de Pearson (R)	41
Figura 16 Comparação com o artigo de Vieira & Lambros (2021). (a) e (b) resultados obtidos neste trabalho. (c) e (d) resultados apresentados por	

Vieira & Lambros (2021). (e) e (f) Gráfico de linha mostrando as deformações plásticas normais e de cisalhamento	42
Figura 17 Demonstração das regiões utilizadas no PCA e nas previsões dos modelos	45
Figura 18 Fluxo de trabalho do estudo com o PCA	46
Figura 19 Gráfico de R^2 (a) direção normal; (b) direção cisalhante; (c) direção tangencial	47
Figura 20 Coeficiente de determinação R^2 para o acúmulo de deformação plástica Amostra 1, nas direções (a) normal, (b) cisalhante e (c) tangencial	49
Figura 21 Coeficiente de determinação R^2 para o acúmulo de deformação plástica Amostra 2, nas direções (a) normal, (b) cisalhante e (c) tangencial	52
Figura 22 Coeficiente de determinação R^2 para o acúmulo de deformação plástica Amostra 3, nas direções (a) normal, (b) cisalhante e (c) tangencial	55
Figura 23 Comparação Medido x previsto <i>K-Nearest Neighbors</i> - Amostra 2 (35x35)	58

Lista de Tabelas

Tabela 1 Hiperparâmetros <i>Random Forest</i>	37
Tabela 2 Coeficiente de determinação R^2 para <i>Random Forest</i>	38
Tabela 3 Coeficiente de correlação de Pearson (R)	42
Tabela 4 Hiperparâmetros para os modelos com PCA	46
Tabela 5 Coeficiente de determinação (R^2) obtido nas previsões para a Amostra 1	50
Tabela 6 Coeficiente de determinação (R^2) obtido nas previsões para a Amostra 2	53
Tabela 7 Coeficiente de determinação (R^2) obtido nas previsões para a Amostra 3	56
Tabela 8 Coeficiente de correlação de <i>Pearson</i> (R)	58

Lista de Abreviações

AM	Aprendizado de Máquina
ANN	Redes Neurais Artificiais
AUC	<i>Area Under the ROC curve</i>
BD	Banco de dados
BD1	Banco de dados 1
BD2	Banco de dados 2
BD3	Banco de dados 3
BD4	Banco de dados 4
BP	<i>Back-Propagation</i>
BPTT	<i>Back-Propagation Through Time</i>
CART	Árvore de Classificação e Regressão
CNN	<i>Convolutional Neural Networks</i>
CPs	Componentes Principais
DIC	<i>Digital Image Correlation</i>
DP	Deformação plástica
DT	<i>Decision tree</i>
EBSD	<i>Electron Backscatter Diffraction</i>
GBR	<i>Gradient Boosting Regression</i>
GRU	<i>Gated Recurrent Unit</i>
HiDIC	Correlação Digital De Imagem De Alta Resolução
KELM	<i>Kernel External Learning Machine</i>
KNN	<i>K-Nearest Neighbors</i>
LSTM	<i>Long Short-Term Memory</i>
MAE	<i>Mean Absolute Error</i>
MCCV	<i>Monte Carlo Cross Validation</i>
MSE	<i>Mean Square Error</i>
OFHC	<i>Oxygen-Free High Conductivity</i>
PCA	Análise de Componentes Principais
RF	<i>Random Forest</i>

RNN	Redes Neuras Recorrentes
ROC curve	<i>Receiver Operating Characteristic Curve</i>
RVE	<i>Representative Volume Element</i>
SGD	<i>Stochastic Gradient Descent</i>
SMAE	<i>Scaled Mean Absolute Error</i>
SMPED	<i>Scaled Mean Plastic Energy Decrease</i>
VPSC	Visco-Plástica Autoconsistente
XGBoost	<i>eXtreme Gradient Boosting</i>

Lista de Símbolos

Símbolos gregos

α	Ângulo geométrico do contorno do grão
ρ_m, α_m	Coefficientes de expansão
ε_{tn}	Deformação plástica cisalhante
ε_{nn}	Deformação plástica normal
ε_{tt}	Deformação plástica tangencial
β	Fator de peso
δ	Valores residuais

Símbolos latinos

<i>D</i>	Autovalores
<i>V</i>	Autovetores
<i>R</i>	Coefficiente De Correlação De Pearson
<i>R</i>²	Coefficiente de Determinação
<i>C</i>	Covariância
<i>x</i>	Dados de entrada
<i>y</i>	Dados de saída
<i>Q</i>	Dados projetados
<i>d</i>	Distância
<i>J</i>	Função de custo
<i>L</i>	Função de perda
<i>h</i>	Função genérica
<i>r_i</i>	Gradiente negativo
<i>t_k</i>	Limiar
\bar{X}	Matriz das médias
<i>B</i>	Matriz de componentes principais
<i>G</i>	Matriz da média subtraída
<i>m</i>	Número de instâncias

m_{right}	Número de instâncias do subconjunto direito
m_{left}	Número de instâncias do subconjunto esquerdo
M	Número de iterações
\Re^n	Parte real de “n”
$y^{(i)}$	Solução desejada
\hat{y}_{node}	Solução prevista
k	Solução qualquer
\bar{x}, \bar{y}	Somatórias da referência
v_m	Taxa de aprendizado
\mathbf{B}^T	Transposta de \mathbf{B}
\mathbf{G}^T	Transposta de \mathbf{G}
\mathbf{V}^T	Transposta de \mathbf{V}
r^{th}	Valor atributo
\hat{y}_i	Valor predito
x_i, y_i	Valores da referência
a_r	Vetor característico
$\hat{F}(x)$	Vida útil prevista

1 Introdução

Ao longo dos séculos a ciência passou por quatro grandes períodos. Primeiro, o período em que o desenvolvimento da ciência se deu por base em experimentos e experiências, ciência empírica [1]. Segundo, das leis, onde a ciência é fundamentada em formulações de leis e teoremas matemáticos. O terceiro, com o avanço dos computadores, vem o período da ciência computacional, baseado nos teoremas do segundo período a resolução de problemas complexos se tornou possível. No momento a ciência se encontra no quarto período, o qual é o da ciência baseada em dados, que com o avanço do poder computacional e a quantidade de dados gerados no terceiro período, juntamente com os dois períodos iniciais, vem se tornando cada vez mais popular [2].

O desenvolvimento de técnicas eficientes para diagnóstico de falhas e a avaliação da integridade estrutural em diversos âmbitos da engenharia tem se tornado uma poderosa ferramenta para garantir eficiência na fabricação, qualidade do produto e redução de custo [3]. Por outro lado, o crescimento dos algoritmos baseados em inteligência artificial tem evoluído significativamente [4].

1.1 Motivação

Sendo assim, o aprendizado de máquina (AM) é uma opção para a resolução de problemas complexos, nos quais o empirismo e/ou a teoria não apresentam robustez suficiente [2,5]. Muitos pesquisadores vêm utilizando AM para solucionar problemas de diversos âmbitos da engenharia como: previsão de trincas, tenacidade à fratura, direção da propagação da trinca, plasticidade do material, características microestruturais de cordão de solda, comportamento de deformação em microestruturas de dupla face, previsão de vida para componentes sob condições de fluência, fadiga e fluência-fadiga, comportamento do material, evolução do campo de tensão de policristais submetidos a deformação elastoplástica, prever contornos de grãos suscetíveis a nucleação de danos, entre outros [2,6–12].

1.2 Revisão da literatura

Os contornos de grãos desempenham uma resposta plástica macroscópica em metais policristalinos, sendo uma característica microestrutural para metais [13,14]. Podendo os contornos de grãos atuar como barreiras, restringindo o deslizamento e causando uma concentração de tensão, outros podem permitir a transmissão de deslocamento total ou parcial que assim deriva em um deslocamento residual no plano de contorno de grão [15,16]. Mediante simulações de menor escala de comprimento, foi possível estudar de forma mais detalhada as interações de diferentes modos de deslocamento e estruturas de contornos de grãos, como foi feito por Jin et al. [17] que trabalharam com barreiras de energia dependentes do material para nuclear deslocamentos parciais e averiguar suas interações na fronteira de grãos. Uma análise quantitativa da correlação entre a transmissão de deslizamento e o acúmulo de deformação plástica em volta dos contornos de grãos, foi realizada por Abuzaid et al. [18], utilizando *Digital Image Correlation* (DIC) e *Electron Backscatter Diffraction* (EBSD), evidenciando que as fronteiras que possibilitaram a transmissão exibiram deformações provocadas por deslizamento em ambos os lados da interface. Por outro lado, as fronteiras que bloquearam o deslizamento demonstraram deformações maiores em um dos grãos com zonas livres relativamente de deformação no grão vizinho. Além disso, os contornos de grãos podem ser avaliados para determinar a formação de trincas por fadiga [19,20], contribuindo para o entendimento das dúvidas referentes ao acúmulo de dano que antecedem a falha por fadiga de materiais [21,22]. Diante disto, fica evidente que a análise da relação entre características microestruturais (contornos de grãos, por exemplo) e o acúmulo de deformação plástica é um passo importante para entender plenamente a resposta de metais policristalinos, durante a deformação plástica apresentadas nos processos iniciais de fadiga e falha por fluência.

Como os contornos de grãos interagem são fundamentais para a concentração de deformações plásticas [23]. Com o crescimento do uso de técnicas de DIC e EBSD para mensurar o acúmulo de deformações em microescala [23,24], tem-se um grande volume de dados disponíveis para o acúmulo de deformações na fronteira dos grãos, dessa forma se torna possível a implementação de técnicas de AM para prever o acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos. Baseando-se

em um bocal de alta pressão de uma turbina de gás, Badora et al. [25], utilizou algoritmos de AM para estabelecer o tamanho máximo de trincas de fadiga. Os resultados da pesquisa corroboram que determinados algoritmos conseguem prever com precisão os comprimentos máximos das trincas por fadiga, até em amostras pequenas. Para entender melhor a aplicação de AM na previsão de vida em fadiga em tensões médias, utilizaram-se os métodos de *Random Forest* (RF) e o *Kernel External Learning Machine* (KELM), para melhorar o mapeamento entre vida em fadiga e as características monotônicas, de fadiga e características cíclicas de materiais [5]. Por meio de Redes Neurais Recorrentes (RNN) Mozaffar et al. [7], conseguiram prever eficientemente a plasticidade de um material dependente de história e microestrutura. O banco de dados foi composto por dados experimentais e dados provenientes de simulações numéricas, a arquitetura utilizada foi uma formulação *Gated Recurrent Unit* (GRU) com um estado oculto secundário, e por meio dela foi treinada uma RNN com 80% dos dados e para avaliar os modelos usaram o *Scaled Mean Absolute Error* (SMAE) e a *Scaled Mean Plastic Energy Decrease* (SMPED).

Uma modelagem substituta, baseada em AM, foi desenvolvida por Khandelwal et al. [9] para prever o comportamento de deformação em microestruturas de dupla fase. Os dados foram obtidos mediante simulações de elementos finitos. Os modelos foram treinados e validados usando o método de *Long Short Term Memory* (LSTM) sendo uma arquitetura que consiste em sub-redes conectadas recorrentemente (célula de memória) que funcionam com a ajuda de três portas: de manutenção, de escrita e de saída. Como método de otimização de hiperparâmetro foi utilizado um algoritmo de *Back-Propagation Through Time* (BPTT) e a avaliação do modelo foi realizada pelo *Mean Absolute Error* (MAE) e o coeficiente de determinação (R^2). Por meio de Redes Neurais Artificiais (ANN), Dai et al. [10] propôs um modelo para prever o comportamento do material de cobre *Oxygen-Free High Conductivity* (OFHC), onde um algoritmo de *Back-Propagation* (BP) foi utilizado como arquitetura e o *Mean Square Error* (MSE) foi a métrica de avaliação medida. Os dados foram obtidos por simulações baseadas em um modelo de plasticidade policristalina Visco-Plástica Autoconsistente (VPSC) e validados com dados experimentais de cobre OFHC. Para evitar *overfitting*, foi empregada a técnica de redução de dimensionalidade denominada Análise de Componentes Principais (PCA)

para capturar as informações de textura característica. Foi sugerido por Frankel et al. [11] a previsão da evolução do campo de tensão de policristais submetidos a deformação elastoplástico com um modelo de rede neural híbrida. Os dados foram obtidos por simulações de elementos finitos, a arquitetura utilizada foi uma combinação de uma LSTM e *Convolutional Neural Networks* (CNN), formando assim uma *ConvLSTM* e como métrica de avaliação foi empregado o MSE. Os autores concluíram que o modelo conseguiu prever a evolução do campo de tensão dos oligocristais com grande exatidão usando apenas a microestrutura inicial e o carregamento externo como entradas.

Zhang et al. [12] utilizam AM para prever contornos de grãos suscetíveis a nucleação de danos, os dados foram obtidos por simulações numéricas, a arquitetura empregada foi uma árvore de decisão, chamada de *eXtreme Gradient Boosting* (XGBoost) para classificação e a métrica de avaliação usada constituiu na *Receiver Operating Characteristic Curve* (ROC curve) e *Area Under the ROC curve* (AUC). Os autores consideram que os modelos de XGBoost conseguiram obter boas previsões das localizações dos contornos de grãos incompatíveis com deformação e contornos de grãos com concentração de tensão. No estudo de Vieira & Lambros [26] foram usadas Redes Neurais Artificiais (ANN) para prever o acúmulo de deformação plástica nos contornos de grãos de uma liga de aço inoxidável policristalino (liga 709), os dados foram obtidos de resultados experimentais de origens plásticas residuais na escala de grãos, através da técnica de correlação digital de imagem de alta resolução (HiDIC). A métrica de avaliação usada foi o coeficiente de correlação de Pearson (R), os resultados apresentaram uma boa correlação para a uma grande parte das amostras consideradas.

1.3 Objetivos

Diante do exposto anteriormente, este trabalho visa aprimorar a previsão do acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos e propor um novo método de previsão de acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de um material policristalino, usando modelos de aprendizado de máquina. Como objetivos específicos tem-se:

- Testar a eficácia do modelo de Random Forest através da validação cruzada;

- Avaliar novas alternativas para melhorar a acurácia do modelo preditivo, obtendo um novo método de extração de características para o problema.
- Comparar os resultados com o trabalho proposto por Vieira & Lambros [26].

1.4 Contribuições

No contexto da mecânica da fratura, a busca de alternativas que permitam tornar as estruturas e suas componentes, mais seguras e confiáveis, tem-se constituído num desafio permanente nas últimas décadas. Principalmente quando se trata de materiais metálicos, utilizados em projetos nas diferentes áreas da engenharia. A realização de estudos que permitam identificar o local correto da falha com precisão é um dos principais desafios neste contexto. Seguindo essa linha de raciocínio, a identificação dos níveis de deformações plásticas presentes no processo de falha dúctil, também é um assunto de alta importância, para isto, estudos relacionados a materiais metálicos, que identifiquem essas deformações ao nível de grão, podem se constituir num problema de interesse na área de engenharia.

Vieira & Lambros [26] usaram ANN baseados em todos os dados das amostras para prever o acúmulo de deformação plástica em um material policristalino. Utilizaram o ângulo geométrico do contorno de grão como dado de entrada e como dado de saída foram utilizadas as deformações plásticas nas coordenadas locais (normal, cisalhante e tangencial), para os quais obtiveram bons resultados e previsões relevantes estatisticamente, sendo que o melhor conjunto de dados obteve um valor médio de correlação de Pearson (R) de 0.65 entre os valores medidos e previstos.

Este trabalho vem contribuir com algumas lacunas encontradas na literatura, pois quase nenhum dos trabalhos tenta estabelecer uma relação entre a microestrutura granular de um material policristalino e o acúmulo de deformações plásticas no nível microestrutural. A maioria aborda problemas do ponto de vista macroestrutural, Vieira & Lambros [26] inicia esse processo de tentar estabelecer essa relação microestrutural através de ANN.

Além disso, esta dissertação emprega amostragem de *Monte Carlo* para avaliar o desempenho dos modelos, pois, poucos trabalhos encontrados na literatura

utilizam os contornos de grãos para medir o acúmulo de deformação plástica, alguns autores classificam os contornos de grãos sem deformação e com concentração de tensão.

Neste trabalho também é apresentado um novo método para prever o acúmulo de deformações plásticas nos contornos de grãos (microestrutura), aplicando a técnica de redução de dimensionalidade, por meio do PCA, com os modelos de *Decision tree* (DT), *Random Forest* (RF), *Stochastic Gradient Descent* (SGD), *K-Nearest Neighbors* (KNN) e *Gradient Boosting Regression* (GBR) para treinar e testar os dados, obtendo assim uma melhoria na média do coeficiente de correlação de Pearson (R) em torno de 30% em relação ao trabalho de Vieira & Lambros [26], mostrando assim que os resultados apresentados aqui superam os relatados por [26].

Outra contribuição deste trabalho é a utilização de uma região da amostra como dado de entrada para os modelos, ao serem utilizados três tamanhos diferentes de regiões ao invés de utilizar somente um ponto como fez Vieira & Lambros [26], essa estratégia fez com que os resultados das previsões tivessem uma grande melhoria na correlação de Pearson (R) de todos os modelos utilizados neste trabalho ao comparar com o trabalho de Vieira & Lambros [26].

1.5 Organização do trabalho

Após a sessão introdutória o trabalho obedece a seguinte organização: na sessão 2 são apresentados os métodos utilizados no trabalho; na sessão 3 são descritos os bancos de dados utilizados; na sessão 4 é apresentado o estudo de caso preliminar deste trabalho; na sessão 5 é apresentado o segundo estudo de caso do trabalho e na sessão 6 são apresentadas as conclusões.

2 Aprendizado de Máquina

O Aprendizado de Máquina está presente em toda a parte, como, por exemplo, ao fazer uma pesquisa no Google, um algoritmo é o responsável pelo resultado da pesquisa. Mas o que é o Aprendizado de Máquina? Pode se dizer que é a técnica de programar computadores para que eles possam aprender com dados. Para uma máquina aprender é necessário fornecer à máquina dados históricos para criar um algoritmo que minimize ou maximize alguma medida (função de perda ou objetivo). No AM, os algoritmos são divididos em aprendizado supervisionado, não supervisionado, semissupervisionado e por reforço. A principal diferença entre eles é como os algoritmos são treinados (ver Figura 1). Na engenharia é geralmente aplicado o aprendizado de máquina supervisionado.

2.1 Aprendizado Supervisionado

Um algoritmo de AM é considerado um problema de aprendizagem supervisionada quando a solução desejada acompanha os dados de treinamento. Problemas de aprendizagem supervisionada podem ser de classificação ou regressão, a saída apresentada pelo algoritmo é o que determina o tipo de problema. Ao ter uma saída com valores numéricos tem-se um problema de regressão. E quando a saída são classes tem-se um problema de classificação. Neste trabalho usaram-se problemas de regressão.

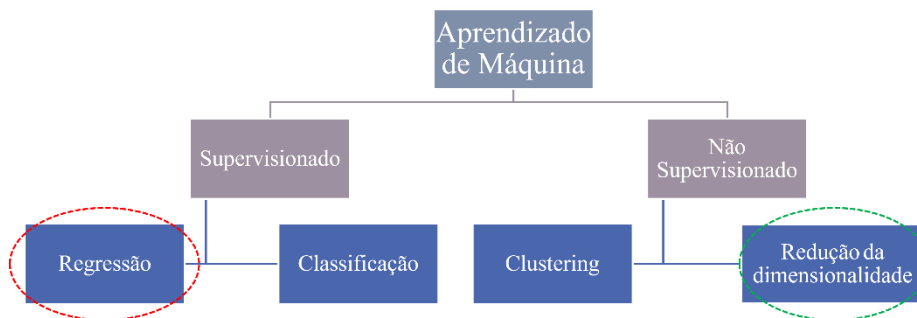


Figura 1 Tipos de aprendizado de máquina utilizados neste trabalho

2.1.1 Decision Tree

O *Decision Tree* é um algoritmo de AM muito versátil, capaz de realizar tarefas de classificação e regressão, como também uma combinação das duas (*multi-output*). É um algoritmo, com a capacidade de trabalhar com conjuntos de dados complexos [27]. Ele consiste em responder várias perguntas sobre as características das amostras em um conjunto de dados conhecido. A árvore é dividida em nós, que é nó raiz, nó oculto e nó folha (ver Figura 2).

O algoritmo denominado Árvore de Classificação e Regressão (CART) é dos mais utilizados para DT. Consiste em encontrar, em cada divisão dos dados, uma solução (k) e um limiar (t_k) que gere os subconjuntos mais puros [27]. Sendo assim, a função de custo para regressão que o algoritmo tenta minimizar, dada por [27] é:

$$J(k, t_k) = \frac{m_{left}}{m} MSE_{left} + \frac{m_{right}}{m} MSE_{right}, \quad (1)$$

onde $m_{left/right}$ é o número de instâncias no subconjunto esquerdo/direito. E o $MSE_{left/right}$ mede o erro quadrático médio, calculado como [27]:

$$\text{onde } \begin{cases} MSE_{node} = \sum_{i \in node} (\hat{y}_{node} - y^{(i)})^2, & (2) \\ \hat{y}_{node} = \frac{1}{m_{node}} \sum_{i \in node} y^{(i)}. & (3) \end{cases}$$

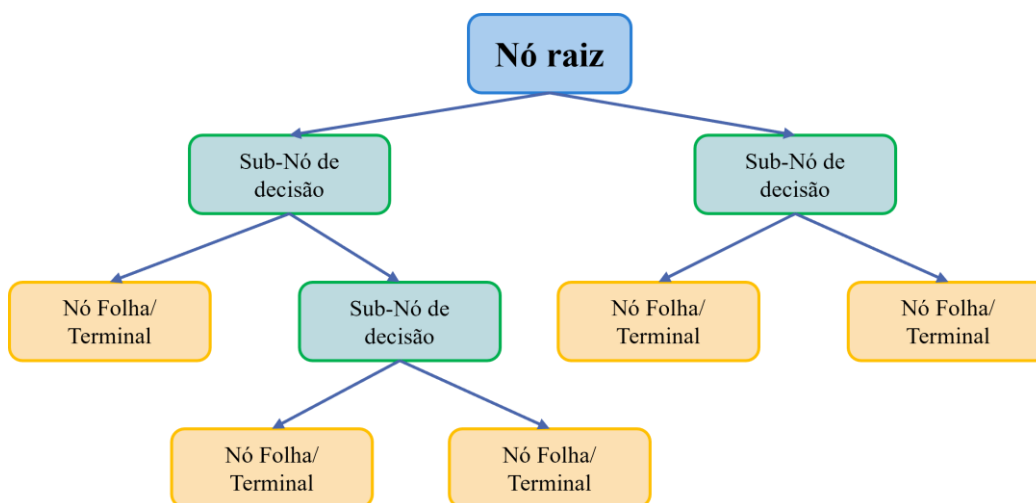


Figura 2 Estrutura do algoritmo de *Decision Tree*

2.1.2 Random Forest

O *Random Forest* é definido como um conjunto aleatório de DTs, usado tanto para classificação quanto para regressão, onde cada árvore depende de um vetor aleatório expresso de forma independente e com a mesma disposição para todas as árvores da floresta [28]. O RF pode ser amostrado por substituição, denominado *bagging* [29] (agregação de *bootstrap*), ou sem substituição, chamado de *pasting* [30]. Na construção da árvore somente um subconjunto aleatório é analisado em cada divisão dos nós. O RF apresenta resultados mais precisos que o DT e tem uma grande resistência ao *overfitting* [27]. A estrutura do *Random Forest* é apresentada na Figura 3.

2.1.3 Stochastic Gradient Descent

O Gradiente Descendente é um algoritmo de otimização com a capacidade de encontrar boas soluções para uma grande variedade de problemas, por ajustar iterativamente os parâmetros para minimizar uma função de custo [27]. No Gradiente Descendente Estocástico a iteração é feita escolhendo de forma aleatória uma instância no conjunto de treinamento em cada etapa para depois calcular os gradientes com base na instância escolhida. O que torna o algoritmo bem mais rápido que o Gradiente Descendente em Lote, sendo assim um bom algoritmo para treinar grandes conjuntos de dados já que apenas uma instância precisa estar na memória durante cada iteração [27].

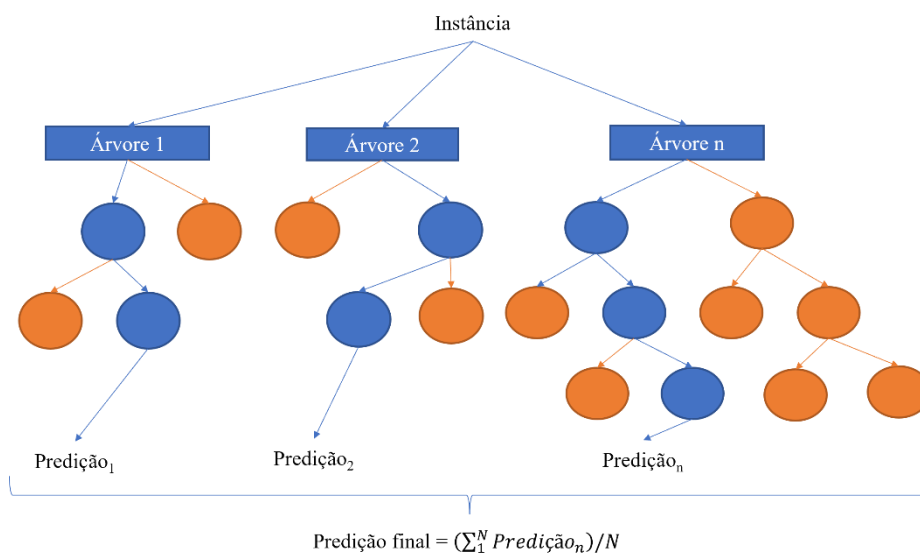


Figura 3 Estrutura do algoritmo de *Random Forest*

2.1.4 K-Nearest Neighbors

O KNN é um algoritmo que tem como base a instância, sendo um algoritmo supervisionado muito simples de entender e de fácil execução [31]. Sendo todas as instâncias pontos no espaço n -dimensional \mathfrak{R}^n , assim os vizinhos mais próximos são determinados por uma distância euclidiana padrão, um exemplo do algoritmo de KNN para classificação é apresentado na Figura 4, porém neste estudo foi utilizado o algoritmo de regressão. Considerando uma distância x tendo um vetor característico onde $a_r(x)$ denota o valor atributo r^{th} da instância x [32]. A distância euclidiana é dada como:

$$d(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{r=1}^n (a_r(x_i) - a_r(x_j))^2}. \quad (4)$$

Porém, existem outras métricas de distância que podem ser utilizadas para determinar os vizinhos mais próximos, como Manhattan e Minkowski.

2.1.5 Gradient Boosting

O *Gradient Boosting* é um algoritmo que adiciona previsores em sequência a um conjunto de previsões feitas anteriormente, fazendo uma correção no seu antecessor [27]. Esse algoritmo pode ser utilizado para classificação e regressão, neste estudo será utilizado para regressão. Seu objetivo é acrescentar um conjunto de modelos “fracos” para formar um modelo “forte” [33], os quais são gerados

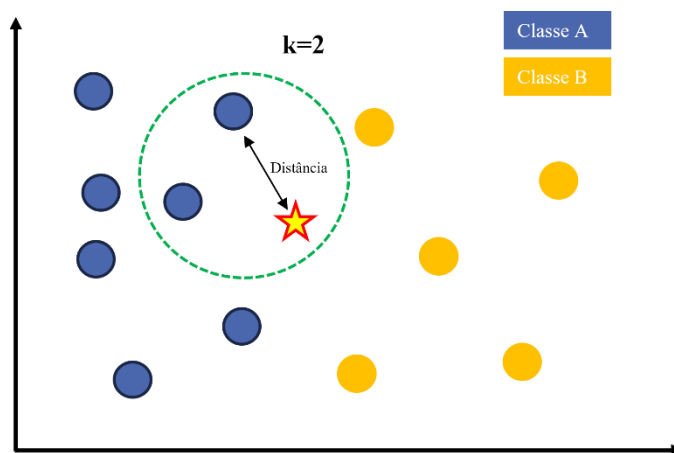


Figura 4 Exemplo de KNN para um modelo de classificação

seqüencialmente para assim minimizar o erro residual do modelo anterior, por uma função de perda [34] (ver Figura 5).

Tendo um conjunto de treinamento $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$, onde x e y representam os dados de entrada e os dados de saída do modelo, respectivamente. Com a função de perda $L(y, F(x))$ que mede a vida útil prevista $\hat{F}(x)$ que se afasta da verdadeira resposta y , podendo apresentar erro quadrático, erro absoluto ou erro de Huber. Sendo M o número de iterações a ser construída, a estrutura do GBR inicia com um modelo $F_0(x)$. Com cada iteração $m = 1, 2, 3, \dots, M$, são compensados os resíduos equivalentes para otimizar os coeficientes de expansão ρ_m e α_m :

$$(\rho_m, \alpha_m) = \underset{\rho, \alpha}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^N L[y_i, F_{m-1} + \rho h(x_i; \alpha)], \quad (5)$$

e assumindo que:

$$F_m(x) = F_{m-1}(x) + \rho_m h(x; \alpha_m). \quad (6)$$

Porém, a eq. (5) é complexa de se resolver diretamente. Embora isso, $\rho h(x_i; \alpha)$ pode ser considerado um incremento ao longo de $h(x_i; \alpha)$, já que o *gradient boosting* é um modelo aditivo. O α_m pode ser resolvido usando a formulação de mínimos quadrados,

$$\alpha_m = \underset{\alpha, \beta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^N [r_i - \beta h(x_i; \alpha)]^2, \quad (7)$$

onde β é o fator de peso, r_i é o gradiente negativo avaliado com base no modelo anterior,

$$r_i = - \left[\frac{\partial L(y_i, F(x_i))}{\partial F(x_i)} \right]_{F(x)=F_{m-1}(x)}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (8)$$

O tamanho do passo gradiente descendente pode ser melhorado com uma otimização unidimensional,

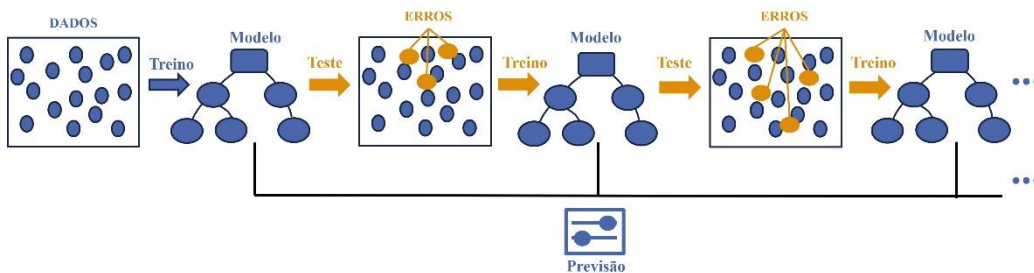


Figura 5 Estrutura do algoritmo de *Gradient Boosting Regressor*

$$\rho_m = \operatorname{argmin}_p \sum_{i=1}^N L[r_i, F_{m-1} + \rho h(x_i; \alpha_m)]^2. \quad (9)$$

Assim, o modelo residual recém-avaliado será adicionado ao modelo anterior seguindo a eq. (6). Há vários critérios de perdas que podem ser aplicados para o *gradient boosting*, como: mínimos quadrados, mínimo desvio absoluto, Huber e binomial logístico log-verossimilhança. Neste estudo a função de perda utilizada foi o critério de Huber:

$$L(y, F) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - F)^2 & |y - F| \leq \delta \\ \delta(|y - F| - \delta/2) & |y - F| > \delta \end{cases}, \quad (10)$$

sendo que δ representa os valores residuais, sendo considerados *outliers*.

Para evitar *overfitting* e melhorar a capacidade de generalização do modelo, uma técnica de regularização costuma ser empregada durante o treinamento. Especificamente, a taxa de aprendizado, é usada com frequência no *gradient boosting*, introduzindo uma nova variável v_m para controlar a taxa de aprendizado do modelo como:

$$F_m(x) = F_{m-1}(x) + v_m * \rho_m h(x; \alpha_m), 0 < v_m < 1, \quad (11)$$

quanto o menor for o v_m , mais lentamente o modelo é atualizado. Porém, usando pequenas taxas de aprendizado ocorre uma melhoria em relação à capacidade de generalização dos modelos de *gradient boosting* que não utilizam a taxa de aprendizado [35], mas isso acaba acarretando um aumento no tempo computacional.

2.2 Análise de componentes principais (PCA)

A Análise de Componentes Principais é uma técnica utilizada para reduzir a dimensionalidade de dados, geralmente empregada em aplicações de processamento de imagens [36], convertendo-o em um novo conjunto de dados composto por variáveis ortogonais, ou seja, os componentes principais (CPs). Ao converter os dados em um novo conjunto, a maior variância original dos dados é preservada [37] (ver Figura 6).

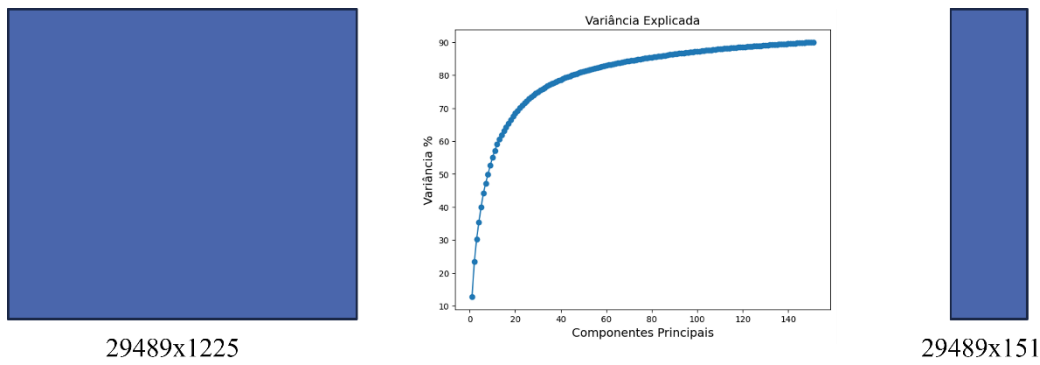


Figura 6 Exemplo da redução de dimensionalidade do PCA

Um conjunto de dados com j amostras e i variáveis é representado pela matriz $\mathbf{X} \in \mathfrak{R}^{j \times i}$, o cálculo do PCA é realizado da seguinte forma:

Calcula-se primeiro a matriz de dados média-subtraída [31] fazendo $\mathbf{G} = \mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}$, onde:

$$\bar{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ \bar{x} \\ 1 \end{bmatrix} \text{ e } \bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{ij}. \quad (12)$$

Calcula a matriz de covariância da matriz de dados média-subtraída \mathbf{G} , definida como:

$$\mathbf{C} = \mathbf{G}^T \mathbf{G}. \quad (13)$$

Realiza a autodecomposição da matriz de covariância da seguinte forma:

$$\mathbf{C} = \mathbf{V} \mathbf{D} \mathbf{V}^T, \quad (14)$$

onde \mathbf{V} são os autovetores e \mathbf{D} são os autovalores.

Os eixos principais dos dados são os autovetores e os CPs são calculados projetando os dados nesses eixos como segue:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{B}^T \mathbf{G}, \quad (15)$$

onde \mathbf{B} é a matriz que contém o primeiro n CP e \mathbf{Q} são os dados projetados.

2.3 Definições de Parâmetros

A escolha adequada de meios que avaliem eficazmente os modelos são de suma importância. Para este estudo as seguintes técnicas foram consideradas: ajuste de hiperparâmetros, validação e métricas de avaliação.

2.3.1 Hiperparâmetros

Para o treinamento de um algoritmo de aprendizado de máquina são necessários a otimização de diversos parâmetros correspondentes ao problema, porém alguns necessitam ser definidos previamente, pois não podem ser aprendidos por métodos de otimização comuns, esses parâmetros são chamados de hiperparâmetros. Por vezes, eles podem controlar a complexidade do modelo, se a definição não for bem feita pode levar ao *overfitting* [27].

Os métodos mais utilizados para realizar a busca de hiperparâmetros são o *Grid Search* e o *Random Search* (ver Figura 7), classificados como um método de busca exaustiva [38,39]. No *Grid Search* o ambiente de busca é determinado com uma grade de hiperparâmetros onde todas as combinações possíveis são realizadas, podendo levar muito tempo para a finalização dependendo do tamanho dos dados e da natureza do problema. No caso do *Random Search* é delimitado um ambiente e o algoritmo avalia um número predefinido de combinações aleatórias de hiperparâmetros, o tornando assim mais rápido e mais eficiente. Sendo assim, neste trabalho foi empregado o *Random Search* com método de ajuste de hiperparâmetros.

Para evitar que os hiperparâmetros se adaptem a um conjunto de dados específico, foi empregado também o procedimento de validação cruzada, para garantir que a combinação de hiperparâmetros escolhida fosse a melhor possível para o modelo.

2.3.2 Validação Cruzada

A validação cruzada utilizada neste estudo foi o *k-fold*, que consiste em dividir o conjunto de dados em k conjuntos do mesmo tamanho aproximado e assim um

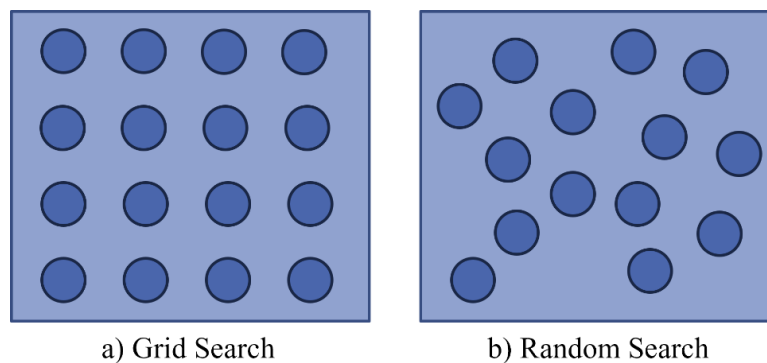


Figura 7 Modelos de busca de hiperparâmetros

dos conjuntos é usado para teste e o restante para treinamento. Esse processo é repetido até que todos os k conjuntos sejam usados ao menos uma vez como conjunto de teste, conforme apresentado na Figura 8. Os parâmetros para o k -fold utilizados foram: 10 repetições para o k -fold, o conjunto de dados foi dividido em 5 e com uma aleatoriedade de 4 que controla cada instância repetida da validação cruzada.

2.3.3 Modelagem baseada em reamostragem

Neste estudo, também, foi empregado uma estrutura de teste de modelo baseado em reamostragem, o qual é chamado de *Monte Carlo Cross Validation* (MCCV)[40,41], para avaliar distintos modelos de aprendizagem supervisionada e de extração de características. Segundo o teorema *No Free Lunch* [42], a atuação média dos algoritmos de otimização será equivalente se eles forem analisados em todos os problemas imagináveis. Assim, não existe apenas um algoritmo de AM que pode ser considerado o melhor para um problema específico de modelagem. Deste modo, é importante avaliar diferentes algoritmos ao escolher um preditor. Sendo assim, os algoritmos baseados em árvore (DT), baseado em instância (KNN), baseado em iterações (SGD) e ensembles (RF e GBR) foram apontados como possíveis postulantes neste trabalho.

2.3.4 Métricas

Para avaliar o desempenho de modelos de regressão é necessário o uso de métricas de erro. Neste estudo foram empregadas as métricas de coeficiente de

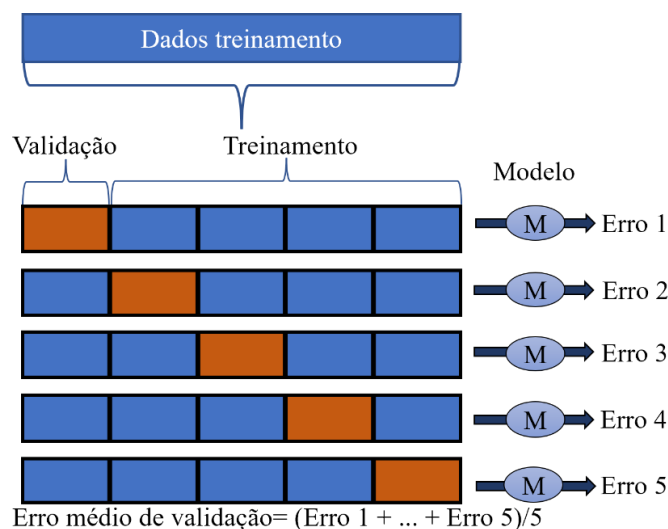


Figura 8 Modelo de validação cruzada

determinação (R^2) e coeficiente de Pearson (R), definidas como:

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_{samples}} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n_{samples}} (y_i - \bar{y})^2} \quad (16)$$

$$R(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^{n_{samples}} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{[\sum_{i=1}^{n_{samples}} (x_i - \bar{x})^2][\sum_{i=1}^{n_{samples}} (y_i - \bar{y})^2]}} \quad (17)$$

onde \hat{y}_i é o valor predito da i -ésima amostra, y_i é o valor de referência correspondente, $\bar{y} = \sum_{i=1}^{n_{samples}} y_i$, x_i é o valor de referência e $\bar{x} = \sum_{i=1}^{n_{samples}} x_i$.

O R^2 mostra o quanto um modelo de regressão se ajusta ao conjunto de dados observados e o R representa o quanto os dados se aproximam de uma reta no diagrama de dispersão.

3

Descrição geral dos dados

Neste trabalho utilizaram-se os mesmos bancos de dados de Vieira & Lambros [26]. Para a aquisição dos dados foram realizados testes experimentais para medir as deformações plásticas em escala de grãos. O material utilizado foi o aço inoxidável austenítico 709 que tem propriedades parecidas com a liga de aço inoxidável 316, porém com propriedades melhoradas. Foram gerados corpos de prova, tipo ampulheta para os ensaios, porém antes da usinagem foi feito um tratamento térmico a 1200 °C por 48 horas para possibilitar o aumento do tamanho do grão de 25 a 30 μm para 160 a 190 μm , para que assim a técnica de DIC pudesse ser aplicada, após uma adaptação do trabalho de Carroll et al. [43].

A melhor forma de conseguir campos de deformações capazes de mostrar as deformações na escala de grão é por meio de imagens de alta resolução de superfície. Para isso foi necessário gerar imagens com grandes ampliações com o auxílio de um microscópio óptico com uma ampliação de 40x, resultando em imagens com resolução de $\sim 0.90 \mu m / pixel$. Porém, essas imagens abrangem apenas um pequeno campo de visão (190x190 μm), para cobrir toda a área de interesse foi utilizada uma grade de 6 por 6 imagens sobrepostas. E por fim foram correlacionados dois conjuntos de imagens usando um tamanho de subconjunto de 61 píxeis ($\sim 5.5 \mu m$) e um passo de 10 píxeis ($\sim 0.9 \mu m$). Devido ao aumento do grão em aproximadamente 180 μm foram utilizados 32 subconjuntos ao longo do diâmetro de cada grão. Após esse processo foi possível correlacionar imagens deformadas com não deformadas de uma superfície obtendo as deformações ao longo de todo o grão.

Após obter os dados de DIC, foi executada a técnica de EBSD a fim de conseguir mapas de orientação cristalina da superfície da amostra. Após adquirir as imagens por DIC e EBSD foi efetivada a combinação dos conjuntos de dados para ordenar os campos de deformações medidos com a microestrutura pressuposta, no qual o posicionamento realizou-se com cinco marcadores *Vickers* em torno da região de interesse como pode ser visto na Figura 9. Maiores detalhes sobre o procedimento experimental são descritos no trabalho de Vieira & Lambros [26].

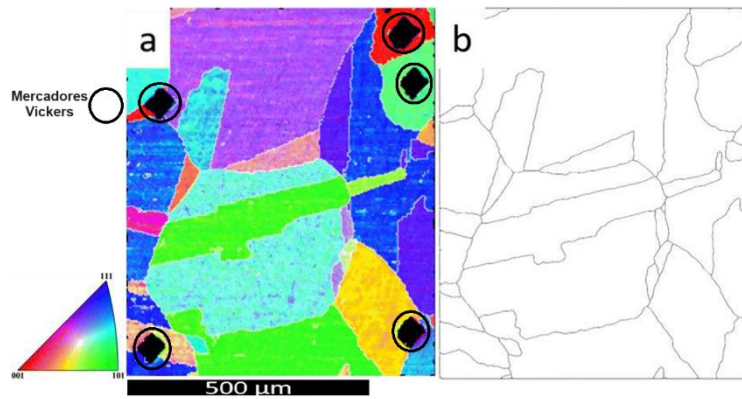


Figura 9 (a) Descrição do mapa EBSD com base na calorimetria do primeiro ângulo de Euler com as marcações *Vickers*; (b) Os contornos obtidos de (a) tomando mudanças na orientação $>7^\circ$. Adaptado de Vieira & Lambros [26]

Para ser possível trabalhar com as deformações plásticas afetadas diretamente pelos contornos de grão foi necessário rotacionar os campos de deformações medidos da coordenada global para a coordenada local alinhando à direção do contorno do grão local (ver Figura 10), onde os campos de deformações locais são compostos por componente normal (ε_{nn}), cisalhante (ε_{tn}) e tangencial (ε_{tt}) ao contorno do grão. A forma detalhada de como foi realizada a mudança de coordenadas é apresentada no paper de Vieira & Lambros [26].

Após a aquisição dos dados foi criado um banco de dados para cada amostra, composto por um dicionário que contém dados de deformações plásticas nas direções locais (normal, tangencial, cisalhante), nas coordenadas globais, ângulo

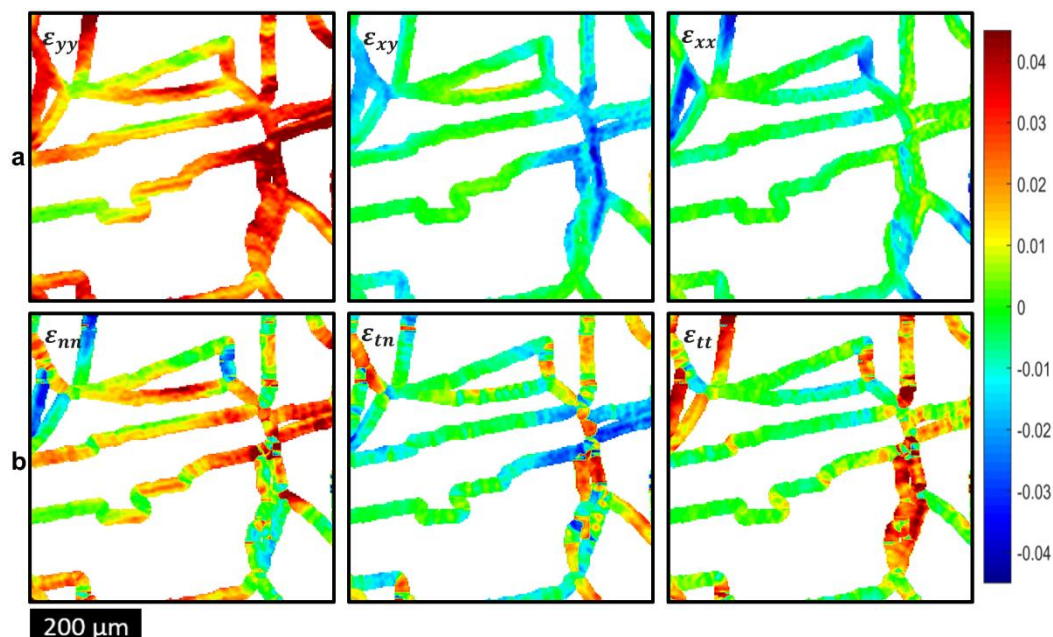


Figura 10 (a) Campos de deformação residuais medidos nas regiões do manto nas coordenadas globais; e (b) Campos de deformação residuais medidos nas regiões do manto nos quadros de coordenadas locais

geométrico do contorno do grão (α) assim como, dados que determinam onde se encontra o núcleo e o manto do grão.

Para Vieira & Lambros [26] o ângulo geométrico do contorno do grão (α) corresponde a inclinação entre uma linha ajustada e a horizontal (eixo x), sendo esse ângulo utilizado na transformação das coordenadas e como preditor do modelo utilizado por eles. Importante ressaltar que o ângulo (α) (ver Figura 11) varia ao longo do contorno do grão e é um ângulo local, portanto não corresponde a um valor constante.

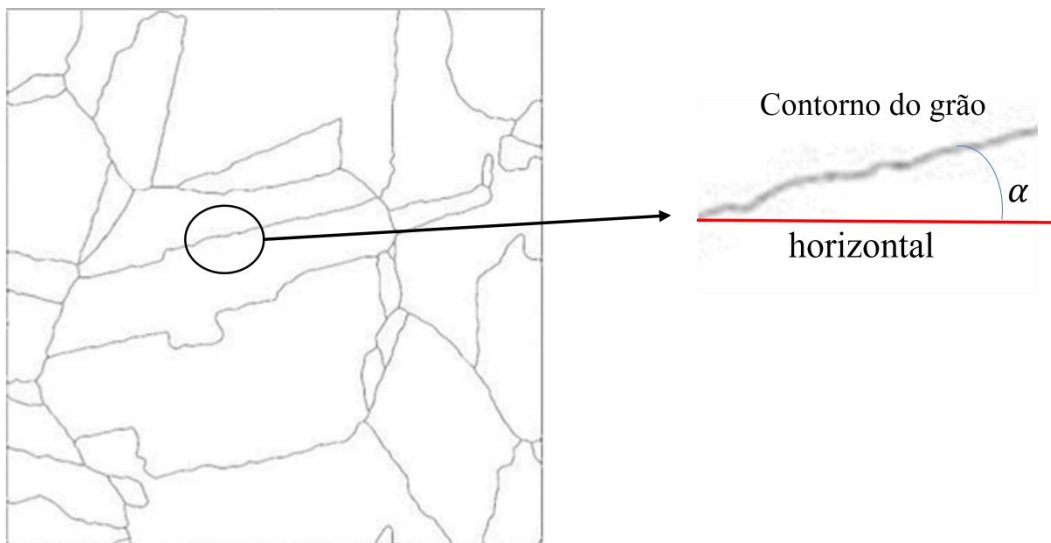


Figura 11 Representação esquemática do ângulo geométrico do contorno do grão

4

Uso de Random Forest para prever o acúmulo de deformação plástica nos contornos de grãos de um material policristalino

4.1

Descrição do banco de dados

Foram utilizadas três amostras distintas, sendo a primeira delas uma matriz de 199×210 píxeis, com um total de 41790 dados, denominada neste estudo de Banco de dados 1 (BD1). A segunda amostra é composta por uma matriz de 405×419 píxeis, contendo um total de 169695 dados, denominado de Banco de dados 2 (BD2). A terceira amostra é uma matriz de 409×429 píxeis com 175461 dados, que foi designada como Banco de dados 3 (BD3). Além disso, foi criado um quarto Banco de dados (BD4), composto por 1/3 de cada um dos BDs anteriores. Cada BD é composto por um dicionário que contém informações sobre deformações plásticas nas coordenadas locais (ε_{nn} , ε_{tn} e ε_{tt}) e globais, ângulo geométrico do contorno do grão α e informações que determinam o núcleo e o manto do grão.

Como parâmetros de entrada, podem ser utilizados diversos parâmetros, tais como: força, temperatura, tempo, taxa de deslocamento, tamanho do grão, ângulo geométrico do contorno do grão e núcleo do grão. Neste estudo, foi utilizado o ângulo geométrico do contorno do grão (α) e a forma como este ângulo geométrico foi obtido foi descrita no item 3. Vale salientar que, de acordo com Vieira [44], o ângulo α foi escolhido como preditor devido à falta de um modelo com base mecânica que relacione parâmetros microestruturais e deformações plásticas resultantes. Como dados de saída usaram-se as deformações plásticas nas três direções locais (ε_{nn} , ε_{tn} e ε_{tt}). Em geral, o aprendizado de máquina é dividido em treino e teste, mas neste estudo, optou-se por utilizar todo o BD tanto para treinamento quanto para teste, de forma a comparar os resultados com a contribuição de Vieira & Lambros [26]. Ao criar um quarto BD com 1/3 de todas as amostras, o objetivo era verificar se o preditor teria um desempenho semelhante ao BD com base em dados de uma única amostra.

4.2 Procedimento

Com base na técnica de aprendizado de máquina, foi desenvolvido um código em Python, juntamente com o pacote *Scikit-Learn* [27] para realizar os treinamentos e a previsão do modelo de *Random Forest Regression* utilizando o banco de dados validado por Vieira & Lambros [26]. Outros pacotes, como Pandas e Numpy, também foram usados. O passo inicial consistiu em reunir os dados das três amostras e criar um *Data Frame* de cada amostra, a fim de otimizar a visualização e localização dos dados. Posteriormente, os dados foram agrupados em dados de entrada e saída ($x = \text{ângulo } \alpha$ e $y = \text{deformações plásticas nas três direções locais}$). Em seguida, foram definidos os parâmetros de validação cruzada, conforme descrito no item 2.3.2. E, por fim, foram realizadas as previsões usando os hiperparâmetros apresentados na Tabela 1 para cada conjunto de dados de treinamento.

Tabela 1 Hiperparâmetros *Random Forest*

Nome	Valor
Número de árvores	10
número mínimo de amostras divididas	2
número mínimo de amostras de folhas	66
número máximo de recursos	None
inicialização	false

Após a previsão, foi calculado o R^2 de cada uma das saídas. Após os resultados das previsões, foram realizadas substituições dos dados previstos no conjunto de dados original, a fim de permitir a criação de uma nova matriz de dados que possibilitasse a criação de gráficos de comparação visual, gerados mediante um código *MATLAB* fornecido por Vieira [44].

4.3 Resultados

Nesta seção, serão apresentados os resultados das previsões realizadas para cada amostra e os resultados de R^2 . A Tabela 2 apresenta, em vermelho, o melhor resultado do R^2 para cada amostra e, em verde, o segundo melhor resultado, que corresponde ao BD4 de cada uma. Considerando que, para cada amostra, foram realizadas previsões utilizando quatro bancos de dados diferentes de treinamento. Primeiramente, apresenta-se uma comparação das previsões com a imagem de referência e, logo após, uma comparação direta com o trabalho de Vieira & Lambros [26], pois este é o objetivo deste estudo preliminar. As informações sobre os hiperparâmetros utilizados estão apresentadas na Tabela 1.

Tabela 2 Coeficiente de determinação R^2 para *Random Forest*

Deformação		BD 1	BD 2	BD 3	BD 4
Amostra 1	ε_{nn}	0.58	0.42	0.32	0.38
	ε_{tn}	0.72	0.41	0.51	0.57
	ε_{tt}	0.68	0.43	0.40	0.50
Amostra 2	ε_{nn}	0.27	0.53	0.12	0.32
	ε_{tn}	0.51	0.71	0.52	0.57
	ε_{tt}	0.14	0.61	0.25	0.45
Amostra 3	ε_{nn}	0.42	0.40	0.61	0.45
	ε_{tn}	0.39	0.39	0.57	0.46
	ε_{tt}	0.50	0.54	0.68	0.60

4.3.1

Amostra 1

A Figura 12a apresenta os contornos de grãos utilizados como referência, permitindo a comparação com as previsões obtidas para a amostra 1. No gráfico, as áreas com maior concentração de pontos vermelhos têm uma tendência de surgir trincas, uma vez que essas áreas apresentam o maior nível de deformação plástica. As áreas com pontos em azul-escuro representam os maiores níveis de deformação plástica negativa. Por outro lado, as áreas com pontos verdes indicam que não há deformação plástica. Os contornos de grãos gerados com 100% do BD1 para treinamento estão representados na Figura 12b. O comparativo visual com a figura de referência mostra que as deformações são coerentes com os resultados numéricos da Tabela 2, com o melhor valor para o BD1, de R^2 sendo 0.72 para a direção ε_{tn} . Em relação ao BD2, o R^2 foi de ~ 0.42 para as três direções. O BD3 apresentou valores entre 0.32 e 0.51 para as direções estudadas. O BD4 obteve o maior valor de 0.57 para a direção ε_{tn} e o menor de 0.38 para a direção ε_{nn} .

A amostra 1 apresenta o melhor resultado para a previsão obtida por meio do treinamento do conjunto de dados de 100% do BD 1. Este é um resultado esperado, uma vez que é composto por dados da referência. Isto quer dizer que, ao gerar uma previsão com base nos dados da referência, se tem um melhor resultado. O BD4 também apresentou uma previsão de resultados satisfatória, semelhante ao BD1, uma vez que, ao se utilizar uma parte dos dados originais para o treinamento, o modelo consegue elaborar uma previsão melhor.

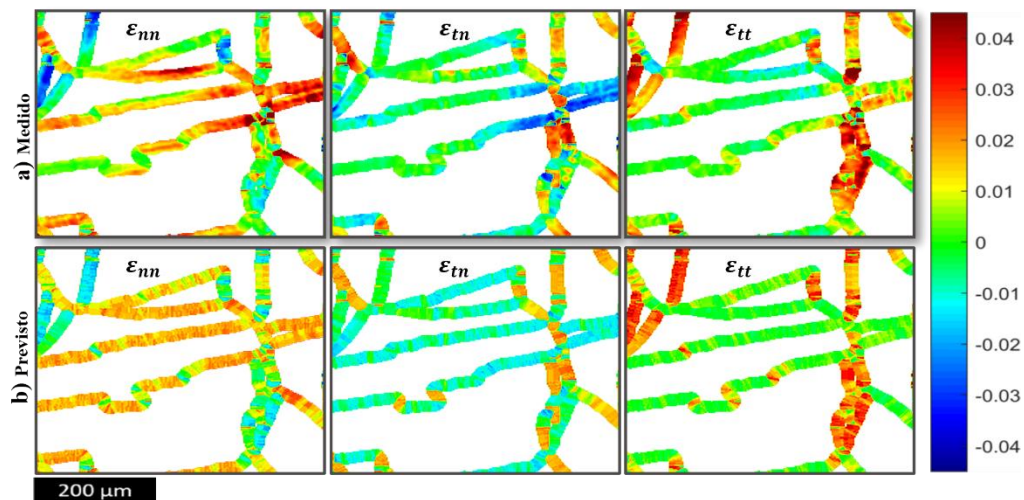


Figura 12 (a) Medidas de contorno de grão nas regiões do manto para a amostra 1. (b) Campo de deformações previstas equivalentes utilizando o BD1 para treinamento

4.3.2 Amostra 2

A Figura 13a apresenta os contornos de grãos de referência para a amostra em questão. Na Figura 13b estão os resultados da previsão utilizando o BD2 para realizar o treinamento. Segundo os resultados de R^2 0.53 (ϵ_{nn}), 0.71 (ϵ_{tn}) e 0.61 (ϵ_{tt}), é possível notar que os níveis de deformação plástica são semelhantes aos da referência. Usando o BD1 e o BD3 para o treinamento se obteve valores de R^2 semelhantes, como observado na Tabela 2, sendo o melhor resultado em ambos da direção ϵ_{tn} . O resultado da previsão com o BD4 para treinamento é satisfatório, apresentando valores de R^2 de 0.32 (ϵ_{nn}), 0.57 (ϵ_{tn}) e 0.45 (ϵ_{tt}).

Nesta amostra, o BD2, que contém os dados originais dos contornos de grãos, apresentou o melhor resultado como esperado. E o segundo melhor resultado foi a previsão que utilizou 1/3 dos dados de cada BD para fazer o treinamento (ver Tabela 2), demonstrando que o modelo consegue uma melhor previsão quando os dados da referência estão presentes no treinamento.

4.3.3 Amostra 3

Ao utilizar o BD1 e o BD2 para treinar a amostra, os valores de R^2 variam entre 0.39 e 0.54 (ver Tabela 2). A utilização do BD3 para treinamento é

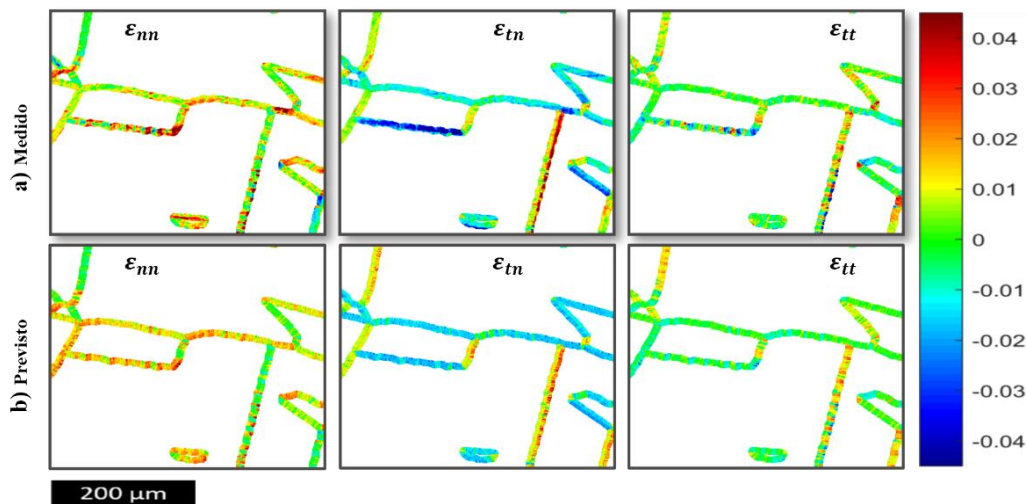


Figura 13 (a) Medidas de contorno de grão nas regiões do manto para a amostra 2. (b) Campo de deformações previstas equivalentes utilizando o BD2 para treinamento

demonstrada na Figura 14b, demonstrando uma melhora de ~19% em relação às previsões anteriores, com um R^2 de 0.68 para a direção tangencial. A microestrutura gerada com o BD4 para treinamento está ilustrada na Figura 14c. Essa previsão apresentou uma melhora de ~6% em relação aos BD 1 e 2 e uma queda de ~11% em relação ao BD3. O melhor valor de R^2 para esta previsão foi de 0.60 na direção tangencial.

Como nas amostras anteriores, o conjunto de dados que apresentou o melhor desempenho foi o constituído pelo mesmo conjunto de dados da referência, no caso o BD3. O BD4 obteve o segundo melhor resultado, novamente por conter dados da referência.

4.4 Discussão dos resultados

Para comparar este estudo com o de Vieira & Lambros [26], foram gerados gráficos de linha que demonstram o desempenho dos quatro BDS utilizados nas previsões, bem como um gráfico que demonstra a correlação entre os valores medidos e previstos, especificamente do BD4, conforme realizado no artigo de Vieira & Lambros [26]. Foram realizadas medições ao longo de uma seção (comprimento da seta), sendo essas seções selecionadas segundo a orientação de cada um dos contornos, uma vez que o parâmetro de entrada é justamente o ângulo geométrico do contorno de grão (α). As setas azuis estão em contornos aproximadamente verticais, as vermelhas em contornos aproximadamente horizontais e as verdes em contornos

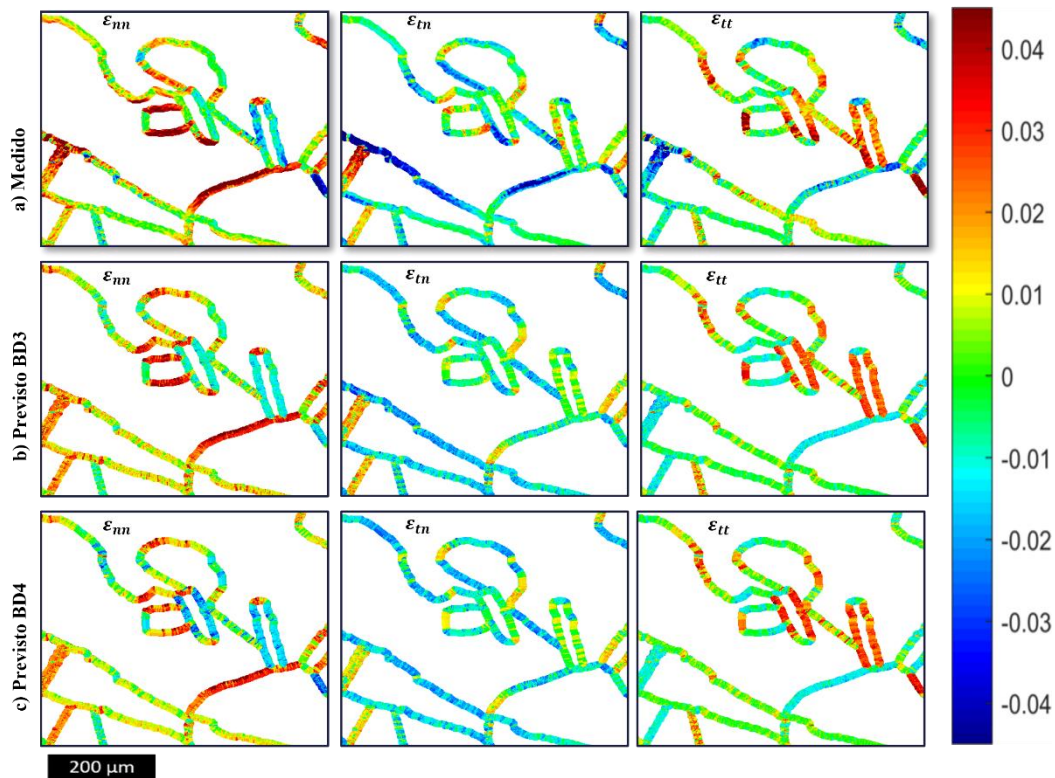


Figura 14 (a) Medições de contorno de grão nas regiões do manto para a amostra 3. (b) Campo de deformação previsto equivalente usando BD3 para treinamento. (c) Campo de deformação previsto equivalente usando BD4 para treinamento

próximos de 45 graus. A partir dessas medições, foi possível estabelecer uma correlação entre o medido e o previsto para as direções normal e cisalhante (ver Figura 15).

Na publicação de Vieira & Lambros [26], o valor médio para a correlação foi de 0.65 entre as amostras, com uma variação de 0.21 a 0.92. No entanto, neste estudo, a média obtida foi de 0.62 para as amostras, sendo o menor valor 0.13 e o maior 0.90 como pode ser visto na Tabela 3. Na Figura 16, é apresentada uma comparação com o artigo de Vieira & Lambros [26], onde foi feita a correlação dos valores medidos em comparação aos previstos para a combinação de dados ao longo de uma seção para os dois trabalhos. Considerando o valor deste estudo, de 0.56

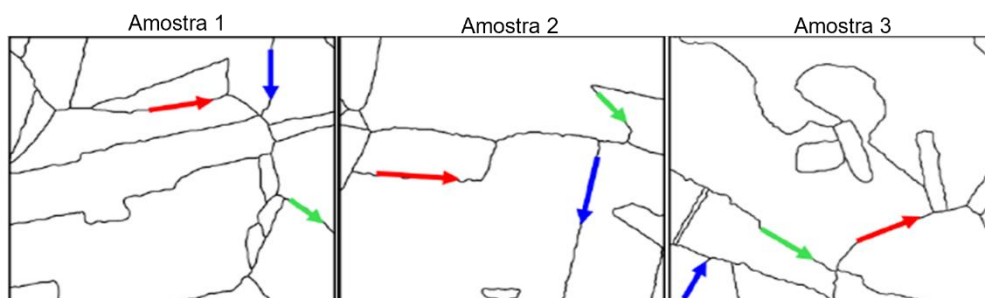


Figura 15 Seção onde foi medido o coeficiente de correlação de Pearson (R)

(Figura 16a), para a direção normal, e o valor do trabalho de Vieira & Lambros [26], de 0.76 (Figura 16c), para a direção normal. Neste estudo, a direção cisalhante foi de 0.75 (Figura 16b) e de 0.84 (Figura 16d) no estudo de Vieira & Lambros [26]. Ao analisar as Figura 16e e 16f, é possível notar que os picos e vales das previsões são claramente similares aos valores experimentais, o que demonstra que o modelo consegue prever variações locais com êxito.

Tabela 3 Coeficiente de correlação de Pearson (R)

Deformação		Seção 1 (vertical)	Seção 2 (horizontal)	Seção 3 (45 graus)
Amostra 1	ϵ_{nn}	0.81	0.80	0.50
	ϵ_{tn}	0.80	0.90	0.67
Amostra 2	ϵ_{nn}	0.73	0.87	0.72
	ϵ_{tn}	0.67	0.13	0.70
Amostra 3	ϵ_{nn}	0.56	0.44	0.41
	ϵ_{tn}	0.75	0.40	0.36

Ao analisar o resultado apresentado na Figura 16, é possível concluir que o estudo de Vieira & Lambros [26] apresentou resultados superiores ao presente

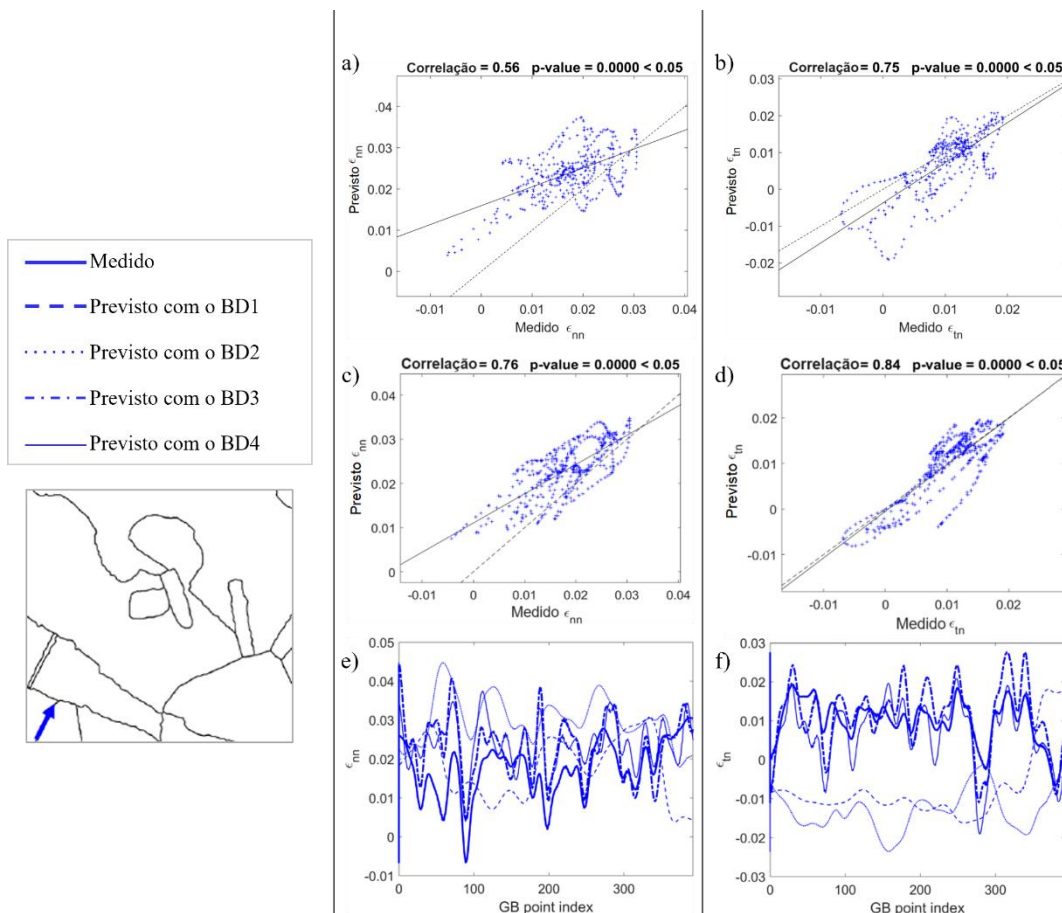


Figura 16 Comparação com o artigo de Vieira & Lambros (2021). (a) e (b) resultados obtidos neste trabalho. (c) e (d) resultados apresentados por Vieira & Lambros (2021). (e) e (f) Gráfico de linha mostrando as deformações plásticas normais e de cisalhamento

estudo. No entanto, ao comparar as médias de correlação para a combinação de dados de deformação plástica em contornos de grãos de um material policristalino nos dois estudos, nota-se que os resultados são bastante próximos, sendo de 0.65 no estudo de Vieira & Lambros [26] e de 0.62 no presente estudo. Com este resultado, é possível notar que o método de *Random Forest* é semelhante ao método de ANN na previsão de acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos. Em geral, o BD4 foi o banco de dados que apresentou a melhor previsão para cada uma das amostras estudadas.

5

Previsão do acúmulo de deformação plástica nos contornos de grãos de materiais policristalinos usando PCA e métodos de aprendizado supervisionado

5.1

Preparação das amostras

Antes de realizar o processo do PCA foi definido que cada amostra seria utilizada de três diferentes formas. Onde a primeira forma é um quadrado de 15×15 , a segunda um quadrado de 25×25 e a terceira um quadrado de 35×35 (ver Figura 17). Cada um desses quadrados serve como multiplicador do tamanho da amostra, sendo distribuído na área especificada, podendo assim extrair mais dados da amostra. O processo de criação dos quadrados se deu da seguinte forma: dividiu-se o valor do quadrado menos um por dois, para todos os tamanhos, como, por exemplo, para o tamanho de 15×15 foram dispensadas as sete primeiras e últimas linhas de cada amostra e as sete primeiras e últimas colunas de cada amostra. Depois foi realizada a filtragem dos dados com base nos contornos de grãos. Para os outros quadrados se procedeu da mesma forma.

5.2

Procedimento

Como mencionado no artigo de Vieira & Lambros [26] e no item 4, foram utilizados todos os dados de entrada para treinar e testar os modelos. Neste estudo é aplicado o método de redução de dimensionalidade (PCA) nos dados de entrada, para, posteriormente, realizar as previsões com os modelos escolhidos, utilizando um código Python com as bibliotecas *Pandas*, *Numpy*, *Scikit-Learn*, dentre outras. Antes de realizar o PCA, houve uma filtragem dos dados para três tamanhos diferentes (item 5.1), de modo a considerar o máximo de pontos possíveis que formam o contorno do grão. Desta forma, foi possível trabalhar com uma região da amostra e não apenas com um ponto, como descrito no item 4 e por Vieira & Lambros [26], na previsão acúmulo de deformação plástica.

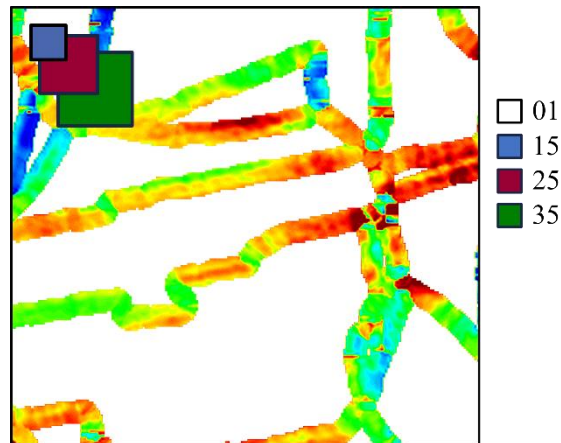


Figura 17 Demonstração das regiões utilizadas no PCA e nas previsões dos modelos

Desta forma, foi gerado um *Data Frame* com os valores do ângulo (α) no quadrado e as deformações plásticas nas direções, normal, cisalhante e tangencial, a qual são os valores-base de saída. Ao dividir os dados no quadrado foi criada a variável X0 que serviu de base para a extração dos dados do PCA, pois o X0 é composto pela área de entrada da amostra. Após a extração de características com o PCA, foram utilizados esses valores como dados de entrada para o treinamento e previsão do modelo. Cinco modelos foram selecionados para realizar os treinamentos e previsões, sendo eles: *Decision Tree* (DT), *Stochastic Gradient Descent* (SGD), *K-Nearest Neighbors* (KNN), *Random Forest* (RF) e *Gradient Boosting Regression* (GBR). Os dados foram divididos em 70% para treinamento/validação e 30% para testes de forma aleatória. A validação dos dados foi realizada através da validação cruzada dos dados de treinamento. O método de *Monte Carlo Cross Validation* também foi empregado para a reamostragem. A Figura 18 apresenta o fluxo de trabalho deste estudo.

Para assegurar a precisão dos modelos, é calculado o coeficiente de determinação (R^2), que corresponde à métrica de erro. A fim de ilustrar como o R^2 foi obtido, é possível visualizar um desses resultados na Figura 19.

5.3 Resultados

Para cumprir com o objetivo deste trabalho, foram definidos os parâmetros que seriam utilizados para todos os métodos. A variância para o PCA foi definida em 0.90. Dez iterações foram definidas para a reamostragem de *Monte Carlo* e o

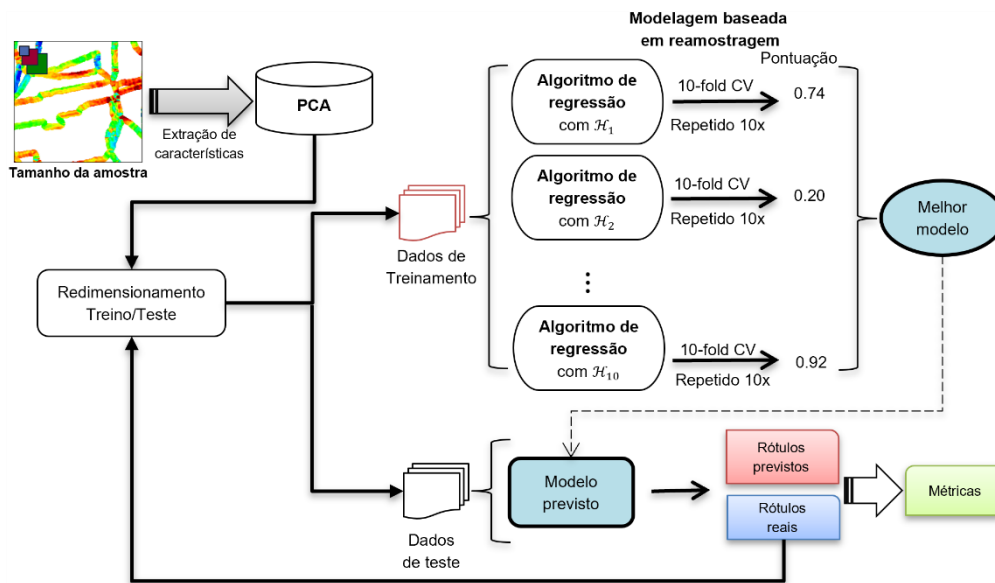


Figura 18 Fluxo de trabalho do estudo com o PCA

$k=6$ no k -fold cross validation. A Tabela 4 apresenta os hiperparâmetros dos cinco modelos escolhidos. A métrica utilizada para mensurar os resultados foi o coeficiente de determinação (R^2). Os modelos foram treinados nos tamanhos de 15, 25 e 35 para cada uma das três amostras utilizadas como base para a pesquisa. Nesta seção, serão apresentados os resultados do presente estudo, baseados em gráficos e tabelas de estatísticas, comparando-os diretamente com os obtidos no item 4.

Tabela 4 Hiperparâmetros para os modelos com PCA

Modelo	Nome	Intervalo	Melhor valor
DT	profundidade máxima da árvore	$\{2, 4, 6, 8\}$	8
	número mínimo de amostras divididas	<i>Uniform integer</i> $\{2, 3, \dots, 39\}$	3
	número mínimo de amostras de folhas	<i>Uniform integer</i> $\{1, 6, \dots, 105\}$	41
	número máximo de recursos	<i>auto, sqrt, log2</i>	<i>Sqrt</i>
	critério	<i>squared error</i>	<i>squared error</i>
GBR	Taxa de Aprendizagem	$\{0.0, 0.1, 0.2, 0.5\}$	0.1
	Função de perda	<i>Squared error, absolute error, Huber, quantile</i>	<i>Huber</i>
	Profundidade máxima	<i>random integer</i> $\{2, 20\}$	9
	número máximo de recursos	1	1
	número mínimo de amostras de folhas	<i>random integer</i> $\{1, 20\}$	14
	número mínimo de amostras divididas	<i>random integer</i> $\{2, 40\}$	32

	número de estágios de reforço	<i>random integer {10,200}</i>	65
KNN	pesos	<i>Uniform, distance</i>	<i>distance</i>
	Número de vizinhos	<i>{2,4,6,8,10}</i>	2
	Tamanho da folha	<i>{10,20,30,40,50}</i>	20
	Algoritmo	<i>auto, ball tree, kd tree, brute</i>	<i>auto</i>
	profundidade máxima da árvore	<i>random integer {2,20}</i>	16
RF	número mínimo de amostras divididas	<i>random integer {2,40}</i>	25
	número mínimo de amostras de folhas	<i>random integer {1,20}</i>	2
	número máximo de recursos	<i>Random variable</i>	0.5473
SGD	eta0	<i>{0.01, 0.05, 0.1}</i>	0.01
	máximo de iterações	<i>random integer {2,2000}</i>	820
	pena	<i>l2, l1, elastic net, None</i>	<i>l1</i>
	tolerância	<i>{1e-3}</i>	0.001

As figuras a seguir apresentam os resultados de um novo método de previsão de acúmulo de deformação plástica (DP) em contornos de grãos de materiais policristalinos, utilizando a técnica de aprendizado de máquina supervisionado com redução de dimensionalidade por meio do PCA. Como referência deste estudo, foram utilizados os dados do item 4, para os quais foi aplicado o método de *Random Forest*

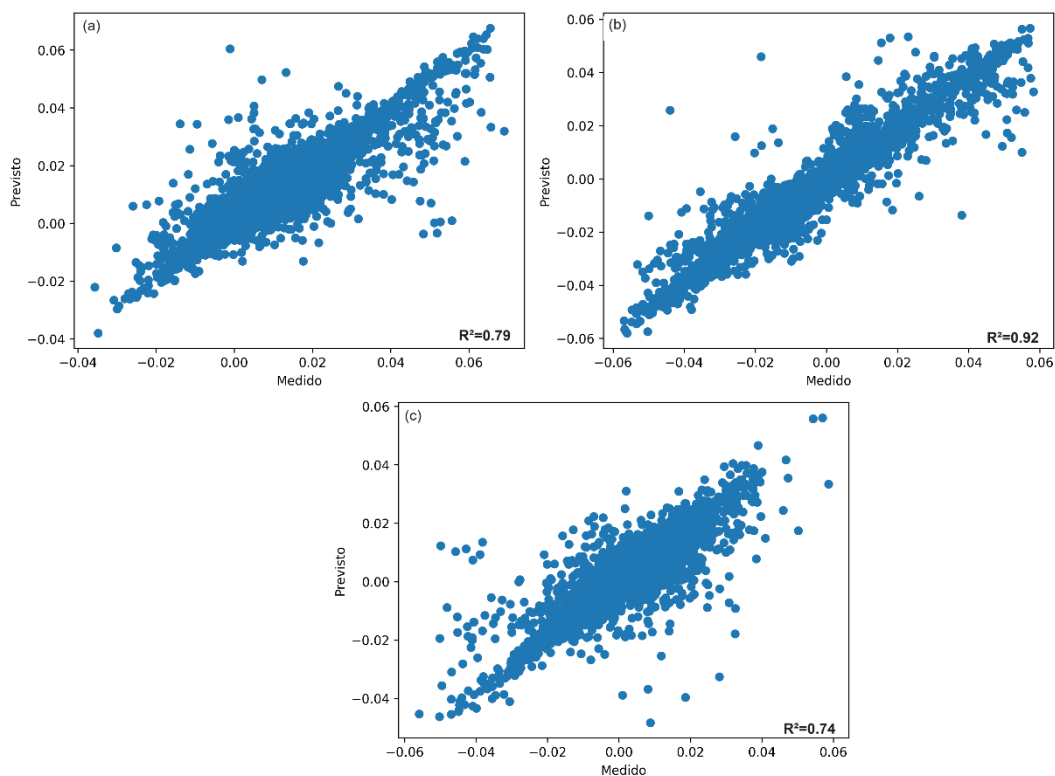


Figura 19 Gráfico de R^2 (a) direção normal; (b) direção cisalhante; (c) direção tangencial

para prever DP em contornos de grãos, sendo utilizadas três diferentes amostras para realizar as previsões. Neste estudo, foram utilizadas as mesmas amostras, porém foram divididas as áreas de previsão em regiões ao longo da amostra, em quadrados de tamanhos diferentes, sendo eles: 15×15 , 25×25 e 35×35 . A métrica empregada nos dois estudos foi o coeficiente de determinação (R^2).

A Figura 20 apresenta os três tamanhos testados neste trabalho e o tamanho de referência apresentado no item 4 para a Amostra 1 nas três direções da deformação plástica. Neste estudo, foram testados modelos com PCA, e, como pode ser observado na Figura 20, alguns modelos apresentaram pontos de *outlier*. Com base nos dados de dispersão, percebe-se que a maioria dos dados está bem próximos uns dos outros, sem grandes variações nos valores do R^2 , apenas o modelo de DT apresentou uma maior dispersão de dados. A maioria dos modelos com PCA apresentou resultados melhores que o modelo estudado no item 4, com exceção dos modelos DT e SGD, que apresentaram R^2 abaixo da referência. O modelo que apresentou o melhor desempenho para todos os tamanhos estudados com o PCA foi o KNN em todas as direções. O GBR também apresentou resultados satisfatórios, porém abaixo do KNN. O tamanho 35 foi o que apresentou o melhor resultado, uma vez que apresenta o maior número de dados. Para a amostra 1, o R^2 máximo foi de 0.92 para o KNN tamanho 35 na direção tangencial, enquanto o menor valor foi 0.11 para o DT tamanho 35 na direção cisalhante.

A Tabela 5 apresenta os resultados do coeficiente de determinação (R^2) detalhadamente para cada modelo estudado com o PCA e a referência da Amostra 1, observável na Figura 20. Além dos dados apresentados na Figura 20, a Tabela 5 apresenta os desvios padrão e mediana de cada modelo e o tamanho estudado. O modelo KNN apresentou a melhor mediana entre as três direções estudadas. Para as direções normal e cisalhante, os modelos RF, KNN, GBR e SGD, no tamanho 15, apresentaram o menor valor para o desvio padrão. No que diz a respeito à direção tangencial, o modelo RF de tamanho 35 apresentou o menor desvio padrão.

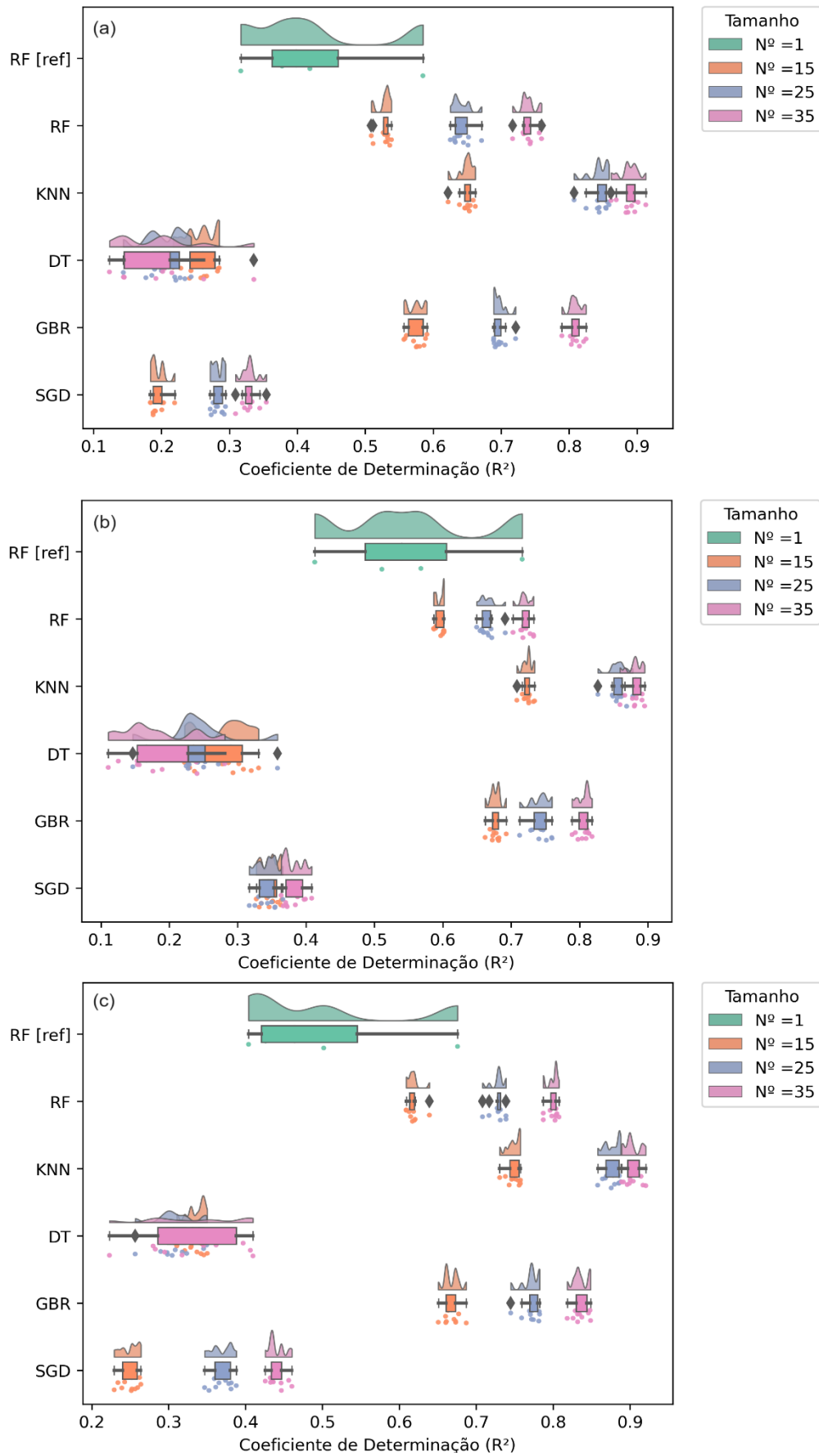


Figura 20 Coeficiente de determinação R^2 para o acúmulo de deformação plástica Amostra 1, nas direções (a) normal, (b) cisalhante e (c) tangencial

Tabela 5 Coeficiente de determinação (R^2) obtido nas previsões para a Amostra 1

Direção	Modelo	Tamanho	1º quartil	Máx.	Média	Mín.	3º quartil	Mediana	Desvio padrão	
ϵ_{nn}	RF (Ref.)	N.º=1	0.3624	0.5849	0.4245	0.3168	0.4601	0.4185	0.1148	
	RF	N.º=15	0.5269	0.5385	0.5278	0.5088	0.5332	0.5310	0.0099	
		N.º=25	0.6322	0.6713	0.6416	0.6252	0.6497	0.6376	0.0137	
		N.º=35	0.7333	0.7595	0.7394	0.7169	0.7432	0.7382	0.0122	
	KNN	N.º=15	0.6466	0.6621	0.6485	0.6220	0.6542	0.6508	0.0099	
		N.º=25	0.8419	0.8588	0.8429	0.8075	0.8545	0.8444	0.0159	
		N.º=35	0.8842	0.9130	0.8886	0.8619	0.8966	0.8894	0.0142	
	DT	N.º=15	0.2418	0.2850	0.2569	0.2173	0.2785	0.2603	0.0251	
		N.º=25	0.1868	0.2436	0.2043	0.1439	0.2259	0.2098	0.0235	
		N.º=35	0.1450	0.3360	0.1969	0.1234	0.2127	0.1968	0.0641	
	GBR	N.º=15	0.5632	0.5908	0.5744	0.5569	0.5849	0.5756	0.0099	
		N.º=25	0.6902	0.7214	0.6975	0.6890	0.6993	0.6953	0.0137	
		N.º=35	0.8040	0.8250	0.8090	0.7895	0.8143	0.8084	0.0102	
	SGD	N.º=15	0.1876	0.2193	0.1947	0.1836	0.2005	0.1905	0.0099	
		N.º=25	0.2767	0.2942	0.2828	0.2717	0.2895	0.2816	0.0137	
		N.º=35	0.3235	0.3544	0.3300	0.3091	0.3327	0.3296	0.0122	
	ϵ_{tn}	RF (Ref.)	N.º=1	0.4865	0.7162	0.5520	0.4128	0.6051	0.5681	0.1269
		RF	N.º=15	0.5898	0.6020	0.5957	0.5866	0.6012	0.5985	0.0065
N.º=25			0.6576	0.6915	0.6646	0.6497	0.6697	0.6624	0.0118	
N.º=35			0.7162	0.7329	0.7204	0.7028	0.7263	0.7194	0.0091	
KNN		N.º=15	0.7195	0.7344	0.7235	0.7084	0.7266	0.7254	0.0065	
		N.º=25	0.8502	0.8779	0.8562	0.8269	0.8624	0.8570	0.0144	
		N.º=35	0.8782	0.8953	0.8810	0.8592	0.8896	0.8820	0.0088	
DT		N.º=15	0.2472	0.3307	0.2808	0.2224	0.3068	0.2899	0.0408	
		N.º=25	0.2277	0.3583	0.2431	0.1468	0.2520	0.2355	0.0422	
		N.º=35	0.1531	0.2812	0.1826	0.1108	0.2271	0.1661	0.0550	
GBR		N.º=15	0.6727	0.6928	0.6767	0.6620	0.6814	0.6765	0.0065	
		N.º=25	0.7334	0.7598	0.7422	0.7124	0.7507	0.7451	0.0147	
		N.º=35	0.7993	0.8184	0.8059	0.7892	0.8117	0.8090	0.0094	
SGD		N.º=15	0.3367	0.3641	0.3471	0.3274	0.3568	0.3487	0.0065	
		N.º=25	0.3316	0.3661	0.3422	0.3171	0.3533	0.3445	0.0118	
		N.º=35	0.7993	0.8184	0.8059	0.7892	0.8117	0.8090	0.0094	
ϵ_{tt}		RF (Ref.)	N.º=1	0.4206	0.6758	0.5019	0.4040	0.5452	0.5017	0.1232
		RF	N.º=15	0.6132	0.6392	0.6176	0.6090	0.6193	0.6162	0.0086
	N.º=25		0.7276	0.7388	0.7280	0.7083	0.7315	0.7291	0.0093	
	N.º=35		0.7967	0.8077	0.7995	0.7873	0.8038	0.8029	0.0072	
	KNN	N.º=15	0.7437	0.7575	0.7483	0.7306	0.7556	0.7497	0.0086	
		N.º=25	0.8683	0.8881	0.8761	0.8580	0.8856	0.8778	0.0106	
		N.º=35	0.8971	0.9206	0.9033	0.8890	0.9118	0.9002	0.0107	
	DT	N.º=15	0.3289	0.3502	0.3355	0.3107	0.3452	0.3395	0.0129	
		N.º=25	0.2981	0.3495	0.3092	0.2565	0.3221	0.3066	0.0272	
		N.º=35	0.2857	0.4097	0.3318	0.2230	0.3881	0.3315	0.0605	
	GBR	N.º=15	0.6607	0.6871	0.6678	0.6507	0.6733	0.6674	0.0086	

	N.º=25	0.7697	0.7825	0.7710	0.7449	0.7797	0.7725	0.1189
	N.º=35	0.8297	0.8488	0.8352	0.8184	0.8439	0.8332	0.2581
SGD	N.º=15	0.2400	0.2639	0.2491	0.2292	0.2589	0.2519	0.0086
	N.º=25	0.3599	0.3880	0.3688	0.3468	0.3805	0.3698	0.0093
	N.º=35	0.4332	0.4603	0.4406	0.4257	0.4466	0.4356	0.0113

Na Figura 21 são apresentados os resultados de R^2 para a amostra 2 para os modelos estudados juntamente com o PCA e tendo como base o modelo utilizado no item 4. Da mesma forma que a amostra 1, para a amostra 2, os modelos com o PCA obtiveram resultados melhores que a referência, exceto os modelos DT e SGD na direção normal e tangencial, com o DT apresentando a maior dispersão de dados para as três direções estudadas (normal, cisalhante e tangencial). Os valores médios do modelo DT para os tamanhos 15 e 25 foram superiores a 0.50, enquanto para o tamanho de 35 foram superiores a 0.65, tendo os maiores valores médios do modelo nesta amostra. O SGD na direção cisalhante apresentou médias acima de 0.55 para todos os tamanhos estudados, o que está próximo da média da referência. O modelo KNN apresentou os melhores resultados para os tamanhos 25 e 35, com valores máximos de 0.69 para a direção normal, 0.88 para a cisalhante e 0.70 para a tangencial, e de 0.81 para a direção normal, 0.92 para a cisalhante, 0.77 para a tangencial, respectivamente. No entanto, os valores para o tamanho 15 ficaram próximos aos valores da referência, com média de 0.31 para a normal, 0.58 para a cisalhante e 0.37 para a tangencial para a referência. Já para o KNN as médias foram de 0.37 para a normal, 0.70 para a cisalhante e 0.46 para a tangencial.

Os percentuais apresentados na Figura 21, podem ser vistos detalhadamente na Tabela 6. A mediana e desvio padrão são acrescidos para os mesmos valores de R^2 , considerando a amostra 2. O modelo KNN apresenta os melhores resultados para a mediana no tamanho 35 nas três direções consideradas neste estudo. Ao analisar a dispersão por meio do desvio padrão, é possível notar que há uma grande variedade de modelos e tamanhos, sendo que, para a direção normal, o modelo GBR de tamanho 25 apresentou o menor valor. Para as direções cisalhante e tangencial, o desvio padrão são equivalentes aos tamanhos 35 e 15 dos modelos KNN e SGD, respectivamente.

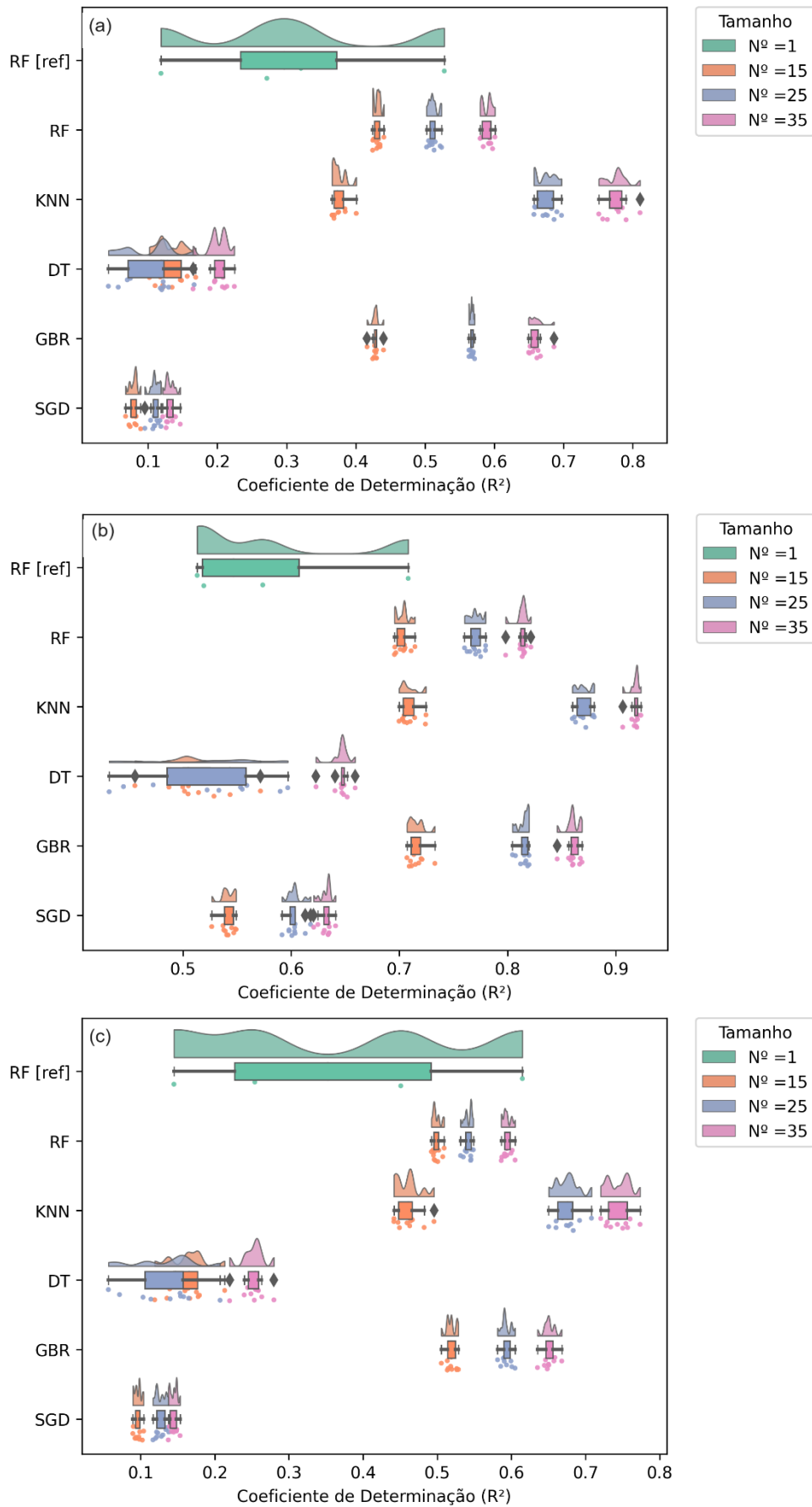


Figura 21 Coeficiente de determinação R^2 para o acúmulo de deformação plástica Amostra 2, nas direções (a) normal, (b) cisalhante e (c) tangencial

Tabela 6 Coeficiente de determinação (R^2) obtido nas previsões para a Amostra 2

Direção	Modelo	Tamanho	1º quartil	Máx.	Média	Mín.	3º quartil	Mediana	Desvio padrão	
ε_{nn}	RF (Ref.)	N.º=1	0.2333	0.5277	0.3096	0.1185	0.3725	0.3207	0.1690	
	RF	N.º=15	0.4269	0.4404	0.4310	0.4242	0.4342	0.4313	0.0052	
		N.º=25	0.5067	0.5238	0.5115	0.5021	0.5142	0.5103	0.0070	
		N.º=35	0.5824	0.6008	0.5897	0.5795	0.5946	0.5920	0.0075	
	KNN	N.º=15	0.3685	0.4005	0.3759	0.3656	0.3820	0.3730	0.0110	
		N.º=25	0.6617	0.6970	0.6751	0.6572	0.6853	0.6753	0.0141	
		N.º=35	0.7663	0.8105	0.7769	0.7509	0.7837	0.7781	0.0172	
	DT	N.º=15	0.1183	0.1687	0.1325	0.1018	0.1477	0.1278	0.0215	
		N.º=25	0.0709	0.1664	0.1021	0.0426	0.1225	0.1187	0.0407	
		N.º=35	0.1958	0.2245	0.2006	0.1648	0.2098	0.2020	0.0168	
	GBR	N.º=15	0.4266	0.4399	0.4279	0.4162	0.4297	0.4280	0.0059	
		N.º=25	0.5657	0.5715	0.5672	0.5633	0.5690	0.5671	0.0027	
		N.º=35	0.6525	0.6861	0.6600	0.6495	0.6628	0.6579	0.0107	
	SGD	N.º=15	0.0748	0.0892	0.0788	0.0674	0.0825	0.0803	0.0062	
		N.º=25	0.1073	0.1185	0.1095	0.0953	0.1141	0.1091	0.0068	
		N.º=35	0.1269	0.1463	0.1317	0.1210	0.1353	0.1296	0.0075	
	ε_{tn}	RF (Ref.)	N.º=1	0.5178	0.7082	0.5786	0.5132	0.6074	0.5738	0.0906
		RF	N.º=15	0.6978	0.7144	0.7033	0.6955	0.7051	0.7042	0.0063
N.º=25			0.7661	0.7798	0.7705	0.7603	0.7748	0.7700	0.0067	
N.º=35			0.8122	0.8216	0.8134	0.7983	0.8156	0.8145	0.0060	
KNN		N.º=15	0.7035	0.7246	0.7095	0.6997	0.7132	0.7058	0.0088	
		N.º=25	0.8639	0.8802	0.8699	0.8599	0.8768	0.8689	0.0074	
		N.º=35	0.9173	0.9232	0.9178	0.9065	0.9199	0.9192	0.0045	
DT		N.º=15	0.5002	0.5717	0.5112	0.4556	0.5251	0.5049	0.0335	
		N.º=25	0.4850	0.5969	0.5259	0.4319	0.5580	0.5433	0.0613	
		N.º=35	0.6465	0.6592	0.6459	0.6230	0.6489	0.6469	0.0099	
GBR		N.º=15	0.7106	0.7329	0.7158	0.7071	0.7196	0.7142	0.0076	
		N.º=25	0.8130	0.8199	0.8149	0.8046	0.8186	0.8165	0.0053	
		N.º=35	0.8587	0.8688	0.8604	0.8459	0.8651	0.8603	0.0066	
SGD		N.º=15	0.5381	0.5492	0.5413	0.5267	0.5465	0.5412	0.0067	
		N.º=25	0.5987	0.6180	0.6033	0.5916	0.6037	0.6032	0.0075	
		N.º=35	0.6299	0.6411	0.6321	0.6208	0.6350	0.6343	0.0058	
ε_{tt}		RF (Ref.)	N.º=1	0.2267	0.6149	0.3662	0.1449	0.4919	0.4509	0.2086
		RF	N.º=15	0.4952	0.5094	0.4991	0.4922	0.5017	0.4970	0.0057
	N.º=25		0.5383	0.5488	0.5415	0.5315	0.5455	0.5424	0.0056	
	N.º=35		0.5906	0.6051	0.5941	0.5864	0.5982	0.5930	0.0061	
	KNN	N.º=15	0.4477	0.4957	0.4611	0.4416	0.4660	0.4612	0.0176	
		N.º=25	0.6626	0.7081	0.6756	0.6505	0.6827	0.6757	0.0169	
		N.º=35	0.7306	0.7737	0.7450	0.7206	0.7562	0.7467	0.0169	
	DT	N.º=15	0.1444	0.2134	0.1629	0.1190	0.1770	0.1652	0.0270	
		N.º=25	0.1059	0.2071	0.1322	0.0565	0.1569	0.1465	0.0485	
		N.º=35	0.2454	0.2797	0.2521	0.2200	0.2587	0.2542	0.0161	
	GBR	N.º=15	0.5139	0.5287	0.5186	0.5056	0.5246	0.5187	0.0071	

	N.º=25	0.5896	0.6051	0.5928	0.5814	0.5980	0.5908	0.0072
	N.º=35	0.6468	0.6680	0.6511	0.6353	0.6561	0.6503	0.0089
SGD	N.º=15	0.0928	0.1040	0.0962	0.0894	0.0986	0.0962	0.0049
	N.º=25	0.1215	0.1380	0.1268	0.1166	0.1329	0.1255	0.0072
	N.º=35	0.1397	0.1532	0.1445	0.1373	0.1483	0.1450	0.0052

A Figura 22 apresenta os resultados de R^2 para a amostra 3 para os modelos estudados em conjunto com o PCA, tendo como base o modelo utilizado no item 4. Novamente, os modelos estudados com o PCA obtiveram resultados melhores que o modelo utilizado como base, com exceção dos modelos DT e SGD. O modelo DT apresentou uma grande dispersão de dados nas três direções estudadas e os valores médios apresentados foram bastante inferiores à referência. O modelo SGD não apresentou uma grande dispersão de dados, mas os seus valores médios também foram bastante inferiores à referência. Como nas outras amostras, o modelo KNN apresentou a melhor média de R^2 para os tamanhos 25 e 35, com valores médios variando entre 0.80 e 0.92. No tamanho 15, os valores variaram entre 0.50 e 0.65, o que, apesar de estar abaixo da média dos outros tamanhos, permanece acima da média da referência. Os modelos RF e GBR apresentaram médias semelhantes para cada um dos tamanhos utilizados.

A Tabela 7 apresenta, detalhadamente, os percentuais apresentados na Figura 22. Também são mostrados a mediana e o desvio padrão para cada um dos modelos e tamanhos estudados do R^2 para a Amostra 3. O modelo KNN apresenta os melhores resultados para a mediana no tamanho 35 nas três direções consideradas neste estudo. Ao analisar a dispersão (desvio padrão), é possível notar uma grande variedade de modelos e tamanhos, sendo que, para a direção normal, o modelo GBR de tamanho 15 apresentou o menor valor. No que diz respeito à direção cisalhante, o modelo que apresentou o menor valor foi o KNN no tamanho 35, enquanto na direção tangencial o modelo RF correspondente ao tamanho 15 apresentou o menor valor.

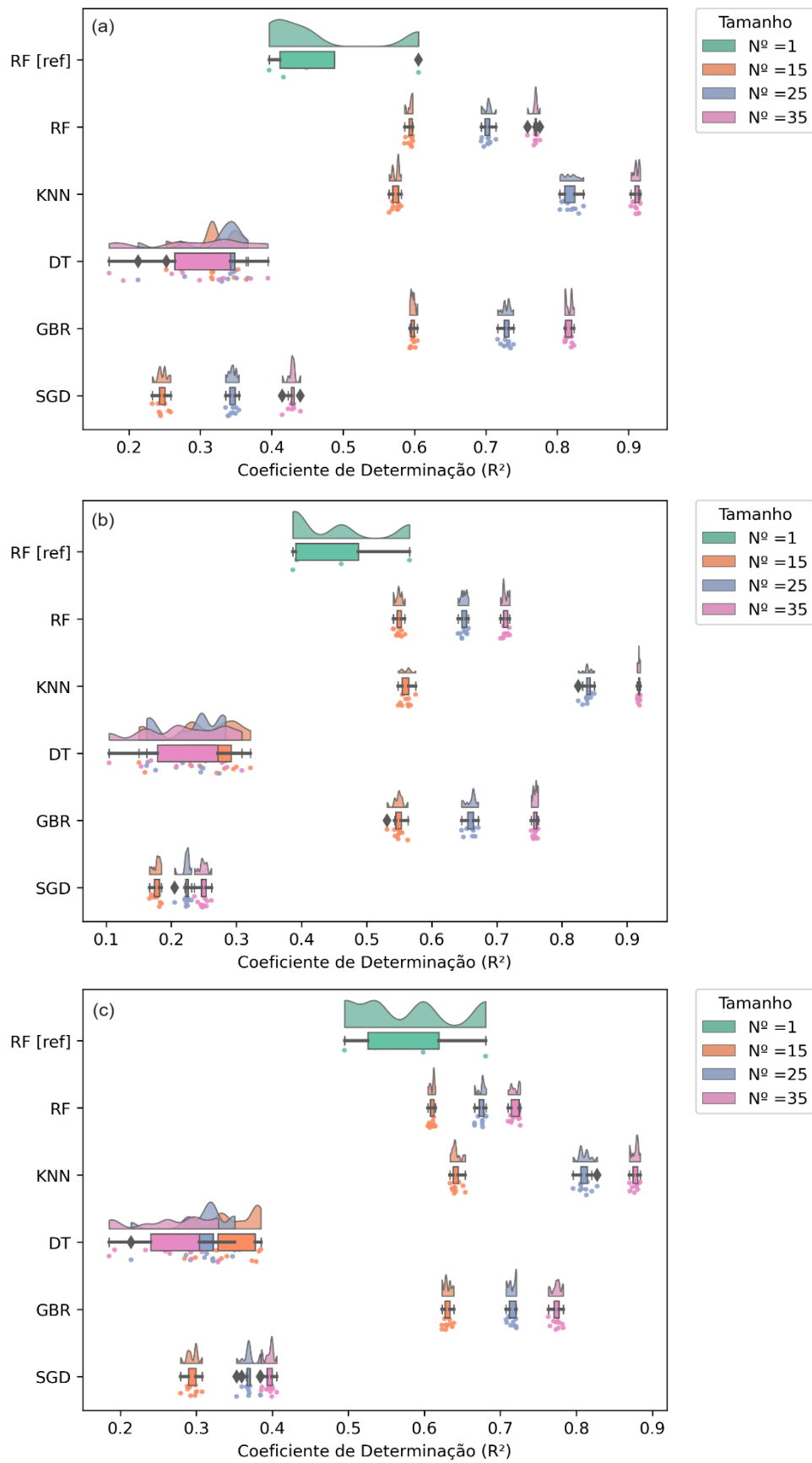


Figura 22 Coeficiente de determinação R^2 para o acúmulo de deformação plástica Amostra 3, nas direções (a) normal, (b) cisalhante e (c) tangencial

Tabela 7 Coeficiente de determinação (R^2) obtido nas previsões para a Amostra 3

Direção	Modelo	Tamanho	1º quartil	Máx.	Média	Mín.	3º quartil	Mediana	Desvio padrão	
ϵ_{nn}	RF (Ref.)	N.º=1	0.4115	0.6057	0.4669	0.3964	0.4880	0.4488	0.0950	
	RF	N.º=15	0.5922	0.5976	0.5938	0.5862	0.5967	0.5952	0.0041	
		N.º=25	0.6985	0.7142	0.7024	0.6934	0.7052	0.7032	0.0061	
		N.º=35	0.7690	0.7757	0.7691	0.7584	0.7706	0.7696	0.0044	
	KNN	N.º=15	0.5694	0.5814	0.5739	0.5646	0.5774	0.5763	0.0053	
		N.º=25	0.8100	0.8368	0.8183	0.8038	0.8246	0.8174	0.0107	
		N.º=35	0.9087	0.9164	0.9108	0.9033	0.9144	0.9106	0.0042	
	DT	N.º=15	0.3159	0.3644	0.3199	0.2523	0.3461	0.3174	0.0353	
		N.º=25	0.3299	0.3667	0.3245	0.2128	0.3484	0.3405	0.0457	
		N.º=35	0.2639	0.3948	0.2968	0.1723	0.3422	0.3125	0.0729	
	GBR	N.º=15	0.5953	0.6042	0.5977	0.5934	0.5993	0.5973	0.0033	
		N.º=25	0.7256	0.7386	0.7284	0.7165	0.7319	0.7292	0.0066	
		N.º=35	0.8116	0.8236	0.8163	0.8107	0.8201	0.8169	0.0049	
	SGD	N.º=15	0.2427	0.2584	0.2468	0.2327	0.2503	0.2467	0.0075	
		N.º=25	0.3411	0.3541	0.3448	0.3354	0.3487	0.3449	0.0057	
		N.º=35	0.4275	0.4403	0.4284	0.4147	0.4310	0.4286	0.0065	
	ϵ_{tn}	RF (Ref.)	N.º=1	0.3911	0.5659	0.4516	0.3867	0.4873	0.4611	0.0834
		RF	N.º=15	0.5462	0.5588	0.5491	0.5409	0.5529	0.5490	0.0056
N.º=25			0.6463	0.6564	0.6492	0.6404	0.6530	0.6495	0.0050	
N.º=35			0.7099	0.7198	0.7131	0.7057	0.7165	0.7121	0.0046	
KNN		N.º=15	0.5544	0.5752	0.5605	0.5484	0.5645	0.5619	0.0082	
		N.º=25	0.8376	0.8496	0.8387	0.8251	0.8430	0.8386	0.0069	
		N.º=35	0.9172	0.9203	0.9181	0.9157	0.9190	0.9180	0.0015	
DT		N.º=15	0.2271	0.3216	0.2478	0.1504	0.2922	0.2567	0.0580	
		N.º=25	0.1864	0.2832	0.2295	0.1622	0.2675	0.2453	0.0471	
		N.º=35	0.1784	0.3084	0.2198	0.1046	0.2716	0.2198	0.0644	
GBR		N.º=15	0.5449	0.5632	0.5487	0.5313	0.5529	0.5492	0.0084	
		N.º=25	0.6551	0.6714	0.6599	0.6458	0.6643	0.6628	0.0081	
		N.º=35	0.7561	0.7633	0.7586	0.7528	0.7609	0.7592	0.0035	
SGD		N.º=15	0.1740	0.1849	0.1774	0.1665	0.1815	0.1787	0.0060	
		N.º=25	0.2221	0.2309	0.2227	0.2052	0.2257	0.2242	0.0068	
		N.º=35	0.2459	0.2616	0.2488	0.2356	0.2532	0.2487	0.0074	
ϵ_{tt}		RF (Ref.)	N.º=1	0.5255	0.6807	0.5775	0.4950	0.6191	0.5985	0.0809
		RF	N.º=15	0.6077	0.6145	0.6103	0.6047	0.6127	0.6116	0.0033

	N.º=25	0.6721	0.6814	0.6748	0.6660	0.6779	0.6764	0.0054
	N.º=35	0.7144	0.7262	0.7190	0.7103	0.7244	0.7184	0.0058
KNN	N.º=15	0.6378	0.6540	0.6420	0.6339	0.6445	0.6402	0.0124
	N.º=25	0.8056	0.8274	0.8108	0.7958	0.8143	0.8100	0.0090
	N.º=35	0.8744	0.8842	0.8775	0.8699	0.8806	0.8789	0.0047
DT	N.º=15	0.3281	0.3849	0.3460	0.2846	0.3775	0.3486	0.0356
	N.º=25	0.2969	0.3507	0.3082	0.2142	0.3222	0.3177	0.0388
	N.º=35	0.2398	0.3291	0.2687	0.1853	0.3041	0.2789	0.0517
GBR	N.º=15	0.6270	0.6388	0.6302	0.6232	0.6337	0.6298	0.0056
	N.º=25	0.7115	0.7211	0.7152	0.7076	0.7202	0.7154	0.0052
	N.º=35	0.7708	0.7828	0.7739	0.7632	0.7774	0.7744	0.0064
SGD	N.º=15	0.2894	0.3076	0.2945	0.2794	0.2996	0.2954	0.0081
	N.º=25	0.3666	0.3847	0.3694	0.3529	0.3704	0.3688	0.0096
	N.º=35	0.3929	0.4058	0.3960	0.3855	0.3995	0.3980	0.0064

A Figura 23 apresenta uma comparação entre o valor medido experimentalmente para a amostra 2 e o valor previsto para a mesma amostra usando o método de PCA, que utiliza o quadrado de 35×35 , e o KNN como método principal para a previsão da amostra. Considerando-se que este método e a amostra apresentaram os melhores resultados para a métrica avaliada (R^2) dentre todos os outros estudados. Como observado, as imagens são bastante parecidas, porém é possível verificar uma diferença sutil na intensidade de cores mais ao centro das imagens, onde estão os quadrados gerados para o PCA.

5.4 Discussão dos resultados

Para avaliar o desempenho dos modelos utilizados para prever deformação plástica neste trabalho, foram realizadas medições de acordo com o descrito no item 4.4 e apresentado na Figura 15.

A Tabela 8 apresenta os resultados do coeficiente de correlação de *Pearson* (R) para as três amostras entre o medido experimentalmente e o previsto para o tamanho de 35, com a arquitetura combinada de PCA e os métodos de *Decision Tree*, KNN, *Random Forest* e SGD. O modelo de DT teve uma correlação média de 0.83, sendo o menor valor 0.49 e o maior valor 0.99. A Amostra 1 apresentou os maiores valores de correlação geral para o modelo. A média de correlação para o

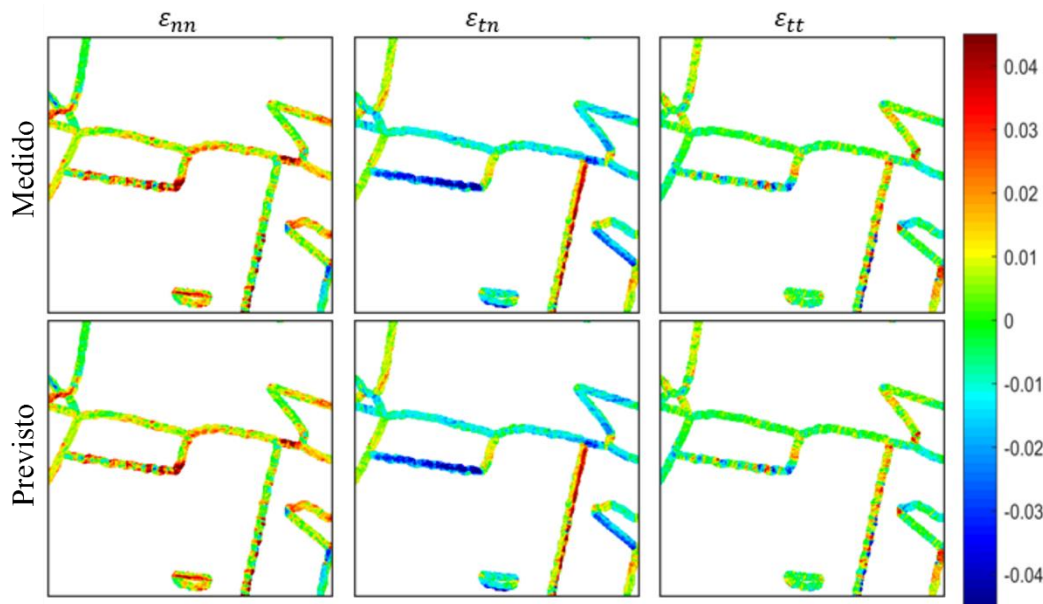


Figura 23 Comparação Medido x previsto *K-Nearest Neighbors* - Amostra 2 (35x35)

modelo de KNN foi de 0.95, com o menor valor sendo de 0.75 e o maior valor sendo 1.00. Novamente, a amostra 1 obteve o melhor resultado. A média para o modelo de *Random Forest* foi de 0.91, com o menor valor de 0.75 e o maior valor de 1.00. A amostra que obteve a melhor média foi a amostra 1 novamente. Por último, o modelo de SGD apresentou uma média de 0.80, com o menor valor de 0.48 e o maior valor de 0.98. O modelo SGD foi o que obteve a menor média entre todos, enquanto a amostra 1 obteve a melhor média entre as três estudadas. Isso acontece porque o número total de dados da Amostra 1 é menor do que o dos outros dois, devido à localização dos pontos medidos, situados mais externamente, eliminando as primeiras e as últimas linhas e colunas dos dados na elaboração dos dados para o PCA, que acaba influenciando na medição.

Tabela 8 Coeficiente de correlação de *Pearson* (R)

Modelo	Amostra	Seção 1 azul		Seção 2 vermelho		Seção 3 verde	
		ϵ_{nn}	ϵ_{tn}	ϵ_{nn}	ϵ_{tn}	ϵ_{nn}	ϵ_{tn}
DT	1	0.83	0.77	0.89	0.85	0.99	0.98
	2	0.80	0.73	0.89	0.49	0.87	0.88
	3	0.89	0.90	0.89	0.72	0.91	0.68
KNN	1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
	2	0.92	0.94	0.97	0.91	0.98	0.99
	3	0.75	0.90	0.92	0.88	0.98	0.99
RF	1	0.82	0.87	0.97	0.89	1.00	1.00
	2	0.94	0.93	0.95	0.75	0.97	0.95
	3	0.91	0.91	0.92	0.85	0.92	0.85
SGD	1	0.79	0.89	0.73	0.86	0.98	0.96
	2	0.83	0.75	0.89	0.48	0.90	0.88
	3	0.84	0.86	0.65	0.62	0.89	0.68

Comparando diretamente com o artigo de Vieira & Lambros [26] as previsões utilizando o PCA e métodos de aprendizado supervisionado atingiram médias superiores, com a menor média entre os modelos sendo de 0.80 e a maior 0.95, enquanto a média obtida por Vieira & Lambros [26] foi de 0.65.

Como o KNN é um algoritmo de aprendizado de máquina que utiliza a média das instâncias em pontos próximos para a sua previsão, isso pode ser um indicador de resultados satisfatórios para este estudo, uma vez que os vizinhos mais próximos têm um grande impacto no resultado do ponto previsto. No entanto, o PCA permite uma redução da amostra, mantendo a variância dos dados, garantindo a utilização das informações mais importantes da amostra para fins de previsão. Isto permite gerar melhores resultados na estimativa do acúmulo de deformações plásticas em contornos de grãos de um material metálico policristalino.

Outro ponto relevante a ser destacado é o tamanho dos quadrados utilizados para reduzir a dimensionalidade. À medida que o quadrado aumenta, o resultado da previsão melhora significativamente, pois, quanto maior o quadrado, mais informações da região da amostra são consideradas. Neste estudo, o maior tamanho foi de 35×35 , devido, sobretudo, ao custo computacional para a geração das previsões do acúmulo de deformação plástica.

6

Conclusões gerais e trabalhos futuros

Perante as discussões dos resultados apresentadas ao longo do texto é possível afirmar que foi realizado um aprimoramento na previsão de acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos de um material policristalino. Para atingir esse objetivo foi proposto um novo método de previsão de deformação plástica.

Inicialmente, realizou-se um estudo preliminar com o modelo de *Random Forest* com o intuito de testar a eficácia do algoritmo e comparar os resultados com o trabalho proposto por Vieira & Lambros [26]. Para isso, utilizou-se o ângulo geométrico do contorno do grão α como dado de entrada e a técnica de validação cruzada para validar o modelo. Os resultados apontam que o ângulo geométrico α pode ser considerado um bom preditor de acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos de um material policristalino nas direções normal e cisalhante.

A utilização do método *Random Forest* sem PCA para prever o acúmulo de deformação plástica em contornos de grão de um material policristalino apresenta resultados semelhantes aos obtidos por Vieira & Lambros [26], ressaltando que os autores utilizaram Redes Neurais Artificiais. Ao analisar o coeficiente de determinação, R^2 , percebe-se que os valores alcançados são satisfatórios.

Após o estudo preliminar, adotou-se uma nova abordagem, utilizando a técnica de redução de dimensionalidade com PCA, para prever o acúmulo de deformações plásticas. Foram considerados os seguintes modelos: *Decision Tree*, *Stochastic Gradient Descent*, *K-Nearest Neighbors*, *Random Forest* e *Gradient Boosting Regression*, em conjunto com a técnica de reamostragem de *Monte Carlo Cross Validation*.

A nova técnica de extração de características principais, PCA, apresentou uma melhora no coeficiente de correlação de *Pearson* em cerca de 30% em relação ao trabalho apresentado por Vieira & Lambros [26] e ao estudo preliminar. Este resultado permite fazer uma alusão ao parâmetro físico conhecido como *Representative Volume Element* (RVE), onde a vizinhança de um ponto influencia no comportamento daquele ponto.

Dentre os cinco algoritmos utilizados para realizar as previsões do acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos com PCA, o KNN foi o que apresentou os melhores resultados para todas as amostras analisadas. É importante lembrar que o algoritmo KNN considera a vizinhança na previsão dos resultados, o qual justifica o seu desempenho na previsão de acúmulo de deformação plástica em contornos de grãos de um material policristalino.

Outro aspecto a ser destacado é o impacto que os resultados podem ter em aplicações industriais, uma vez que, ao prever o acúmulo de deformação plástica, é possível identificar com maior precisão o início de uma trinca, indicando a possibilidade de falha do material ou componente estrutural, podendo contribuir para a integridade estrutural.

É importante salientar que há poucas pesquisas que utilizam o aprendizado de máquina para prever deformações plásticas em níveis de grãos. Sendo assim, é recomendável prosseguir com essa linha de pesquisa, abordando aspectos tais como:

- Aperfeiçoamento do tamanho do PCA para verificar se haverá melhora na previsão dos resultados, uma vez que, devido ao custo computacional, foram utilizados apenas três tamanhos de quadrados para a extração de características das amostras.
- Verificar se há uma relação entre o *Representative Volume Element* (RVE) e a técnica de Análise de Componentes Principais (PCA).
- O método de aprendizagem profunda, como, por exemplo, as redes neurais convolucionais, como abordado por Ferreira & Ayala [36].

7

Referências

- [1] AGRAWAL, A.; CHOUDHARY, A. **Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science.** *APL Materials*, v. 4, n. 5, p. 053208, 2016.
- [2] ZHANG, X.-C.; GONG, J.-G.; XUAN, F.-Z. **A deep learning based life prediction method for components under creep, fatigue and creep-fatigue conditions.** *International Journal of Fatigue*, v. 148, n. March, p. 106236, 2021.
- [3] BOCANIALA, C. D.; PALADE, V. **Computational Intelligence Methodologies in Fault Diagnosis: Review and State of the Art.** In: PALADE, V.; JAIN, L.; BOCANIALA, C. D. (Org.). **Comput. Intell. Fault Diagnosis.** London: Springer London, 2006. p. 1–36.
- [4] LEI, Y. et al. **Applications of machine learning to machine fault diagnosis: A review and roadmap.** *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 138, p. 106587, 2020.
- [5] GAN, L.; WU, H.; ZHONG, Z. **Fatigue life prediction considering mean stress effect based on random forests and kernel extreme learning machine.** *International Journal of Fatigue*, v. 158, p. 106761, 2022.
- [6] ROVINELLI, A. et al. **Using machine learning and a data-driven approach to identify the small fatigue crack driving force in polycrystalline materials.** *npj Computational Materials*, v. 4, n. 1, p. 35, 2018.
- [7] MOZAFFAR, M. et al. **Deep learning predicts path-dependent plasticity.** *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 116, n. 52, p. 26414–26420, 2019.
- [8] CAIO, L. B. A. et al. **Mild Steel GMA Welds Microstructural Analysis and Estimation Using Sensor Fusion and Neural Network Modeling.** *Sensors*, v. 21, n. 16, p. 5459, 2021.
- [9] KHANDELWAL, S.; BASU, S.; PATRA, A. **A Machine Learning-based surrogate modeling framework for predicting the history-dependent deformation of dual phase microstructures.** *Materials Today Communications*, v. 29, p. 102914, 2021.
- [10] DAI, W. et al. **Studying the micromechanical behaviors of a polycrystalline metal by artificial neural networks.** *Acta Materialia*, v. 214, p. 117006, 2021.
- [11] FRANKEL, A.; TACHIDA, K.; JONES, R. **Prediction of the evolution of the stress field of polycrystals undergoing elastic-plastic deformation with a hybrid neural network model.** *Machine Learning: Science and Technology*, v. 1, n. 3, p. 035005, 2020.

- [12] ZHANG, S. et al. **Predicting grain boundary damage by machine learning**. *International Journal of Plasticity*, v. 150, p. 103186, 2022.
- [13] ESHELBY, J. D.; FRANK, F. C.; NABARRO, F. R. N. **XLI. The equilibrium of linear arrays of dislocations**. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 42, n. 327, p. 351–364, 1951.
- [14] PETCH, N. J. **The cleavage strength of polycrystals**. *Journal of Iron and Steel Institute*, v. 174, n. 1, p. 25–28, 1953.
- [15] HALL, E. O. **The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results**. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, v. 64, n. 9, p. 747–753, 1951.
- [16] SUTTON, A. P.; BALLUFFI, R. W. **Interfaces in Crystalline Materials**. Oxford: Clarendon Press, 1997. 856 p.
- [17] JIN, Z.-H. et al. **Interactions between non-screw lattice dislocations and coherent twin boundaries in face-centered cubic metals**. *Acta Materialia*, v. 56, n. 5, p. 1126–1135, 2008.
- [18] ABUZOID, W. Z. et al. **Slip transfer and plastic strain accumulation across grain boundaries in Hastelloy X**. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 60, n. 6, p. 1201–1220, 2012.
- [19] CHEONG, K.-S.; BUSSO, E. P. **Effects of lattice misorientations on strain heterogeneities in FCC polycrystals**. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 54, n. 4, p. 671–689, 2006.
- [20] ABUZOID, W.; SEHITOGLU, H.; LAMBROS, J. **Plastic strain localization and fatigue micro-crack formation in Hastelloy X**. *Materials Science and Engineering: A*, v. 561, p. 507–519, 2013.
- [21] FIGUEROA, J. C.; LAIRD, C. **Crack initiation mechanisms in copper polycrystals cycled under constant strain amplitudes and in step tests**. *Materials Science and Engineering*, v. 60, n. 1, p. 45–58, 1983.
- [22] CHAN, K. S. **Roles of microstructure in fatigue crack initiation**. *International Journal of Fatigue*, v. 32, n. 9, p. 1428–1447, 2010.
- [23] LITTLEWOOD, P. D.; WILKINSON, A. J. **Local deformation patterns in Ti–6Al–4V under tensile, fatigue and dwell fatigue loading**. *International Journal of Fatigue*, v. 43, p. 111–119, 2012.
- [24] CARROLL, J. D. et al. **On the interactions between strain accumulation, microstructure, and fatigue crack behavior**. *International Journal of Fracture*, v. 180, n. 2, p. 223–241, 2013.
- [25] BADORA, M. et al. **Predicting length of fatigue cracks by means of machine learning algorithms in the small-data regime**. *Eksploatacja i Niezawodność – Maintenance and Reliability*, v. 23, n. 3, p. 575–585, 2021.
- [26] VIEIRA, R. B.; LAMBROS, J. **Machine Learning Neural-Network Predictions for Grain-Boundary Strain Accumulation in a Polycrystalline Metal**. *Experimental Mechanics*, v. 61, n. 4, p. 627–639,

- 2021.
- [27] GÉRON, A. **Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems**. 2. ed. Sebastopol: O'Reilly Media, 2019. 851 p.
 - [28] BREIMAN, L. **Random Forests**. *Machine Learning*, v. 45, n. 1, p. 5–32, 2001.
 - [29] BREIMAN, L. **Bagging predictors**. *Machine Learning*, v. 24, n. 2, p. 123–140, 1996.
 - [30] BREIMAN, L. et al. **Pasting Small Votes for Classification in Large Databases and On-Line**. *Machine Learning*, v. 36, p. 85–103, 1999.
 - [31] BRUNTON, S. L.; KUTZ, J. N. **Data-Driven Science and Engineering**. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2019. 472 p.
 - [32] MITCHELL, T. M. **Machine learning**. 1. ed. Nova York: McGraw Hill, 1997. 414 p.
 - [33] YANG, F. et al. **Lifespan prediction of lithium-ion batteries based on various extracted features and gradient boosting regression tree model**. *Journal of Power Sources*, v. 476, p. 228654, 2020.
 - [34] FRIEDMAN, J. H. **Greedy function approximation: A gradient boosting machine**. *The Annals of Statistics*, v. 29, n. 5, p. 1189–1232, 2001.
 - [35] HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. **The Elements of Statistical Learning**. 2. ed. New York: Springer New York, 2009. 767 p. (Springer Series in Statistics).
 - [36] FERREIRA, G. R. B.; AYALA, H. V. H. **Improved Image-Based Welding Status Recognition with Dimensionality Reduction and Shallow Learning**. *Experimental Mechanics*, v. 62, n. 6, p. 985–998, 2022.
 - [37] JOLLIFFE, I. T. **Principal Component Analysis for Special Types of Data. Princ. Compon. Anal.** 1. ed. New York: Springer New York, 1986. p. 199–222. .
 - [38] GHAWI, R.; PFEFFER, J. **Efficient Hyperparameter Tuning with Grid Search for Text Categorization using kNN Approach with BM25 Similarity**. *Open Computer Science*, v. 9, n. 1, p. 160–180, 2019.
 - [39] BERGSTRA, J.; BENGIO, Y. **Random search for hyper-parameter optimization**. *Journal of Machine Learning Research*, v. 13, n. 10, p. 281–305, 2012.
 - [40] XU, Q.-S.; LIANG, Y.-Z. **Monte Carlo cross validation**. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 56, n. 1, p. 1–11, 2001.
 - [41] PICARD, R. R.; COOK, R. D. **Cross-Validation of Regression Models**. *Journal of the American Statistical Association*, v. 79, n. 387, p. 575–583, 1984.
 - [42] WOLPERT, D. H.; MACREADY, W. G. **No free lunch theorems for optimization**. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 1, n. 1,

p. 67–82, 1997.

- [43] CARROLL, J. et al. **An experimental methodology to relate local strain to microstructural texture.** Review of Scientific Instruments, v. 81, n. 8, p. 83703, 2010.
- [44] VIEIRA, R. B. **Strain inhomogeneities during plasticity and creep of metals: representative volume elements and microscale strain predictions.** 2021. 174 f. Thesis (Doctor of Philosophy in Aerospace Engineering) - University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, 2021.