



UNIVERSIDADE DE
COIMBRA

Tomás Gaspar Parreira

**IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS
CONSTITUTIVOS DE CHAPAS METÁLICAS COM
RECURSO À METAMODELAÇÃO DO ENSAIO DE
TRAÇÃO BIAxIAL EM PROVETE CRUCIFORME**

Dissertação no âmbito do Mestrado em Engenharia Mecânica no ramo de
Produção e Projeto orientada pelo Doutor André Filipe Gomes Pereira e pelo
Doutor Pedro André Dias Prates e apresentada ao Departamento de Engenharia
Mecânica da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Julho de 2023

1 2



9 0

FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE DE
COIMBRA

Identificação de parâmetros constitutivos de chapas metálicas com recurso à metamodelação do ensaio de tração biaxial em provete cruciforme

Dissertação apresentada para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica na Especialidade de Produção e Projeto

Identification of sheet metal constitutive parameters using metamodeling of the biaxial tensile test on a cruciform specimen

Autor

Tomás Gaspar Parreira

Orientadores

André Filipe Gomes Pereira

Pedro André Dias Prates

Júri

| | |
|-------------------|--|
| Presidente | Professor Doutor José Valdemar Bidarra Fernandes Professor Catedrático da Universidade de Coimbra |
| Orientador | Doutor André Filipe Gomes Pereira Investigador Doutorado da Universidade de Coimbra Professora Doutora Marta Cristina Cardoso de Oliveira Professora Associada da Universidade de Coimbra |
| Vogais | Engenheiro Armando José Eusébio Marques Estudante de Doutoramento da Universidade de Coimbra |

Coimbra, Julho, 2023

“Every accomplishment starts with the decision to try.”

John F. Kennedy

Agradecimentos

O desenvolvimento desta dissertação revelou-se uma tarefa trabalhosa e desafiante e na qual pude contar com o apoio de várias pessoas às quais pretendo expressar a minha gratidão.

Ao professor André Filipe Gomes Pereira pelo tempo e disponibilidade demonstrados e acima de tudo por todo o conhecimento e conselhos partilhados sem os quais este projeto não seria exequível.

Aos meus pais, por sempre me incentivarem a dar o melhor de mim e por me apoiarem em todas as minhas decisões. Por me acompanharem durante todo o meu percurso académico com ilustre alegria. Sem eles não seria a pessoa que hoje sou.

Ao Paulo e à Alice por todo o carinho e motivação e pela forma efusiva com que celebram as minhas conquistas ao longo da vida.

A todos os restantes elementos da minha família pelos bons momentos partilhados e consideração que têm por mim.

Aos meus amigos que me acompanham já há muitos anos pelas histórias que vivemos em conjunto, pelas gargalhadas e trocas de ideias.

A todos quero transmitir o meu profundo agradecimento. Esta conquista também é vossa.

A dissertação foi realizada no âmbito do projeto “RealForm: Modelação Estocástica e Quantificação da Incerteza de Processos de Conformação de Chapas Metálicas” (2022.02370.PTDC), financiado pela Fundação Portuguesa para a Ciência e Tecnologia (FCT); Também foi patrocinada com fundos FEDER através do programa COMPETE - Programa Operacional Fatores de Competitividade - e com fundos nacionais através da FCT, no âmbito dos projetos UIDB/00285/2020, UIDB/00481/2020, UIDP/00481/2020, CENTRO-01- 0145-FEDER-022083, LA/P/0104/2020 e LA/P/0112/2020. O trabalho de investigação do Dr. André Pereira é financiado através de fundos nacionais por parte da FCT (2022.04905.CEECIND).

Cofinanciado por:



Resumo

Neste trabalho recorre-se à metamodelação do ensaio de tração biaxial num provete cruciforme de forma a determinar os parâmetros constitutivos de chapas metálicas. Este estudo sustentou-se na regressão dos Processos Gaussianos como metamodelo para identificar os parâmetros constitutivos do material. Pretende-se determinar os parâmetros Y_0 , C e n , da lei de encruamento de Swift, e F , G e N do critério de plasticidade de Hill'48. No metamodelo utilizou-se como dados de entrada as forças segundo O_x e O_y , medidas durante o ensaio biaxial, e as deformações também medidas ao longo do ensaio para um conjunto específico de pontos. Os dados do ensaio biaxial foram obtidos numericamente, com recurso ao programa de elementos finitos DD3IMP.

Foram definidas três estratégias para identificar os parâmetros constitutivos. A primeira estratégia consiste em definir um conjunto de dados de entrada para cada parâmetro constitutivo. Nesta abordagem, as deformações são medidas nas regiões do provete onde os resultados são mais influenciados pelo parâmetro constitutivo que se pretende identificar. A segunda e terceira estratégias consistem em definir um único conjunto de dados de entrada para identificar todos os parâmetros constitutivos. Na segunda estratégia, as deformações são medidas nas regiões do provete onde os resultados são mais influenciados pelos vários parâmetros constitutivos que se pretendem identificar. Já na terceira estratégia, as deformações são medidas em nós distribuídos uniformemente ao longo de todo o provete. A performance e o custo computacional das estratégias foram analisados para metamodelos treinados com amostras de diferentes tamanhos (i.e., número de simulações). A performance foi avaliada com base no erro relativo obtido na identificação dos parâmetros constitutivos. Por fim, foi repetido todo o processo, mas acrescentando ruído aos dados de entrada, de forma a avaliar a performance do metamodelo nesta situação.

Dos resultados obtidos com as várias estratégias foi possível concluir que estas atingem um valor de erro idêntico com o aumento do tamanho da amostra (i.e., número de simulações) de treino do metamodelo. A partir de 1024 amostras de treino, o erro relativo é abaixo de 1% para todos os parâmetros em todas as estratégias. No entanto, apesar de na análise sem ruído a diferença entre as estratégias ser mínima, na análise com ruído as diferenças entre elas são evidentes, sendo a estratégia “Múltiplos *Datasets*” a que apresenta

melhor performance. Para esta estratégia, com ruído de 0.1%, 0,5% e 1%, o parâmetro n é o mais afetado com um erro relativo de 1%, 4% e 7%, respetivamente. Os restantes parâmetros apresentam valores de erro inferiores a 4.5% e, por isso, previsões aceitáveis.

Palavras-chave: Metamodelação, Ensaio de tração biaxial, Provete cruciforme, Processos Gaussianos.

Abstract

This work uses the metamodeling of the biaxial tensile test on a cruciform specimen, in order to identify the constitutive parameters of sheet metals. This study was based on the Gaussian Process regression as a metamodel to identify the constitutive parameters of the material. It was intended to identify the parameters Y_0 , C e n , from Swift's hardening law, and F , G and N from Hill'48 yield criterion. The metamodel used as input data the forces along O_x and O_y , measured during the biaxial test, and the strains also measured along the test for a specific set of points. All the data from the biaxial test were numerically obtained, using the finite element program DD3IMP.

Three strategies were defined to identify the constitutive parameters. The first strategy consists in defining a set of input data for each constitutive parameter. In this approach, the strains are measured in the regions of the specimen where the results are most influenced by the constitutive parameter that is intended to be identified. The second and third strategies consist of defining a single set of input data to identify all constitutive parameters. In the second strategy, the strains are measured in the regions of the specimen where the results are most influenced by the various constitutive parameters to be identified. In the third strategy, the strains are measured at nodes uniformly distributed throughout the entire specimen. The performance and the computational cost of the strategies were analysed for metamodels trained with samples of different sizes (i.e., number of simulations). The performance was evaluated based on the relative error obtained in the identification of the constitutive parameters. Finally, the entire process was repeated, but adding noise to the input data, in order to evaluate the performance of the metamodel in this situation.

From the results obtained with the several strategies, it was possible to conclude that these reach an identical error value with the increase of the training sample size (i.e., the number of simulations) of the metamodel. Starting from 1024 training samples, the relative error is below 1% for all parameters in all strategies. However, although in the noiseless analysis the difference between the strategies is minimal, in the analysis with noise the differences between them are clear, with the strategy with multiple input data being the one that presents the best performance. For this strategy, with noise of 0.1%, 0.5% and 1%, the parameter n is the most affected with a relative error of 1%, 4% and 7%, respectively. The

remaining parameters present error values inferior to 4.5% and, therefore, acceptable predictions.

Keywords: Metamodeling, Biaxial tensile test, Cruciform specimen, Gaussian Processes.

Índice

| | |
|---|------|
| Índice de Figuras | ix |
| Índice de Tabelas | xi |
| Simbologia e Siglas | xiii |
| Simbologia Romana | xiii |
| Simbologia Grega | xiv |
| Siglas | xiv |
| 1. Introdução | 1 |
| 1.1. Motivação | 1 |
| 1.2. Metamodelação | 2 |
| 1.3. Objetivos e Estrutura da Dissertação | 3 |
| 2. Ensaio cruciforme | 5 |
| 2.1. Geometria do Proverte | 5 |
| 2.2. Modelo Constitutivo | 6 |
| 2.3. Base de Dados | 8 |
| 3. Metodologia | 11 |
| 3.1. <i>Inputs e Outputs</i> | 11 |
| 3.1.1. Estratégia Múltiplos <i>Datasets</i> | 12 |
| 3.1.2. Estratégia <i>Dataset</i> Único | 14 |
| 3.1.3. Estratégia <i>Dataset</i> Uniforme | 15 |
| 3.1.4. Normalização | 16 |
| 3.2. Técnica de Metamodelação | 17 |
| 3.2.1. <i>Kernels</i> e otimizadores | 18 |
| 3.2.2. Performance do Modelo | 20 |
| 3.3. Análise dos metamodelos na presença de ruído | 21 |
| 3.4. Procedimento | 21 |
| 4. Resultados | 23 |
| 4.1. Análise de performance: <i>Kernel</i> e otimizador | 23 |
| 4.2. Análise de performance: Número de Amostras | 30 |
| 4.3. Análise de performance: Ruído | 33 |
| 5. Conclusão | 35 |
| Referências Bibliográficas | 37 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 2.1. Geometria e dimensões do provete cruciforme (P. A. Prates et al., 2014). | 5 |
| Figura 2.2. Discretização do provete cruciforme. | 6 |
| Figura 2.3. Comparação entre pontos gerados computacionalmente de forma: aleatória (a); quase-aleatória através da Sequência de Sobol (b) (Ruivo, 2020). | 9 |
| Figura 3.1. Representação da utilização do metamodelo. | 12 |
| Figura 3.2. Representação das zonas onde foram medidas as deformações para os parâmetros: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 13 |
| Figura 3.3. Representação das zonas onde foram medidas deformações da segunda estratégia. | 15 |
| Figura 3.4. Representação das zonas onde foram medidas deformações da terceira estratégia. | 16 |
| Figura 3.5. Fluxograma da metodologia. | 22 |
| Figura 4.1. Tempo de treino dos metamodelos, para diferentes <i>kernels</i> e otimizadores, associados à estratégia “Múltiplos <i>Datasets</i> ” na identificação dos parâmetros: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 24 |
| Figura 4.2. Performance do <i>kernel</i> e otimizador para a estratégia “Múltiplos <i>Datasets</i> ” na identificação dos parâmetros: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 26 |
| Figura 4.3. Tempo de treino dos metamodelos, para diferentes <i>kernels</i> e otimizadores, associados à estratégia “ <i>Dataset Único</i> ”. | 27 |
| Figura 4.4. Tempo de treino dos metamodelos, para diferentes <i>kernels</i> e otimizadores, associados à estratégia “ <i>Dataset Uniforme</i> ”. | 27 |
| Figura 4.5. Performance dos metamodelos, para diferentes <i>kernels</i> e otimizadores, associados à estratégia “ <i>Dataset Único</i> ” na identificação dos parâmetros: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 28 |
| Figura 4.6. Performance dos metamodelos, para diferentes <i>kernels</i> e otimizadores, associados à estratégia “ <i>Dataset Uniforme</i> ” na identificação dos parâmetros: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 29 |
| Figura 4.7. Análise do erro relativo das várias estratégias para 256, 512, 1024, 2048 e 4096 simulações para: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 31 |
| Figura 4.8. Análise do tempo das várias estratégias para 256, 512, 1024, 2048 e 4096 simulações. | 32 |
| Figura 4.9. Performance dos metamodelos sujeitos a ruído para: (a) $Y0$; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N | 34 |

ÍNDICE DE TABELAS

| | |
|---|----|
| Tabela 2.1. Variação de parâmetros usada nas simulações. | 9 |
| Tabela 3.1. Índices de Sobol usados na determinação dos nós da primeira estratégia..... | 14 |
| Tabela 3.2. Índices de Sobol usados na determinação dos nós da segunda estratégia. | 14 |

SIMBOLOGIA E SIGLAS

Simbologia Romana

a – Índice da amostra

$cov(\bar{f}^*)$ – Covariância dos resultados

C – Parâmetro constitutivo da Lei de Swift

$d(x_i, x_j)$ – Distância Euclidiana

F, G, H, M, L, N – Parâmetros do critério de plasticidade Hill'48

$f(x)$ – Variável do Processo Gaussiano

\bar{f}^* – Vetor de previsões

I – Matriz Identidade

K' – Matriz de covariância

K_ν – Função de Bessel modificada

$k(x_i, x_j)$ – Kernel

l – Parâmetro de escala de comprimento

m – Número de amostras de teste

n – Coeficiente de encruamento

r – Coeficiente de anisotropia

$r_0(\alpha)$ – Evolução do coeficiente de anisotropia no plano da chapa

r_0, r_{45}, r_{90} – Coeficientes de anisotropia do material a 0° , 45° e 90° com a direção de laminagem

v – Parâmetro controlador da suavidade

x^* – Dimensão das entradas

x^* – Valor normalizado (de força ou deformação)

x – Valor original (de força ou deformação)

x_{max}, x_{min} – Valores máximo e mínimo (de força ou deformação)

Y – Tensão de escoamento

Y_0 – Tensão limite de elasticidade inicial

$y(x)$ – Valor obtido pelo Processo Gaussiano

$y(x^t)$ – Vetor de resultados correntes

$y(x^p)$ – Vetor de resultados a prever

y_a^p – Valor previsto pelo metamodelo

y_a^r – Valor real do parâmetro

X – Dados de treino

X^* – Dados ausentes a prever

Simbologia Grega

α – Orientação do eixo do provete em relação à direção de laminagem

ε_{eq} – Deformação plástica equivalente

ε_0 – Parâmetro constitutivo da lei de Swift

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – Deformações principais logarítmicas no plano da chapa

$\varepsilon_{y'z'}, \varepsilon_{z'y'}$ – Deformações segundo os eixos perpendiculares ao eixo de tração

$\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, \varepsilon_{xy}$ – Deformações medidas durante o ensaio

ε – Ruído Gaussiano

σ_ε^2 – Variância do ruído

$\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \tau_{yz}, \tau_{xz}, \tau_{xy}$ – Componentes do tensor das tensões de Cauchy

$\Gamma(v)$ – Função Gama

Siglas

DD3IMP – Deep Drawing 3D IMPLICIT

GP – Gaussian Processes

LBFGS – Limited-memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno

MLP – Multi Layer Perceptron

RBF – Radial Basis Function

SCG – Scale Conjugate Gradient

SVR – Support Vector Regression

TNC – Truncated Newton Method

1. INTRODUÇÃO

Neste primeiro capítulo é apresentada a motivação desta dissertação assim como algumas ideias fundamentais para a melhor compreensão do estudo realizado neste trabalho. São também discutidos os objetivos e feito um breve resumo do que é tratado em cada capítulo.

1.1. Motivação

Na indústria são constantes o controlo e gestão da qualidade dos processos. Nos ramos automóvel, aeronáutico e metalomecânico, de forma a manterem-se competitivos, a redução dos custos de produção e a qualidade do produto final são uma das principais motivações para a otimização dos processos de conformação. De modo a aprimorar estes processos é comum recorrer-se à análise de elementos finitos. A modelação do comportamento mecânico dos materiais é, por isso, um aspeto basilar para a utilização desta ferramenta de cálculo.

O comportamento mecânico dos materiais metálicos é descrito por meio de modelos matemáticos, conhecidos como leis constitutivas. O comportamento plástico de chapas metálicas, em específico, pode ser descrito por um critério de plasticidade ortotrópico, que define a superfície de plasticidade do material num espaço de tensões multidimensional. A acrescentar a este critério, são também usadas as leis de encruamento, que procuram expressar a evolução da superfície de plasticidade durante a deformação plástica.

A determinação dos parâmetros do material é, por isso, crucial para que os modelos referidos possam descrever o comportamento mecânico do material. Esta determinação é muitas vezes realizada recorrendo a ensaios convencionais, tais como o ensaio de tração uniaxial, o ensaio de corte e o ensaio hidráulico de expansão biaxial. Estes ensaios são caracterizados por campos de tensão/deformação homogêneos que permitem a identificação dos parâmetros constitutivos de forma analítica. No entanto, a inexistência de heterogeneidade nos estados de tensão/deformação leva a que seja necessário utilizar vários ensaios mecânicos para caracterizar completamente o comportamento mecânico do material.

De forma a superar este problema, vários têm sido os investigadores que procuram desenvolver ensaios heterogêneos que permitam caracterizar o comportamento do material. O ensaio de tração biaxial em provetes com uma geometria cruciforme tem sido alvo de um

crescente interesse devido à sua capacidade de permitir identificar, com um só ensaio, os parâmetros que caracterizam o material, em particular, a anisotropia e o encruamento. Precisamente nesta temática, ensaios de tração biaxiais em provetes especificamente projetados para obter campos tensão/deformação heterogêneos e uma alta sensibilidade à anisotropia do material foram aplicados, com sucesso, em metodologias de análise inversa com a finalidade de determinar os parâmetros de modelos constitutivos (P. A. Prates, 2010)(Teaca et al., 2010). No entanto, o recurso a metodologias de análise inversa está geralmente associado a um elevado custo computacional, necessário à realização das simulações numéricas do ensaio mecânico.

1.2. Metamodelação

A metamodelação é uma abordagem que se baseia na construção de modelos matemáticos que permitem simular o comportamento de sistemas complexos e dispendiosos. Neste sentido, a metamodelação pode ser utilizada na identificação dos parâmetros constitutivos ao permitir estabelecer relações matemáticas complexas entre estes e os resultados dos ensaios mecânicos (Barton & Meckesheimer, 2006). Para estabelecer estas relações é necessário um grande conjunto de dados do ensaio mecânico, que pode ser obtido, por exemplo, através da análise de elementos finitos. Existem atualmente múltiplas técnicas de metamodelação onde os resultados e custos computacionais são muito variáveis (Jin et al., 2001). A escolha da técnica de modelação depende do grau de complexidade do sistema e da precisão requerida.

O processo de construção de um metamodelo obedece, por norma, a alguns passos: recolha de dados de entrada e saída do sistema complexo com recurso a simulações computacionais detalhadas ou ensaios experimentais. De seguida, os dados recolhidos são tratados sofrendo, por exemplo, uma remoção de valores descontextualizados ou uma normalização de variáveis. A seleção da técnica de modelação pode ser baseada em resultados anteriores e em estudos comparativos entre as mesmas. Esta seleção deve também ter em conta a natureza do processo e os dados disponíveis. Posteriormente, é treinado o metamodelo, etapa na qual se pretende ajustar os parâmetros do metamodelo de forma a encontrar a melhor representação do sistema. Por último existe a validação do modelo,

normalmente utilizando dados que não foram utilizados durante o treino, dando informações sobre a precisão dos resultados obtidos pelo modelo.

1.3. Objetivos e Estrutura da Dissertação

Esta dissertação tem como intuito a metamodelação do ensaio de tração biaxial em provete cruciforme a fim de determinar os parâmetros de uma chapa metálica. A estratégia deve ser eficaz, recorrendo apenas a único ensaio, e ainda permitir a correta caracterização da anisotropia e do encruamento do material. Esta dissertação encontra-se repartida em cinco capítulos:

- No Capítulo 1 é enquadrado o tema, introduzida a noção de metamodelação e expostos os objetivos da tese;
- No Capítulo 2 apresenta-se a geometria do provete cruciforme e o modelo constitutivo adotado;
- No Capítulo 3 são abordadas as várias estratégias implementadas e os correspondentes dados de entrada e a sua origem. São também introduzidos os conceitos às técnicas de metamodelação juntamente com os fatores intrínsecos considerados;
- No Capítulo 4 apresentam-se os resultados obtidos para todas as estratégias, a interpretação e comparação dos mesmos;
- No Capítulo 5 apresentam-se as principais conclusões da tese e uma visão sobre estudos futuros.

Para efeitos da simulação numérica, devido às condições de simetria do ensaio e de ortotropia da chapa, apenas é considerado um oitavo do provete. O oitavo do provete foi discretizado com 6680 elementos hexaédricos com 8 nós cada, com um elemento em espessura, e é exibido na Figura 2.2. As simulações do ensaio foram feitas no programa de elementos finitos DD3IMP.

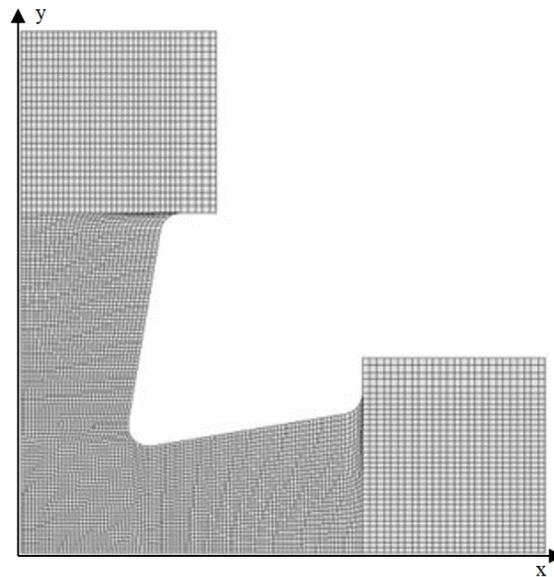


Figura 2.2. Discretização do provete cruciforme.

2.2. Modelo Constitutivo

Uma chapa metálica, em função do processo de laminagem, possui um comportamento do tipo ortotrópico, o que se traduz em três planos de simetria perpendiculares entre si, que se denominam por eixos de ortotropia ou eixos principais de anisotropia (Hill, 1948). Considerando como eixos principais de anisotropia os eixos $0x$, $0y$ e $0z$ o critério de Hill é definido da seguinte forma:

$$F(\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + G(\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 + H(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + 2L\tau_{yz}^2 + 2M\tau_{xz}^2 + 2N\tau_{xy}^2 = Y^2 \quad (2.1)$$

onde Y é a tensão limite de escoamento, F , G , H , L , M e N são os parâmetros que definem o estado de anisotropia, e σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yz} são componentes do tensor de Cauchy

escritos no sistema de eixos principais de anisotropia. Num estado plano de tensão a equação anterior adquire a seguinte forma:

$$(G + H)\sigma_{xx}^2 - 2H\sigma_{xx}\sigma_{yy} + (F + H)\sigma_{yy}^2 + 2N\tau_{xy}^2 = Y^2 \quad (2.2)$$

De modo geral, é assumida a condição $G + H = 1$. Esta assunção consiste em considerar que a tensão limite de escoamento, Y , é igual à tensão limite de elasticidade em tração segundo a direção de laminagem. Devido à dificuldade de identificar os parâmetros L e M em chapas metálicas, consideram-se valores idênticos aos isotrópicos (von Mises), isto é, $L = M = 1.5$.

O coeficiente de anisotropia, r , representa a razão entre a deformação plástica em largura e a deformação plástica em espessura durante o ensaio de tração e é descrito da seguinte forma:

$$r = \frac{d\varepsilon_{y'}}{d\varepsilon_{z'}} \quad (2.3)$$

onde, $\varepsilon_{y'}$ e $\varepsilon_{z'}$ são as deformações segundo os eixos perpendiculares ao eixo de tração. Os coeficientes de anisotropia r_0 , r_{45} e r_{90} são determinados através de ensaios de tração uniaxial cujo eixo de tração faz com a direção de laminagem um ângulo α , igual a 0° , 45° e 90° , respetivamente. A partir destes valores é possível determinar os parâmetros F , G , H e N , seguindo as equações:

$$F = \frac{r_0}{r_{90}(r_0 + 1)}, \quad G = \frac{1}{(r_0 + 1)}, \quad H = \frac{r_0}{(r_0 + 1)}, \quad (2.4)$$

$$N = \frac{(r_0 + r_{90})(2r_{45} + 1)}{2r_{90}(r_0 + 1)}$$

Conhecidos os parâmetros F, G, H e N pode calcular-se o coeficiente de anisotropia para qualquer ângulo α :

$$r(\alpha) = \frac{H + (2N - F - G - 4H) \sin^2(\alpha) \cos^2(\alpha)}{F \sin^2(\alpha) + G \cos^2(\alpha)} \quad (2.5)$$

Quando um metal sofre deformação plástica este torna-se mais resistente e mais duro, sofre um encruamento. Neste trabalho assume-se que o encruamento é descrito pela lei de Swift, é definida segundo a seguinte equação:

$$Y = C (\varepsilon_0 + \varepsilon_{eq})^n \quad (2.6)$$

onde C , ε_0 e n são constantes do material, e ε_{eq} representa a deformação plástica equivalente. A tensão limite de elasticidade inicial, Y_0 , é descrita por:

$$Y_0 = C \varepsilon_0^n \quad (2.7)$$

2.3. Base de Dados

A criação da base de dados é um processo que irá gerar os dados necessários à aprendizagem do(s) metamodelo(s) assim como os dados de teste que pretendem avaliar as previsões feitas pelo(s) metamodelo(s). A base de dados, como referido anteriormente, é o conjunto das simulações do ensaio de tração biaxial em provete cruciforme feitas no programa de elementos finitos DD3IMP. Foram utilizadas 4096 simulações para o treino e 500 simulações para o teste dos metamodelos. Estas simulações já se encontravam disponíveis devido a estudos anteriores, e foram realizadas variando os parâmetros de entrada, de modo a obter um conjunto de dados mais amplo. Para que todas as variações dos parâmetros fossem consideradas, as variações dos parâmetros seguiram a Sequência de Sobol (Sobol', 1967) já que permite uma distribuição mais uniforme das diversas combinações possíveis entre parâmetros (Ruivo, 2020), particularmente quando comparado com a utilização de uma sequência aleatória, como se mostra na Figura 2.3. As variações utilizadas nos parâmetros estão listadas na Tabela 2.1.

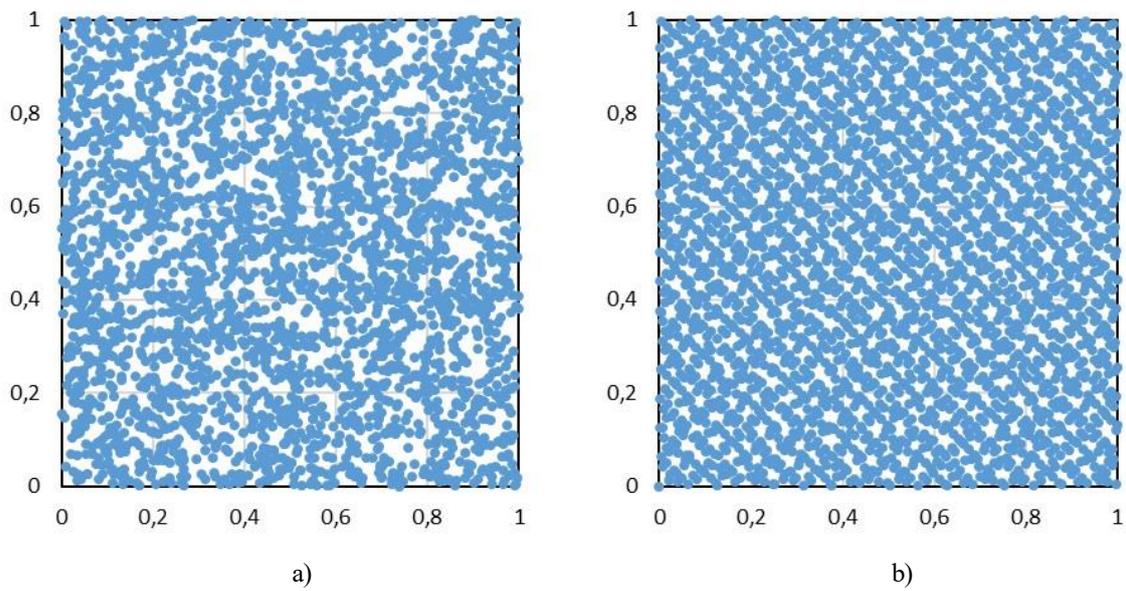


Figura 2.3. Comparação entre pontos gerados computacionalmente de forma: aleatória (a); quase-aleatória através da Sequência de Sobol (b) (Ruivo, 2020).

Tabela 2.1. Variação de parâmetros usada nas simulações.

| | r_0 | r_{45} | r_{90} | ϵ_0 | n | $Y0$ |
|------------------------------|---------|-----------|-----------|--------------|-------------|------------|
| Intervalo de Variação | [0.6;3] | [0.6;4.2] | [0.6;5.7] | [0.002;0.03] | [0.12;0.25] | [150;1200] |

3. METODOLOGIA

Neste capítulo é descrito o procedimento adotado para a identificação dos parâmetros constitutivos de chapas metálicas com recurso à metamodelação. Inicialmente, são descritos os dados de entrada do metamodelo, as estratégias adotadas e a métrica utilizada para avaliação da performance dos metamodelos. Por último, é apresentada a técnica de metamodelação utilizada, onde se descrevem as diversas funções de covariância e os otimizadores considerados e uma comparação entre os mesmos.

3.1. *Inputs e Outputs*

Para o treino do metamodelo é necessário um conjunto de dados de entrada, os *inputs*, e os dados de saída, os *outputs*. O metamodelo é utilizado para encontrar padrões entre o conjunto de dados de entrada, os resultados do ensaio mecânico e os dados de saída, os parâmetros do material. Desta forma, quando efetuado o treino, o algoritmo terá a capacidade de prever os parâmetros do material através do conhecimento dos resultados do ensaio cruciforme (força e deformação). Estes *inputs* são obtidos através de simulações numéricas do ensaio cruciforme, utilizando vários materiais cujos parâmetros constitutivos são obtidos com base nas variações apresentadas anteriormente na Tabela 2.1.

Os dados de entrada do metamodelo são constituídos pelas deformações (ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} e ϵ_{xy}) e as forças, segundo 0_x e 0_y , medidas durante o ensaio, até um deslocamento das amarras de 2 mm. Estes resultados são medidos a cada 0,2 mm, o que significa que, por cada simulação realizada existem no máximo 10 valores de força segundo 0_x , 10 valores de força segundo 0_y e 40 valores de deformação por nó (i.e., 10 para cada uma das componentes ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} e ϵ_{xy}). Os dados de saída do(s) metamodelo(s) serão os parâmetros da lei de Swift, Y_0 , C e n , e os parâmetros do critério de Hill'48, F , G e N . O processo de metamodelação está esquematizado na Figura 3.1.

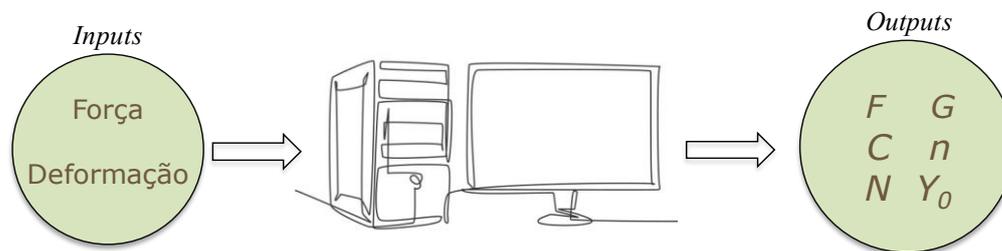


Figura 3.1. Representação da utilização do metamodelo.

Os valores de força serão um dado de entrada simples de definir. Já os valores da deformação podem ser medidos em diversas localizações do provete pelo que requerem um tratamento mais cuidado. Estes valores são medidos em diferentes zonas de acordo com a estratégia utilizada.

3.1.1. Estratégia Múltiplos *Datasets*

Na primeira estratégia definida, é proposta a utilização de um metamodelo diferente para cada um dos parâmetros que se pretende prever. Nesta estratégia é necessário criar um conjunto de dados de entrada (forças e deformações) para cada um dos seis parâmetros de saída. Em cada um destes conjuntos, as deformações são medidas para um grupo de 100 nós, cuja localização depende do parâmetro que se pretende identificar. Esta escolha dos nós foi baseada numa análise de sensibilidade prévia que utilizou índices de Sobol para avaliar a influência dos parâmetros do material nos resultados do ensaio biaxial em provete cruciforme (Câmara, 2021). Esta análise permitiu conhecer que zonas do provete cruciforme são mais afetadas por cada parâmetro. Isto é, um índice de Sobol com um valor elevado significa que a influência de determinado parâmetro nos resultados de deformação equivalente ε_{eq} , e das deformações principais de ε_1 e ε_2 , naquela região do provete é alta. Assim, selecionaram-se para cada parâmetro, um conjunto de 100 nós para os quais os índices de Sobol são mais elevados. As distribuições espaciais dos 100 nós mais sensíveis a cada parâmetro estão evidenciadas na Figura 3.2. Na Tabela 3.1 é indicado o valor mínimo do índice de Sobol tendo em conta cada um dos conjuntos de 100 nós. Como se pode observar, os parâmetros do critério de anisotropia têm uma maior influência nas deformações.

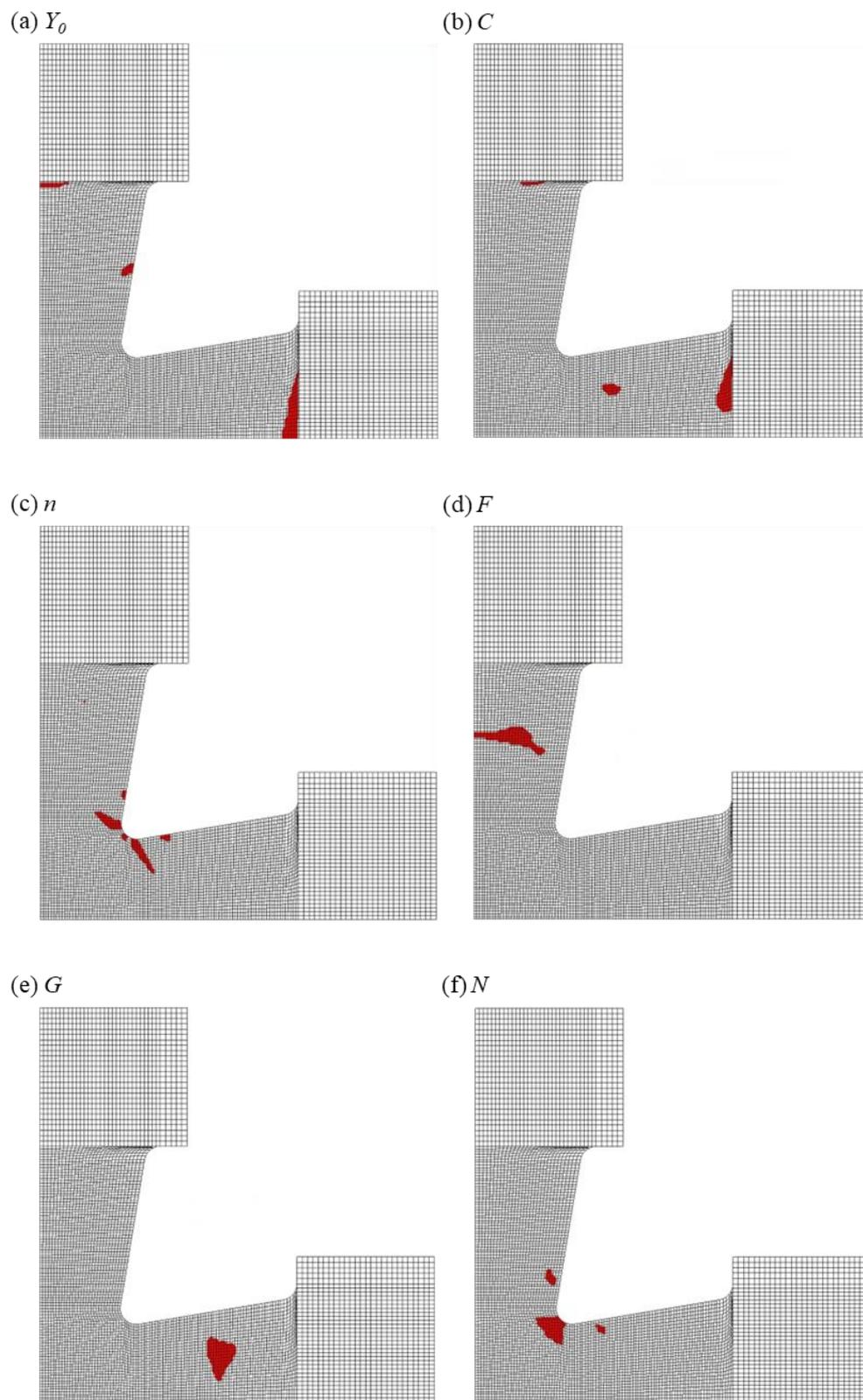


Figura 3.2. Representação das zonas onde foram medidas as deformações para os parâmetros: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

Tabela 3.1. Índices de Sobol mínimos usados na determinação dos nós da primeira estratégia.

| | Y_0 | C | n | F | G | N |
|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Índice de Sobol mínimo | 0.2920 | 0.4004 | 0.2916 | 0.6085 | 0.9563 | 0.4870 |

3.1.2. Estratégia *Dataset Único*

A segunda estratégia para a determinação dos parâmetros do material baseia-se em criar apenas um conjunto de dados de entrada ao invés de seis. Esta condição significa que, contrariamente à primeira estratégia apresentada, é apenas treinado um metamodelo para prever os seis parâmetros.

Para a determinação do conjunto de dados de entrada deste método procurou criar-se um input que contivesse 100 nós, de forma que cada metamodelo tenha um número de nós semelhante ao da primeira estratégia. Estes 100 nós foram divididos de forma equitativa pelos nós mais influentes de cada parâmetro. No entanto, existindo seis parâmetros optou-se por selecionar os 16 nós mais influentes por cada parâmetro, o que contabiliza um total de 96. A escolha baseou-se no mesmo pressuposto da estratégia anterior, os índices de Sobol, mas limitando-se apenas aos 16 nós mais importantes. A Tabela 3.2 apresenta os valores mínimos dos índices de Sobol dos nós escolhidos e a Figura 3.3 mostra a distribuição espacial dos mesmos. Uma vez mais, pode-se concluir que os parâmetros do critério de anisotropia têm uma maior influência nas deformações e vice-versa. Comparando a Figura 3.3 com a Figura 3.2, observa-se que as zonas mais importantes dos seis parâmetros (Figura 3.2) é representada numa única figura (Figura 3.3), ainda que utilizando menos nós.

Tabela 3.2. Índices de Sobol usados na determinação dos nós da segunda estratégia.

| | Y_0 | C | n | F | G | N |
|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Índice de Sobol mínimo | 0.3168 | 0.4270 | 0.3790 | 0.6713 | 0.9733 | 0.7263 |

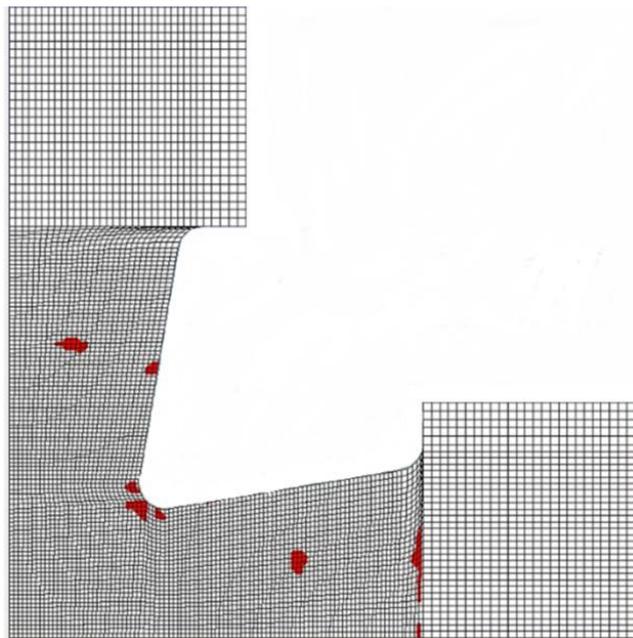


Figura 3.3. Representação das zonas onde foram medidas deformações da segunda estratégia.

3.1.3. Estratégia *Dataset* Uniforme

Na terceira estratégia proposta, o objetivo é determinar os parâmetros do material tendo como dados de entrada as deformações em nós uniformemente distribuídos. À semelhança da estratégia anterior, existirá apenas um conjunto de dados de entrada (e por isso apenas um metamodelo). De igual forma, o número de nós não é especificamente igual a 100 uma vez que a distribuição uniforme assim o impossibilita. A distribuição, apresentada na Figura 3.4, possui uma densidade maior na zona central do provete, contendo 25 nós nessa região, estando dispersos em cada braço 40 nós, somando um total de 105 nós. Pretende-se com este tipo de distribuição, perceber se é ou não importante, para a performance do metamodelo, selecionar previamente pontos cuja influência dos parâmetros é mais significativa nos resultados de deformação.

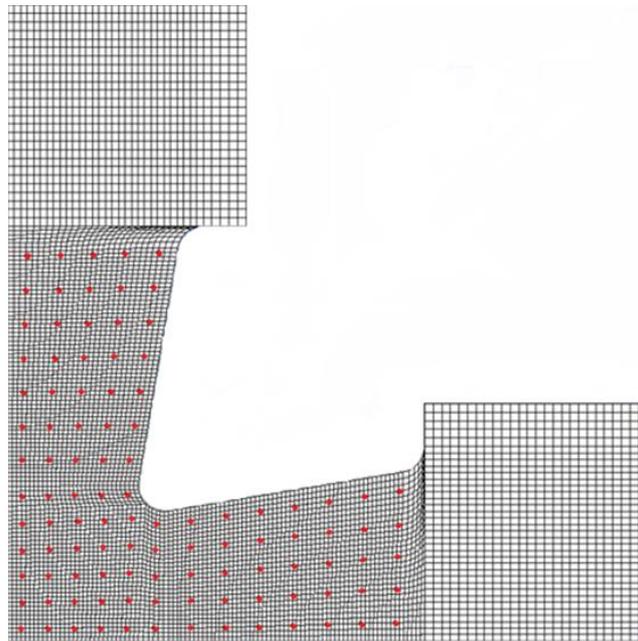


Figura 3.4. Representação das zonas onde foram medidas deformações da terceira estratégia.

3.1.4. Normalização

A normalização é uma técnica frequente no pré-tratamento de dados para processos de aprendizagem com modelos. Os dados de entrada dos modelos utilizados irão sofrer um processo de normalização antes de serem explorados pelo modelo. Desta forma os dados das forças e das deformações passam a estar definidos numa escala comum (entre 0 e 1). Caso contrário, devido à diferença entre as ordens de grandeza das forças e das deformações, o metamodelo poderia ter dificuldade acrescida no treino. Para o conjunto de dados em mão a normalização seguirá a seguinte equação:

$$x^* = \frac{(x - x_{min})}{(x_{max} - x_{min})} \quad (3.1)$$

onde x^* é o valor da força (ou deformação) normalizado, x é o valor original, x_{max} e x_{min} são o valor máximo e mínimo do conjunto de valores da força (ou deformação), respetivamente. Tanto os dados de treino como os dados de teste serão normalizados, segundo os mesmos valores mínimos e máximos.

3.2. Técnica de Metamodelação

Existem variadas técnicas de metamodelação que podem ser aplicadas. No estudo de (Marques et al., 2022), cinco algoritmos de aprendizagem diferentes foram utilizados para identificar os parâmetros constitutivos da lei de encruamento de Swift. Concluiu-se que o algoritmo de Processos Gaussianos (GP) é o que apresenta melhores resultados. Apesar dos algoritmos MLP (*Multi-Layer Perceptron*) e SVR (*Support Vector Regression*) terem também sido rotulados como suficientemente satisfatórios para serem tidos em conta. Devido aos melhores resultados apresentados nesse estudo, nesta dissertação optou-se por utilizar o algoritmo de Processos Gaussianos (GP).

Um Processo Gaussiano (GP) pode ser descrito como um conjunto de qualquer número finito de variáveis aleatórias que podem ser definidas segundo uma distribuição Gaussiana e são totalmente descritas por uma função média e uma função de covariância (Lin JingDong et al., 2017). De um modo geral, a função média é assumida como sendo zero de forma a obter uma notação simples. Por conseguinte, a função de covariância é suficiente para definir o Processo Gaussiano (Schulz et al., 2018). O metamodelo da regressão do Processo Gaussiano pode ser definido como:

$$y(x) = f(x) + \varepsilon \quad (3.2)$$

onde $y(x)$ é o resultado obtido, $f(x)$ é a variável do Processo Gaussiano e ε representa um ruído gaussiano de média igual a zero.

De acordo com a definição de Processo Gaussiano, o conjunto de dados de treino e dados de teste seguem a função de distribuição gaussiana. Assumindo que $y(x^t)$ é o vetor com os resultados pretendidos presentes no *Dataset* e que $y(x^p)$ é o vetor de resultados a prever, a distribuição de probabilidade normal conjunta é dada por:

$$\begin{bmatrix} y(x^t) \\ y(x^p) \end{bmatrix} \sim N \left(0, \begin{bmatrix} \mathbf{K}'(X, X) + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{I} & \mathbf{K}'(X, X^*) \\ \mathbf{K}'(X^*, X) & \mathbf{K}'(X^*, X^*) \end{bmatrix} \right) \quad (3.3)$$

sendo σ_ε^2 a variância do ruído, \mathbf{I} a matriz identidade, e cada \mathbf{K}' sendo a matriz de covariância avaliada para todos os pontos considerados. Por sua vez, X representa os dados de treino do *Dataset*, X^* representa os dados não presentes e para os quais o modelo fará as previsões.

Por último, as previsões do metamodelo da regressão do Processo Gaussiano são dadas pelas equações seguintes:

$$\bar{f}^* = \mathbf{K}'(X^*, X)[\mathbf{K}'(X, X) + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{y}(x^t) \quad (3.4)$$

$$\text{cov}(\bar{f}^*) = \mathbf{K}'(X^*, X)[\mathbf{K}'(X, X) + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{y}(x^t) \quad (3.5)$$

onde \bar{f}^* representa o vetor das previsões e $\text{cov}(\bar{f}^*)$ a covariância dos resultados do metamodelo, que funciona como uma medida de incerteza da previsão.

3.2.1. *Kernels* e otimizadores

Para definir completamente o processo de aprendizagem do modelo é necessário definir um *kernel* e um otimizador. Nesta subsecção é feito um estudo comparativo entre várias combinações destes dois fatores.

Uma função de covariância, ou *kernel*, codifica os pressupostos sobre a função cujo objetivo é ser treinada. O pressuposto inicial pode ser sobre quão suave é a função ou se a função é periódica (Kanagawa et al., 2018). De forma resumida, o *kernel* modela a covariância entre cada par de pontos dos dados de entrada e, assumindo que se dois pontos de entrada são semelhantes, também as suas imagens devem ser semelhantes. Os *kernels* podem ser divididos em duas categorias, os estacionários e os não estacionários. Os estacionários dependem apenas da distância entre os pontos e não do seu valor absoluto sendo por isso invariantes às translações nos dados de entrada. Os não estacionários dependem simultaneamente da distância entre os pontos, mas também do seu valor absoluto.

O *kernel RBF (Radial Basis Function)* é um *kernel* estacionário também conhecido como "exponencial ao quadrado" e é caracterizado por um parâmetro de escala de comprimento $l > 0$, que pode ser um escalar ou um vetor com o mesmo número de dimensões que as entradas x . É dado por:

$$k(x_i, x_j) = \exp\left(-\frac{d(x_i, x_j)^2}{2l^2}\right) \quad (3.6)$$

onde $d(x_i, x_j)$ é a distância euclidiana. Este *kernel* é infinitamente diferenciável, o que significa que os Processos Gaussianos que usam este *kernel* como função de covariância têm derivadas quadradas médias de todas as ordens e são, por isso, muito suaves nas previsões.

O segundo *kernel* considerado é o *kernel Matern*, também estacionário e uma generalização do anterior. Possui um parâmetro adicional, ν , que controla a suavidade da função resultante. Possui igualmente um parâmetro de escala de comprimento $l > 0$. A equação do *kernel Matern* é a seguinte:

$$k(x_i, x_j) = \frac{1}{\Gamma(\nu)2^{\nu-1}} \left(\frac{\sqrt{2\nu}}{l} d(x_i, x_j) \right)^\nu K_\nu \left(\frac{\sqrt{2\nu}}{l} d(x_i, x_j) \right) \quad (3.7)$$

onde $d(x_i, x_j)$ é a distância euclidiana, K_ν é a função de Bessel modificada e $\Gamma(\nu)$ é a função gama. À medida que $\nu \rightarrow \infty$ este *kernel* torna-se idêntico ao *kernel RBF*. Os valores de $\nu = 3/2$ e $\nu = 5/2$ são de particular interesse para funções que não são infinitamente diferenciáveis, mas que o são pelo menos uma vez ($\nu = 3/2$) ou pelo menos duas vezes ($\nu = 5/2$). Existem ainda mais funções de covariância possíveis de serem utilizadas, como a quadrática racional ou até o expoente-seno-quadrado e ainda as não estacionárias. Para esta dissertação serão apenas considerados os *kernel RBF*, *Matern* ($\nu = 3/2$) e *Matern* ($\nu = 5/2$).

Os otimizadores são parte fundamental do processo de treino. Estes otimizadores funcionam de forma iterativa até encontrarem os valores ideais dos parâmetros do *kernel*, minimizando a função de erro. Da biblioteca utilizada neste estudo foram tidos em consideração três otimizadores diferentes:

O *Truncated Newton Method (TNC)*, é um algoritmo de otimização numérica adequado para resolver problemas de otimização em larga escala. Segue uma abordagem iterativa, em que em cada iteração são calculados uma direção de procura e um tamanho de incremento, de forma a aproximar o mínimo da função objetivo (Nash, 2000). Uma vez determinado o tamanho do incremento, a solução é atualizada até ser cumprido o critério de paragem.

O *Scale Conjugate Gradient (SCG)*, o segundo otimizador considerado, tem como conceito utilizar a matriz de covariância do Processo Gaussiano para calcular as direções de procura. À semelhança do anterior, o algoritmo segue uma pesquisa iterativa, onde em cada

iteração a direção de pesquisa é atualizada com base nas informações do gradiente e nas direções de procura anteriores. As atualizações têm em consideração as relações de covariância fornecidas pela matriz de covariância do Processo Gaussiano tornando-o mais adaptável a diferentes contextos e problemas.

O terceiro otimizador considerado é o *Limited-memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (LBFGS)* e é geralmente utilizado em problemas de otimização sem restrições (Liu & Nocedal, 1989). Pode ser visto como uma extensão do método anterior onde existe mais espaço disponível que ajuda na convergência. Sendo também um método iterativo que procura minimizar uma função objetivo não linear, utiliza uma aproximação da matriz Hessiana da função objetivo para orientar o processo de otimização. A matriz Hessiana é uma matriz que contém as segundas derivadas parciais da função objetivo. Alternativamente, em cada iteração, utiliza uma aproximação desta matriz (Nataj & Lui, 2020), juntando conhecimento das iterações anteriores e o gradiente atual para definir uma direção de pesquisa. Esta direção é usada para determinar o incremento de atualização das variáveis a otimizar. A aproximação da matriz Hessiana é atualizada a cada iteração, refinando-se. Este processo é repetido até que os parâmetros do *kernel* sejam otimizados.

3.2.2. Performance do Modelo

Para avaliar as previsões de cada um dos métodos apresentados serão comparados os valores das previsões obtidos pelo modelo com os valores do conjunto de dados de teste. Será calculado, para cada um dos casos, o valor do erro relativo para cada parâmetro a determinar. O erro relativo médio será calculado com base na expressão:

$$Erro = \frac{1}{m} \sum_{a=1}^m \frac{|y_a^p - y_a^r|}{y_a^r} \times 100\% \quad (3.8)$$

em que y_a^p e y_a^r são, respetivamente, o valor previsto pelo metamodelo e o valor real do parâmetro a ser identificado; m é o número total de amostras de teste e a o índice de cada uma destas amostras. Neste trabalho são utilizadas cerca de 500 amostras de teste.

3.3. Análise dos metamodelos na presença de ruído

Um segundo estudo desta dissertação assenta em adicionar aos dados de validação dos modelos um fator adicional, ruído. Neste contexto, serão estudados três valores diferentes de ruído, 0.01%, 0.5% e 1%. O objetivo é verificar se um pequeno erro aleatório nos resultados do ensaio cruciforme (força e deformação), influencia de forma considerável a performance do metamodelos. O procedimento é semelhante à análise anterior, mas serão criados três novos *Datasets* de teste baseados no *Dataset* original, mas em que é adicionada de forma aleatória erro com um valor de 0.01%, 0.5% e 1%.

3.4. Procedimento

O processo de metamodelação é executado com recurso à linguagem de programação *Python*® e implementado no ambiente de desenvolvimento *PyCharm*®. Foi utilizada a biblioteca *GPy*, que possui um suporte da regressão dos Processos Gaussianos escrita em *Python*® (*GPy Documentation Release Author, 2015*). Inclui as funções de covariância e otimizadores apresentados.

O processo de metamodelação seguiu várias etapas diferentes, desde a construção dos *Datasets* até ao treino e teste dos metamodelos. A Figura 3.5 apresenta um fluxograma com os vários passos realizados. Inicialmente foi elaborado um código em *Python*®, com cerca de 140 linhas, com o objetivo de recolher os valores das forças e deformações, obtidos das simulações numéricas de treino e de teste. Os valores das deformações são obtidos para diferentes conjuntos de nós de acordo com a estratégia utilizada (ver secções 3.1.1, 3.1.2 e 3.1.3). De seguida, este código agrupa estes dados num novo ficheiro *Excel*® de forma organizada. Numa fase posterior, é realizada a normalização destes valores (ver secção 3.1.4) finalizando o pré-tratamento dos *Datasets*. A etapa seguinte é a construção dos metamodelos, também em *Python*®, num programa com aproximadamente 440 linhas. Este programa consiste em abrir os *Datasets* de treino e teste e, usando a biblioteca *GPy* com o *kernel* e otimizador (ver secção 3.2.1), realizar o treino do metamodelo. No treino do metamodelo é utilizada uma técnica de validação cruzada, em que se divide (de forma aleatória) 70% do *Dataset* original num subconjunto de treino, e os restantes 30% num subconjunto de teste. Este processo é realizado 15 vezes para cada metamodelo. Após o treino, são obtidas as previsões dos parâmetros constitutivos, que se pretendem identificar, as quais são comparados com os dados de teste de forma a obter o erro relativo médio. Este

programa teve também alterações a longo do seu desenvolvimento, quer na análise dos vários *kernels* e otimizadores, ou na análise com vários *Datasets* feita na primeira estratégia, que exigiu alterações consideráveis, uma vez que são construídos 6 metamodelos diferentes.

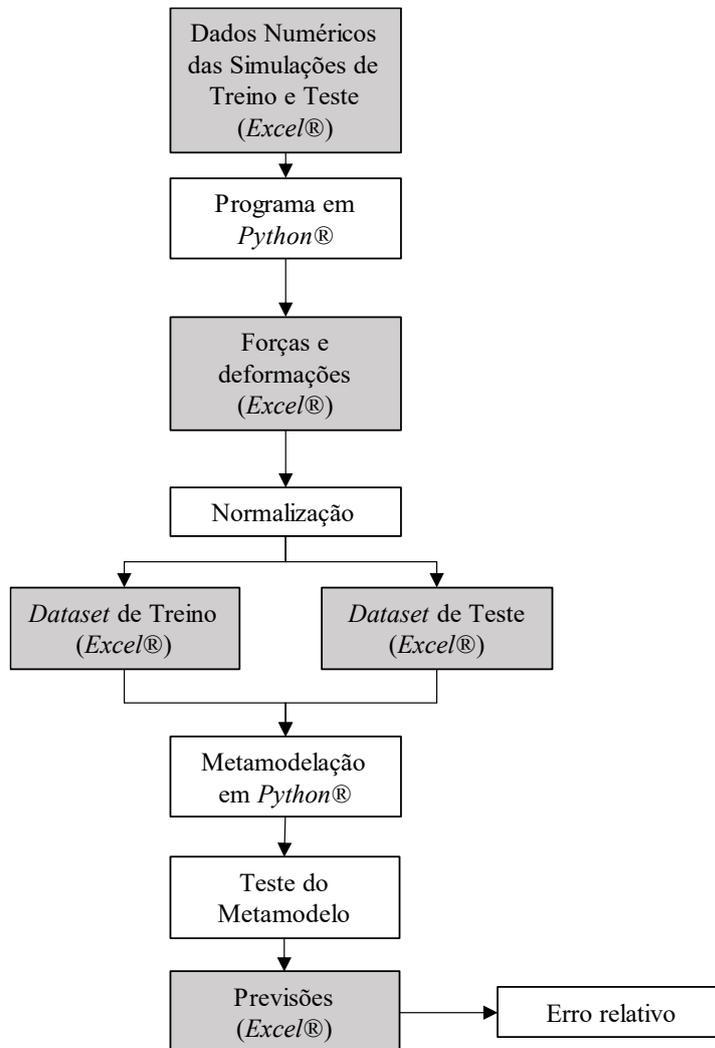


Figura 3.5. Fluxograma da metodologia.

4. RESULTADOS

Neste capítulo é analisada a performance dos metamodelos na identificação dos parâmetros constitutivos, tendo em conta: as três diferentes estratégias; o tipo de *kernel* e otimizador selecionados; e o número de amostras utilizadas no treino. A performance dos metamodelos é avaliada em termos do tempo de execução do metamodelo e da qualidade da identificação. Por fim, é analisado de que forma o erro no conjunto de entrada (forças e deformações) influencia a performance dos metamodelos.

4.1. Análise de performance: *Kernel* e otimizador

Nesta secção é avaliada e comparada a performance dos metamodelos para as três estratégias, utilizando diferentes *kernels* e otimizadores. Na Figura 4.1 é apresentado o tempo de treino dos metamodelos necessários à aplicação da estratégia Múltiplos *Datasets*. Os metamodelos foram treinados para um *Dataset* com 1024 simulações de forma a garantir a estabilidade dos resultados (analisado posteriormente na secção 4.2). Pela análise da Figura 4.1 observa-se que:

- Os metamodelos que utilizam o *kernel Matern (3/2)* necessitam de um tempo de treino maior (podendo atingir as 10 horas), e os que utilizam o *kernel RBF* são os que têm o treino mais rápido, ultrapassando apenas por uma vez uma hora de treino (parâmetro n);
- Os metamodelos treinados com o otimizador *SCG* requerem o maior tempo de treino, exceto numa situação (combinação *RBF/TNC* para o parâmetro Y_0), e os treinados com o otimizador *LBFGS* são os que precisam de um menor tempo de treino, sempre inferior a seis minutos;
- Os metamodelos associados ao parâmetro n são os que apresentam o treino mais demorado (até dez horas), já os metamodelos associados ao parâmetro F são os que apresentam o treino mais rápido (inferior a uma hora).

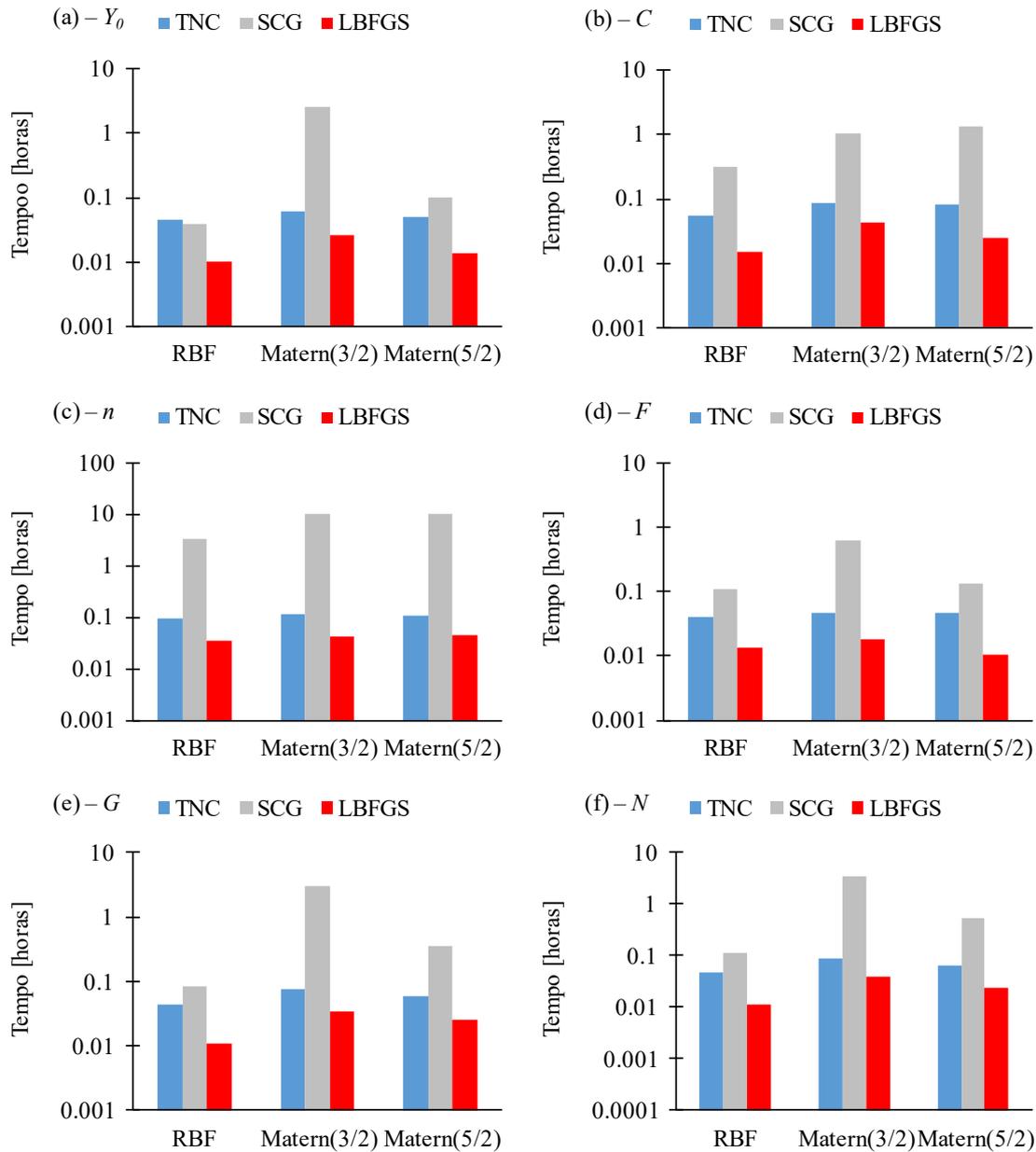


Figura 4.1. Tempo de treino dos metamodelos, para diferentes *kernels* e otimizadores, associados à estratégia “Múltiplos *Datasets*” na identificação dos parâmetros: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

Na Figura 4.2 é indicado o erro relativo associado ao teste do metamodelo para diferentes *kernels* e otimizadores. Constata-se desta figura que:

- O parâmetro Y_0 apresenta um erro percentual abaixo de 1.2% para todas as análises consideradas. O *kernel* que apresenta valores de erro mais baixos é o *RBF*, na ordem dos 0.9%, sendo o maior o *Matern (3/2)* com um valor superior a 1%. A nível de otimizadores, estes apresentam comportamentos semelhantes com o valor mínimo obtido para o *SCG* e *TNC* para o *kernel RBF*;

-
- O parâmetro C apresenta um erro percentual abaixo de 2% para todos os *kernels* considerados. O que apresenta valores de erro mais baixos é, novamente, o *RBF* na ordem dos 1.9%, e o maior o *Matern (5/2)* já nos 2%. A nível de otimizadores para o *RBF* os valores são idênticos para os três tidos em conta, 1.9%;
 - O parâmetro n apresenta um erro percentual entre 3% e 4%. Os *kernels* que apresentam valores de erro mais baixos são o *RBF* a par do *Matern (3/2)* com valores por volta dos 3.5% contrastando com cerca de 4% no *Matern (5/2)*. Os otimizadores *TNC* e *SCG* são os que apresentam melhor valor de erro (cerca de 3.4%) para o *kernel Matern (3/2)*;
 - O parâmetro F tem um erro entre 3% e 3.5%. Os *kernels* que apresentam valores de erro mais baixos são o *RBF* e *Matern (5/2)* com valores por volta dos 3.25%. Os otimizadores *LBFGS* e *SCG* são os que apresentam melhor performance sendo o valor de erro mais baixo para o *kernel Matern (5/2)* com o otimizador *LBFGS*, cerca de 3.2%;
 - O parâmetro G tem um erro entre 0.3% e 0.5%. O *kernel RBF* apresenta os valores mais baixos de erro com o otimizador *SCG* a destacar-se com um erro de cerca de 0.35%. Os valores mais altos correspondem ao *Matern (3/2)* com valores de erro que chegam até aos 0.45% para o otimizador *LBFGS*;
 - O parâmetro N tem um erro entre 1.1% e 1.3%. Os *kernels* apresentam valores de erro muito idênticos. A nível dos otimizadores, também as suas performances são da mesma ordem de erro, não existindo uma combinação que se destaque.

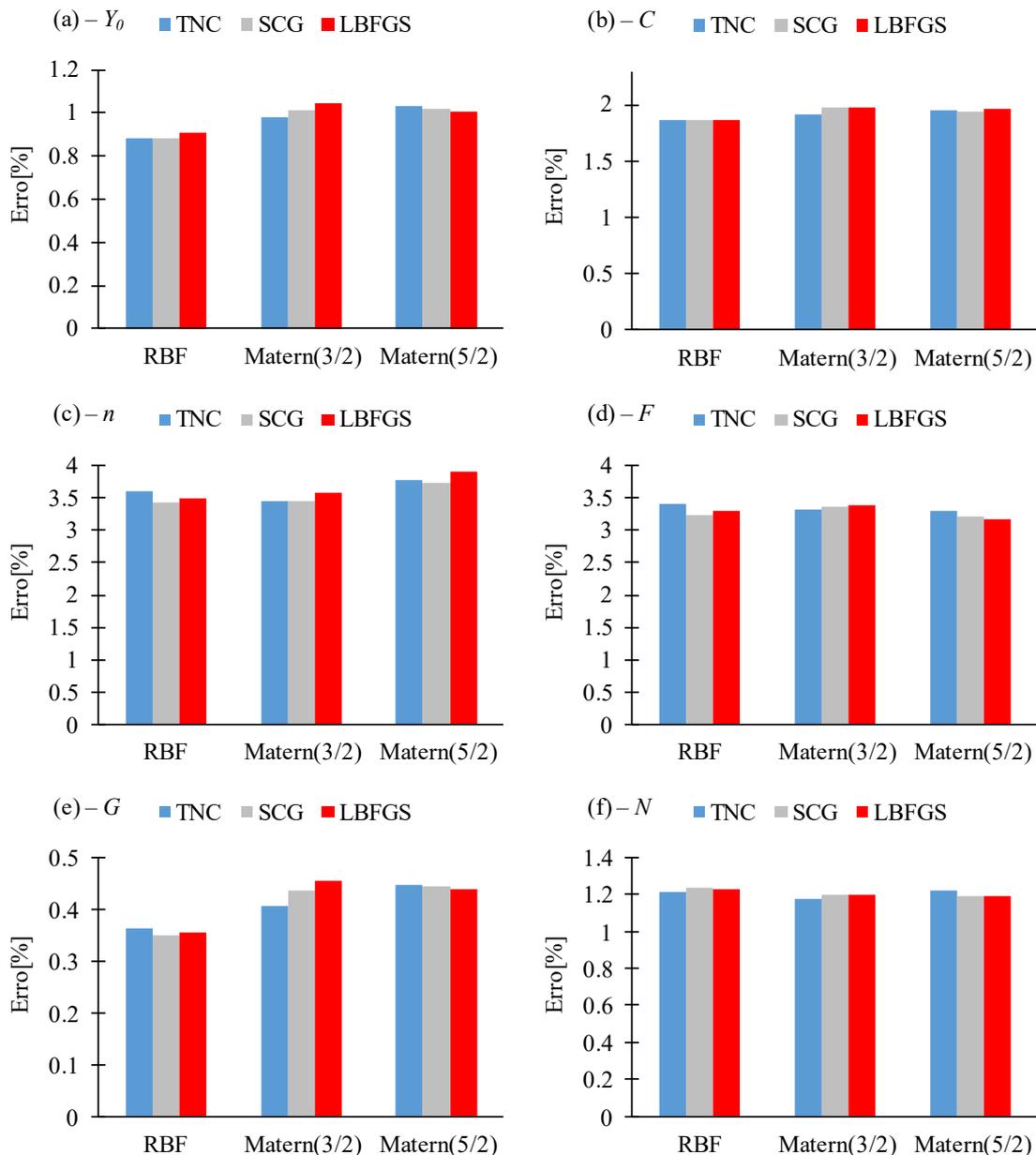


Figura 4.2. Performance do *kernel* e otimizador para a estratégia “Múltiplos *Datasets*” na identificação dos parâmetros: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

A partir das observações retira-se que as combinações entre *kernel*/otimizador têm um impacto reduzido no erro relativo das previsões. No entanto, nesta dissertação optou-se pela utilização do *kernel RBF* e do otimizador *SCG*, uma vez que permitem obter os erros mais reduzidos na maioria dos casos. Apesar deste otimizador ser o que tem o maior custo computacional (ver Figura 4.1), nesta dissertação optou-se por dar prioridade à qualidade da identificação já que o custo computacional mais elevado (máximo de três horas) é aceitável. Para futuras investigações, onde o tempo seja um fator mais decisivo, a escolha deste

otimizador não se justifica já que o tempo necessário não corresponde a uma diminuição significativa do erro.

A análise anterior foi igualmente efetuada para as outras duas estratégias. Na Figura 4.3 e Figura 4.4 é indicado o tempo de treino para as estratégias “*Dataset Único*” e “*Dataset Uniforme*”, respetivamente. Na Figura 4.5 e na Figura 4.6 é indicado o erro relativo associado ao teste do metamodelo para as estratégias “*Dataset Único*” e “*Dataset Uniforme*”, respetivamente.

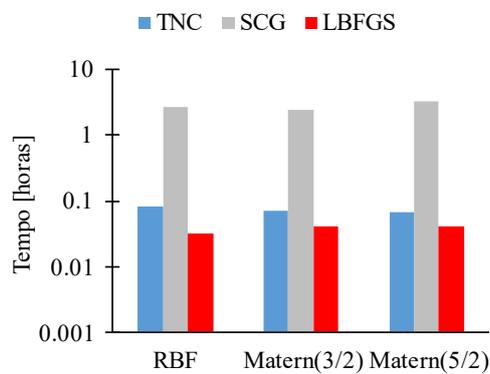


Figura 4.3. Tempo de treino dos metamodelos, para diferentes *kernels* e otimizadores, associados à estratégia “*Dataset Único*”.

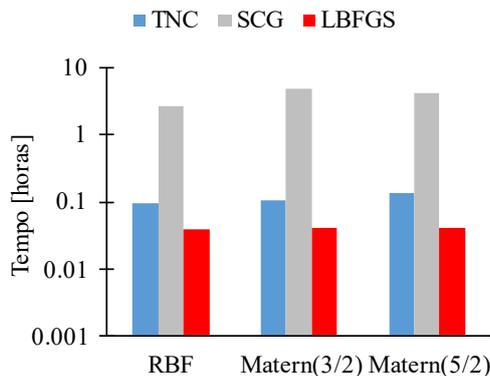


Figura 4.4. Tempo de treino dos metamodelos, para diferentes *kernels* e otimizadores, associados à estratégia “*Dataset Uniforme*”.

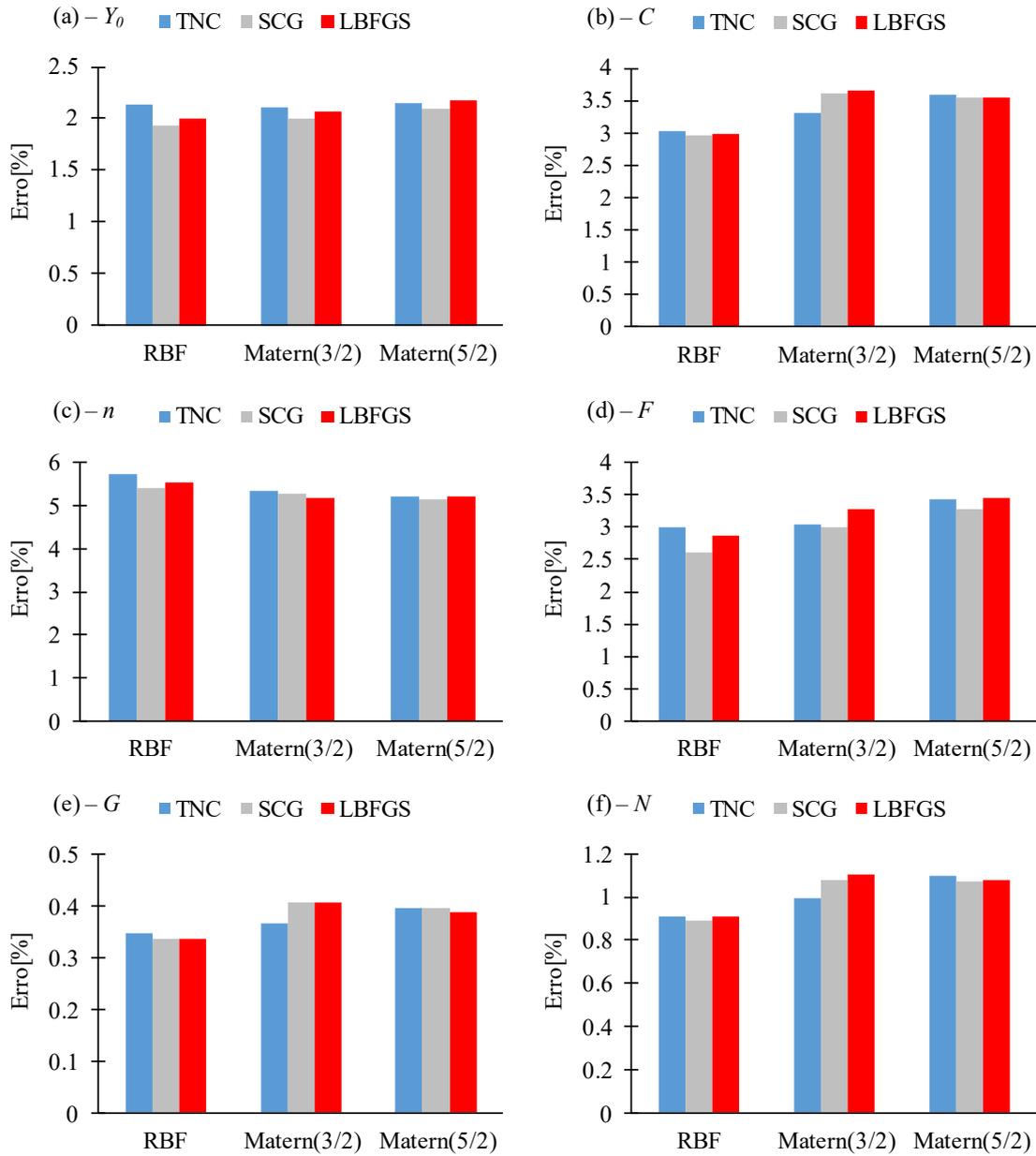


Figura 4.5. Performance dos metamodelos, para diferentes *kernels* e otimizadores, associados à estratégia “Dataset Único” na identificação dos parâmetros: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

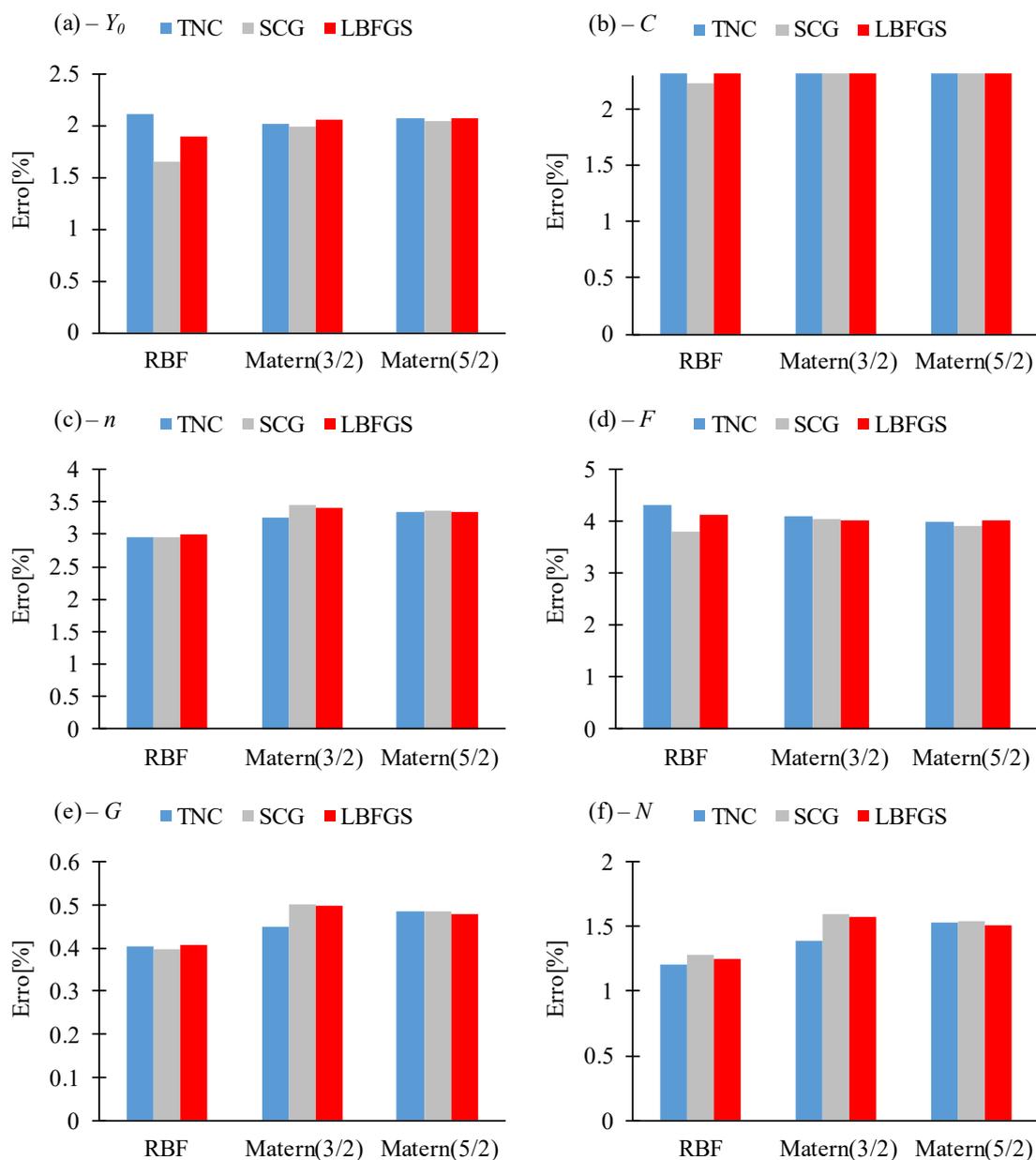


Figura 4.6. Performance dos metamodelos, para diferentes *kernels* e otimizadores, associados à estratégia “Dataset Uniforme” na identificação dos parâmetros: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

A partir da Figura 4.5, Figura 4.6, Figura 4.3 e Figura 4.4 verifica-se que os resultados são semelhantes aos da estratégia “Múltiplos Datasets”, pelo que as figuras não são tão pormenorizadamente analisadas. Os metamodelos treinados com o *kernel RBF* e o otimizador *SCG* obtêm os menores erros na identificação dos parâmetros, sendo que a utilização do otimizador *SCG* está associada a um maior custo computacional. De notar, que nas estratégias “Dataset Uniforme” e “Dataset Único” os valores de erro são superiores aos

valores obtidos na estratégia “Múltiplos *Datasets*” devido à natureza da mesma, isto é, nesta estratégia existe a construção de um metamodelo para cada parâmetro constitutivo tendo, por isso, um erro inferior.

4.2. Análise de performance: Número de Amostras

Nesta secção é avaliada e comparada a performance dos metamodelos para as três estratégias, ao variar o tamanho da amostra associada ao conjunto de entrada, isto é, a quantidade de informação (simulações numéricas) utilizada no treino dos vários metamodelos. A Figura 4.7 mostra o erro relativo médio obtido na identificação de cada parâmetro através das três estratégias e utilizando *Datasets* com 256, 512, 1024, 2048 e 4096 simulações. Desta figura conclui-se que:

- Existe uma diminuição do tipo exponencial no erro relativo à medida que o número de simulações do *Dataset* aumenta;
- A partir das 1024 simulações, de modo geral, todas as estratégias apresentam uma estabilização do valor do erro relativo (inferior a 1%), para qualquer um dos parâmetros;
- Para alguns dos parâmetros obtém-se erros inferiores a 1% para amostras bastante reduzidas, de 256 (parâmetro G) e 512 (parâmetros Y_0 e N) simulações, independentemente da estratégia utilizada;
- Os resultados são semelhantes entre as várias estratégias, ainda assim na maioria dos casos a estratégia “Múltiplos *Datasets*” apresenta os melhores resultados.

Desta análise é possível aferir que a escolha de diferentes estratégias não tem influência significativa no valor do erro relativo. Apesar das diferenças serem mínimas, quanto maior o número de simulações usadas no *Dataset* menor as diferenças entre as estratégias na previsão dos parâmetros constitutivos.

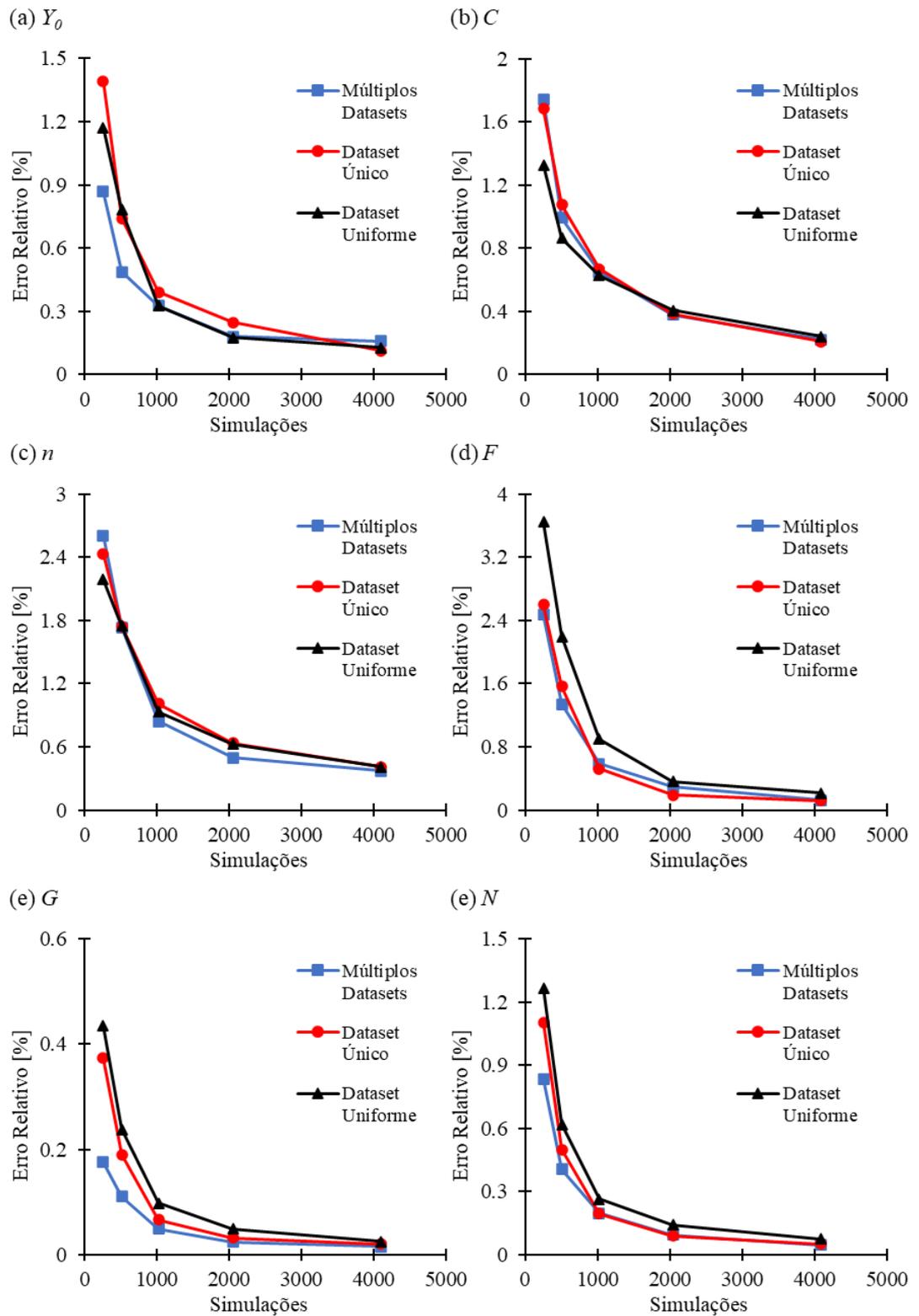


Figura 4.7. Análise do erro relativo das várias estratégias para 256, 512, 1024, 2048 e 4096 simulações para: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

De forma a analisar a influência do tamanho da amostra associada ao conjunto de entrada no custo computacional da estratégia, é representado na Figura 4.8 a evolução do tempo total de treino dos metamodelos com o número de simulações utilizado nos Datasets, nomeadamente para 256, 512, 1024, 2048 e 4096 simulações. A Figura 4.8 permite verificar que:

- O tempo de treino dos metamodelos não tem um comportamento linear nem um comportamento exponencial com o aumento do número de simulações utilizado no *Dataset*;
- A estratégia “*Dataset Uniforme*” é a que apresenta menores valores de tempo (exceto para 1024 simulações) desde alguns segundos até um máximo de três horas;
- A estratégia “*Dataset Único*” requer um tempo de cálculo que varia entre a meia dúzia de minutos até um valor superior a sete horas.
- A estratégia “*Múltiplos Datasets*” é a que apresenta valores de tempo maiores, começando por uma dúzia de minutos até um máximo de trinta horas.

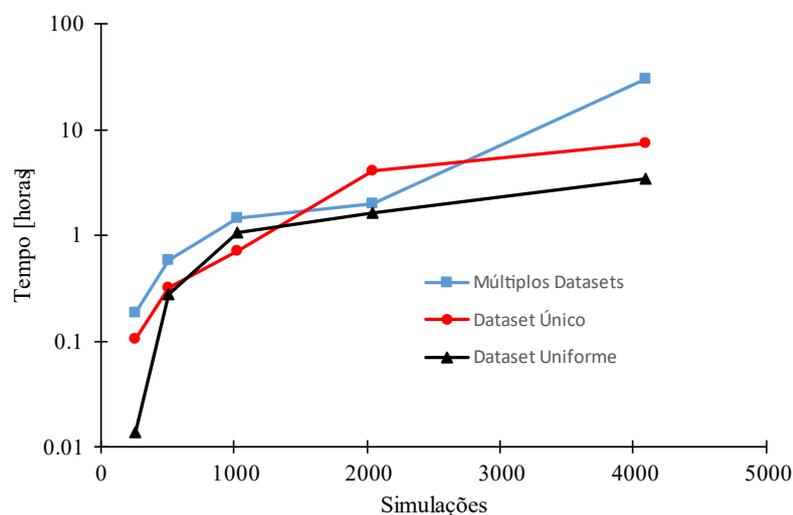


Figura 4.8. Análise do tempo das várias estratégias para 256, 512, 1024, 2048 e 4096 simulações.

Pode-se concluir destes resultados que para 1024 simulações é possível obter resultados precisos sem prejudicar o custo computacional da estratégia utilizada. Todas as estratégias apresentam performances idênticas, ainda que no geral a estratégia “*Múltiplos Datasets*” é a que permite obter as melhores identificações.

4.3. Análise de performance: Ruído

Nesta secção é avaliada e comparada a performance dos metamodelos para as três estratégias, ao introduzir diferentes níveis de ruído (0.1%, 0.5% e 1%) no conjunto de teste dos metamodelos (Forças e Deformações). A Figura 4.9 mostra o erro relativo médio obtido na identificação de cada parâmetro através das três estratégias, e considerando três níveis de ruído no *Dataset* de teste dos metamodelos. Todos os metamodelos foram treinados com o *Dataset* de 1024 simulações numéricas como apresentado nas secções anteriores, i.e., isentos de ruído. Da Figura 4.9 observa-se que:

- Para todos os parâmetros e estratégias existe um aumento do erro relativo com o aumento do erro nos dados de teste;
- A estratégia “Múltiplos *Datasets*” destaca-se como a que menos varia à medida que o ruído cresce, já a estratégia “*Dataset* Uniforme” é a mais afetada pelo aumento do ruído;
- A “*Dataset* Uniforme” apresenta erros elevados para 0.5% e 1% de ruído, nomeadamente, erros superiores a 10% na identificação dos parâmetros F e n ;
- A estratégia “Múltiplos *Datasets*” permite, para 1% de ruído, manter o erro relativo abaixo de 5% para todos os parâmetros à exceção do parâmetro n ;
- A estratégia “*Dataset* Único” apresenta resultados de erro intermédios relativamente às duas outras estratégias;
- Os parâmetros Y_0 , F e G possuem um erro sempre inferior a 1% para qualquer valor de ruído na estratégia “Múltiplos *Datasets*”.

Pode concluir-se, para esta análise, que o ruído nos valores das forças e deformações do conjunto de entrada afeta de forma muito significativa a qualidade da identificação. Nesta situação a escolha da estratégia é particularmente importante, uma vez que o ruído influencia de forma diferente as três estratégias. É de realçar a estratégia “Múltiplos *Datasets*” que permite obter erros na identificação sempre inferiores a 5%, à exceção do parâmetro n para 1% de ruído. Os parâmetros de encruamento (C e n), que são mais sensíveis aos valores das forças, e que apresentam índices de Sobol mais baixos para as deformações (ver Tabela 3.1 e Tabela 3.2), têm uma previsão mais instável à medida que o ruído aumenta. Especula-se que esta sensibilidade ao ruído resulte do facto de o ensaio cruciforme atingir pequenas deformações, e conseqüentemente, existir pouca informação no treino dos metamodelos sobre o encruamento do material para grandes deformações.

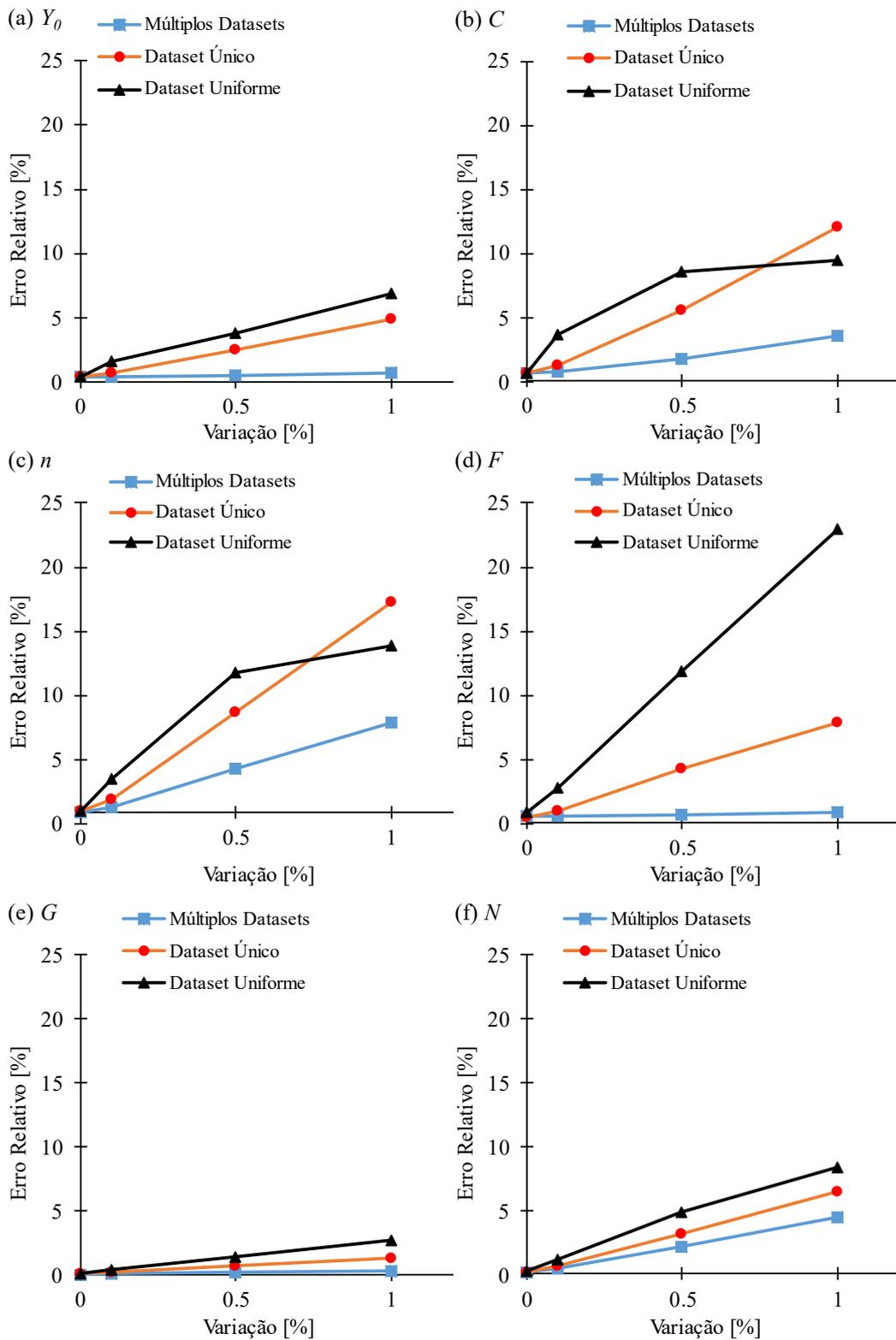


Figura 4.9. Performance dos metamodelos sujeitos a ruído para: (a) Y_0 ; (b) C ; (c) n ; (d) F ; (e) G ; (f) N .

5. CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo determinar os parâmetros constitutivos de chapas metálicas com recurso à metamodelação do ensaio de tração biaxial em provete cruciforme. Neste estudo pretendeu determinar-se os parâmetros Y_0 , C e n , da lei de encruamento de Swift, e F , G e N do critério de anisotropia de Hill'48. A técnica de metamodelação utilizada para esta identificação foi os Processos Gaussianos.

Inicialmente foi estudada a performance e o custo computacional dos metamodelos ao utilizar diferentes *kernels* e otimizadores. Concluiu-se que as diferenças entre *kernels* e otimizadores testados não é um fator eliminatório de nenhum deles. No entanto, apesar de um maior custo computacional, o *kernel RBF* e o otimizador *SCG* apresentaram o valor de erro mais baixo, tendo-se optado por estes no restante trabalho.

Posteriormente, foram testadas três estratégias diferentes para a identificação dos parâmetros. A primeira estratégia consistiu em definir um conjunto de dados de entrada para cada parâmetro constitutivo. Neste caso, as deformações foram medidas nas regiões do provete onde os resultados são mais influenciados pelo parâmetro constitutivo que se pretende identificar. Na segunda estratégia, as deformações foram medidas nas regiões do provete onde os resultados são mais influenciados pelo conjunto dos vários parâmetros constitutivos que se pretendem identificar. Já na terceira estratégia, as deformações foram medidas em nós distribuídos uniformemente ao longo de todo o provete. As estratégias foram testadas com e sem ruído no *Dataset* de teste, de forma a avaliar a influência do ruído na identificação dos parâmetros.

A nível das estratégias adotadas foi possível verificar, na análise sem ruído, que as três obtêm um valor de erro relativo muito semelhante quando o número de simulações é elevado, não existindo uma diferença significativa entre elas. A partir de 1024 simulações todos os parâmetros são identificados com um erro inferior a 1% para qualquer estratégia. Por outro lado, quando a previsão inclui ruído no *Dataset* de teste, a diferença entre as estratégias é mais acentuada. A estratégia “Múltiplos *Datasets*” destaca-se nesta análise, apresentando os melhores valores de erro para todos os parâmetros sendo ainda aquela que é menos influenciada pelo aumento do valor do ruído. Esta estratégia assume um erro máximo de 4.5% para um ruído de 1% em todos os parâmetros à exceção do parâmetro n .

Nesta dissertação recorreu-se aos Processos Gaussianos como técnica de modelação e a um determinado conjunto de *kernels* e otimizadores. Em análises futuras, seria interessante o uso de outras técnicas de metamodelação (Redes Neurais, etc.) e diferentes combinações de *kernels* e de otimizadores de modo a perceber se os resultados obtidos se enquadram com os resultados deste estudo. Sugere-se ainda para trabalhos futuros, a aplicação das estratégias aqui desenvolvidas, com as devidas alterações, a outros modelos constitutivos utilizando critérios de plasticidade mais complexos (i.e., descritos por um maior número de parâmetros). Seria ainda interessante analisar mais detalhadamente a influência do ruído, por exemplo: utilizar diferentes níveis de ruído para as forças e deformações; e ter em conta o ruído no treino dos metamodelos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Barton, R. R., & Meckesheimer, M. (2006). Chapter 18 Metamodel-Based Simulation Optimization. In *Handbooks in Operations Research and Management Science* (Vol. 13, Issue C, pp. 535–574). [https://doi.org/10.1016/S0927-0507\(06\)13018-2](https://doi.org/10.1016/S0927-0507(06)13018-2)

Câmara, B. M. dos S. de A. da. (2021). *Análise de Sensibilidade do Ensaio Biaxial em Provette Cruciforme* Tese de Mestrado em Engenharia Mecânica na especialidade de Produção e Projeto, Departamento de Engenharia Mecânica, Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade de Coimbra.

GPy Documentation (2015). Acedido a 18 de maio de 2023, em <https://buildmedia.readthedocs.org/media/pdf/gpy/stable/gpy.pdf>

Hill, R. (1948). A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals. In *Weissenberg, K* (Vol. 67). <https://royalsocietypublishing.org/>

Jin, R., Chen, W., & Simpson, T. W. (2001). Comparative studies of metamodeling techniques under multiple modelling criteria. In *Struct Multidisc Optim* (Vol. 23). Springer-Verlag.

Kanagawa, M., Hennig, P., Sejdinovic, D., & Sriperumbudur, B. K. (2018). *Gaussian Processes and Kernel Methods: A Review on Connections and Equivalences*. <https://arxiv.org/abs/1807.02582>

Lin JingDong, Huang Li, & Zhou HongBo. (2017). Forming defects prediction for sheet metal forming using Gaussian process regression. *2017 29th Chinese Control And Decision Conference (CCDC), Chongqing, China*, 472–476. doi.org/10.1109/CCDC.2017.7978140

Liu, D. C., & Nocedal, J. (1989). On the limited memory BFGS method for large scale optimization In *Mathematical Programming* (Vol. 45).

Makris, A., Vandenberg, T., Ramault, C., Van Hemelrijck, D., Lamkanfi, E., & Van Paepegem, W. (2010). Shape optimisation of a biaxially loaded cruciform specimen. *Polymer Testing*, 29(2), 216–223. <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2009.11.004>

Marques, A., Pereira, A., Ribeiro, B., & Prates, P. (2022). On the Identification of Material Constitutive Model Parameters Using Machine Learning Algorithms. *Key Engineering Materials*, 926 KEM, 2146–2153. <https://doi.org/10.4028/p-5hf550>

Nash, S. G. (2000). A survey of truncated-Newton methods. In *Journal of Computational and Applied Mathematics* (Vol. 124). www.elsevier.nl/locate/cam

Nataj, S., & Lui, S. H. (2020). Superlinear convergence of nonlinear conjugate gradient method and scaled memoryless BFGS method based on assumptions about the initial point. *Applied Mathematics and Computation*, 369. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2019.124829>

Prates, P. A. D. (2010). *Metodologia de Análise Inversa para Determinação Simultânea dos Parâmetros de Leis Constitutivas, com Recurso a um Provete Cruciforme*. Faculdade de Ciências e Tecnologias da Universidade de Coimbra.

Prates, P. A., Oliveira, M. C., & Fernandes, J. V. (2014a). A new strategy for the simultaneous identification of constitutive laws parameters of metal sheets using a single test. *Computational Materials Science*, 85, 102–120. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.12.043>

Ruivo, M. A. F. P. (2020). *Estudo Numérico do Processo de Estampagem de uma Taça Quadrada: uma Análise Estocástica* Tese de Mestrado em Engenharia Mecânica na especialidade de Produção e Projeto, Departamento de Engenharia Mecânica, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra.

Schulz, E., Speekenbrink, M., & Krause, A. (2018). A tutorial on Gaussian process regression: Modelling, exploring, and exploiting functions. *Journal of Mathematical Psychology*, 85, 1–16. <https://doi.org/10.1016/j.jmp.2018.03.001>

Sobol', I. M. (1967). On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 7(4), 86–112. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(67\)90144-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(67)90144-9)

Teaca, M., Charpentier, I., Martiny, M., & Ferron, G. (2010). Identification of sheet metal plastic anisotropy using heterogeneous biaxial tensile tests. *International Journal of Mechanical Sciences*, 52(4), 572–580. <https://doi.org/10.1016/J.IJMECSCI.2009.12.003>