

SCM 2020

Prof. Caetano R. Miranda

IFUSP, São Paulo - Brazil

cmiranda@if.usp.br

Camilo A. F. Salvador

IFUSP, São Paulo - Brazil

csalvador@usp.br

INTRODUÇÃO AO APRENDIZADO DE MÁQUINA EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS

<https://github.com/Sampa-USP/scm2020/>

Programação

05/11 – Encaminhamento – Projetos

06/11 - Aula 1 - Aprendizado de maquina (tutorial 1)

12/11 - Aula 2 - Lab 2 de aprendizado de maquina

13/11 - Aula 3 - Lab 2 de aprendizado

19/11 - Elementos Finitos

20/11 – Feriado Municipal (sem aula)

26/11 - Elementos Finitos - Lab 1 - caso Estrutura

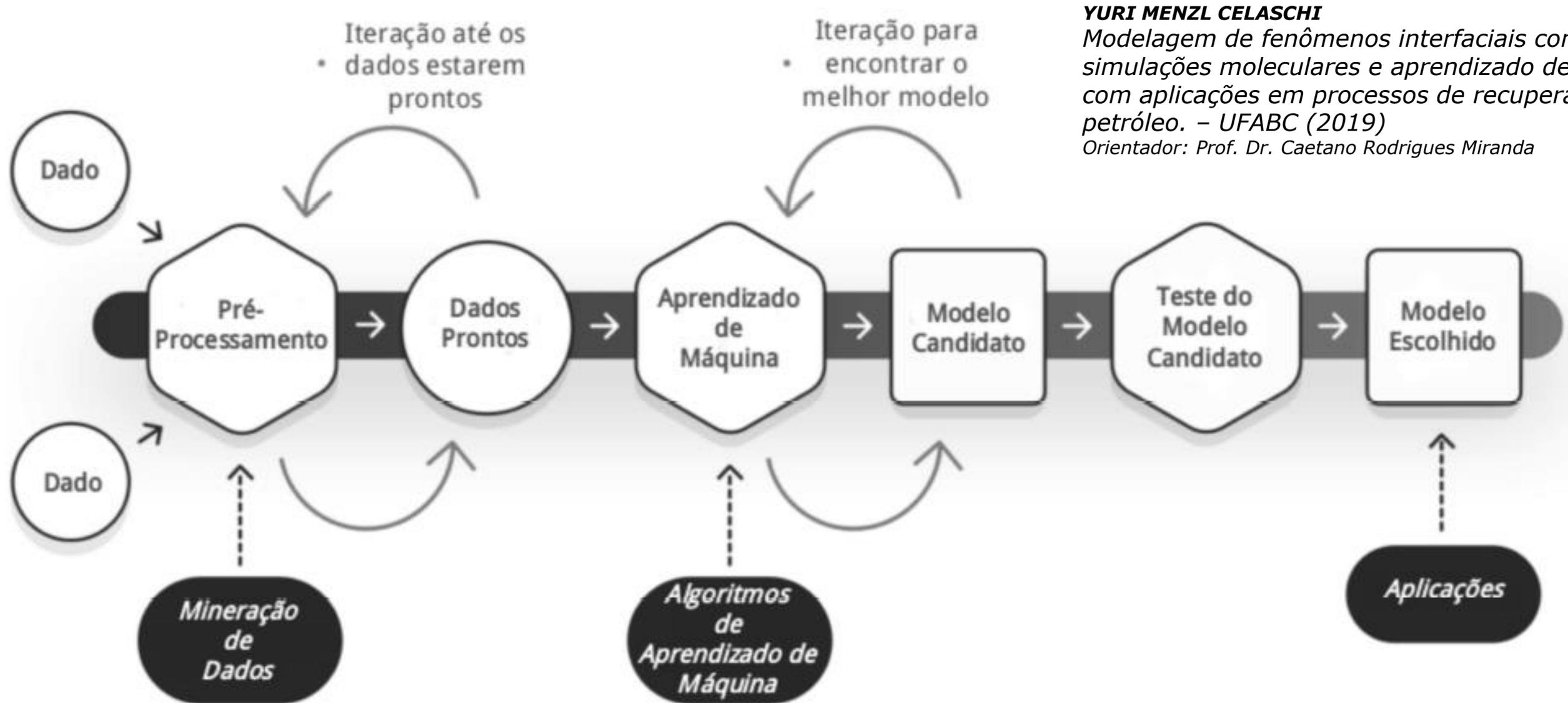
27/11 – Elementos Finitos - Lab 2 - caso Li

03/12 e 04/12 – Discussão Wikipédia - Discussão Projetos

10/12 - Apresentação Grupos 1,2,3,4,6

11/12 – Resultado final e revisão

Fluxo de dados no aprendizado de máquina



YURI MENZL CELASCHI

Modelagem de fenômenos interfaciais combinando simulações moleculares e aprendizado de máquina com aplicações em processos de recuperação de petróleo. – UFABC (2019)

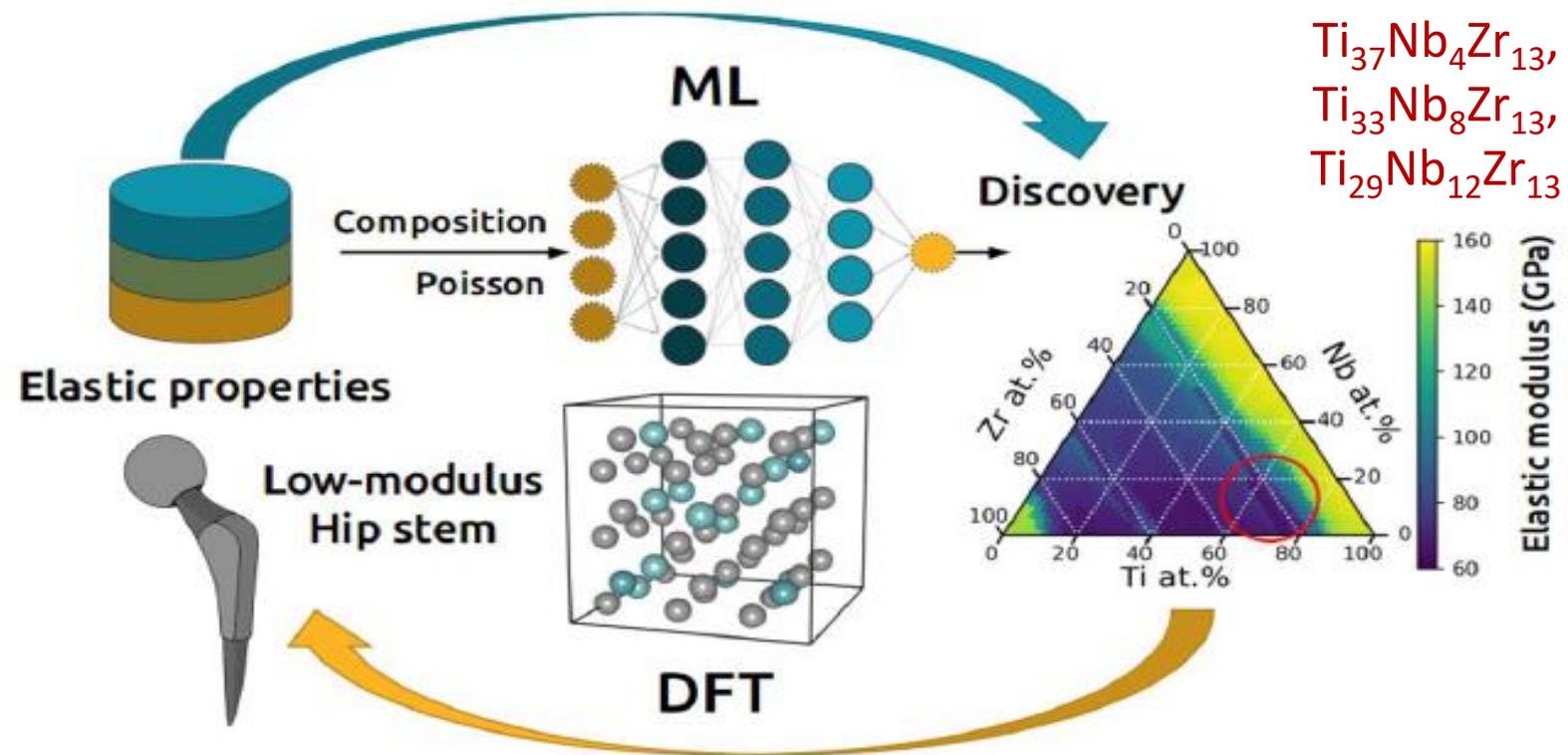
Orientador: Prof. Dr. Caetano Rodrigues Miranda

Materials discovery @ Sampa

In collaboration with Dr. Camilo Salvador
and Dr. Bruno Zornio
CNPq and PRP - USP

High performance alloys for biomedical, aeronautical/aerospace and O&G applications

Discovery of low-modulus Ti-Nb-Zr alloys



Advantages

- ML can model any system
- non-linear optimization
- might find unexpected candidates

Integration of machine learning and first principles calculations to make disruptive discoveries

LabFEM 1 - Projeto De Uma Perna Protética Utilizando O Método dos Elementos Finitos

Motivação

- Próteses para alta performance esportiva;
- Designs inspirados nos modelos propostos pela Össur;
- <https://www.ossur.com.br/solucoes-proteticas/produtos/sport-solutions?view=products>
- Aplicação de novos materiais;
- Inclusão social;



Flex-Run - Össur



Cheetah Xtend - Össur

Objetivos

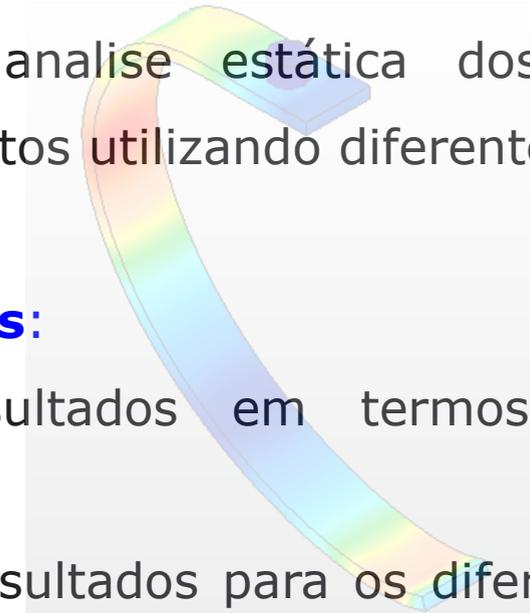
Aplicar o método de elementos finitos (MEF) usando o software Elmer para:

Objetivos Gerais:

- ✓ Realizar uma análise estática dos modelos de próteses propostos utilizando diferentes materiais;

Objetivos específicos:

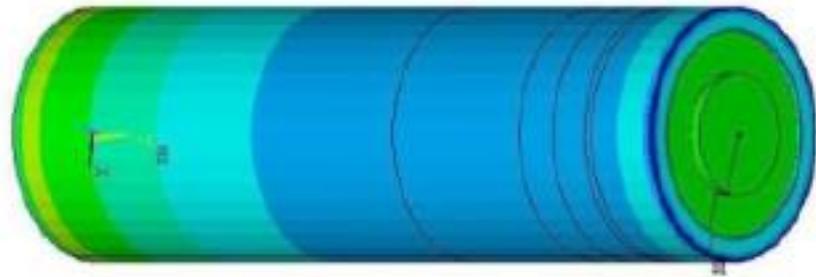
- ✓ Apresentar resultados em termos de tensões, deslocamentos;
- ✓ Comparar os resultados para os diferentes modelos (geometrias) de próteses que serão fornecidos;



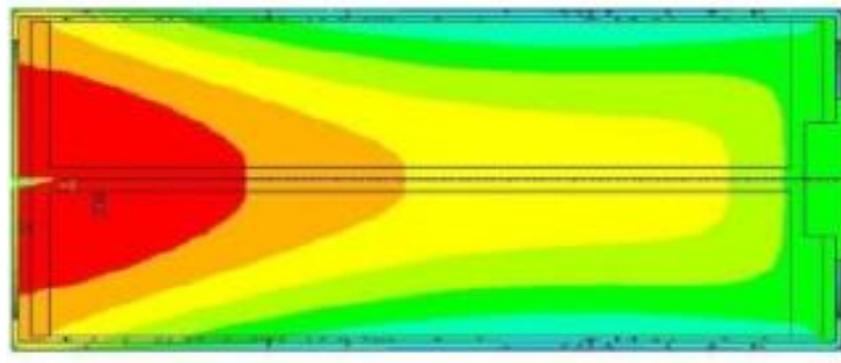
Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li

Motivação

- As baterias de íon-lítio são amplamente estudadas devido a alta densidade de energia.
- Seu desempenho depende das condições térmicas e da uniformidade do gradiente de temperatura interno.



Distribuição de temperatura na superfície da bateria.



Gradiente de temperatura no interior da bateria.

Objetivo geral

Analisar o regime do estado estacionário da distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li.

Objetivo específicos

- Implementar um modelo (elementos finitos) de distribuição térmica para uma bateria cilíndrica.
- Considerar a estrutura física e as reações eletroquímicas.
- Determinar as condições iniciais, condições de contorno e parâmetros térmicos dos componentes da bateria a partir de cálculos teóricos e/ou simulações moleculares.

Ingredientes

Condições Físicas

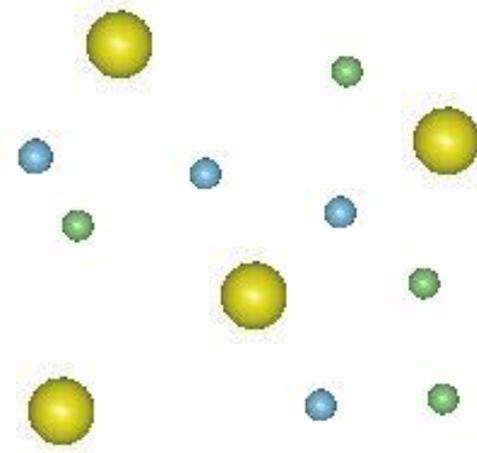
Parâmetros físicos importantes
Condições iniciais e de contorno
Metodologia



Design virtual de materiais

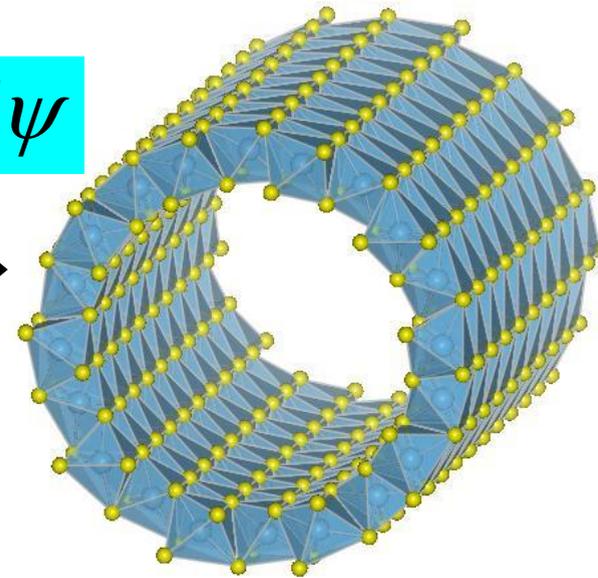
$$\langle \psi | \text{Melhor bateria} | \psi^* \rangle$$

Composição



Estruturas

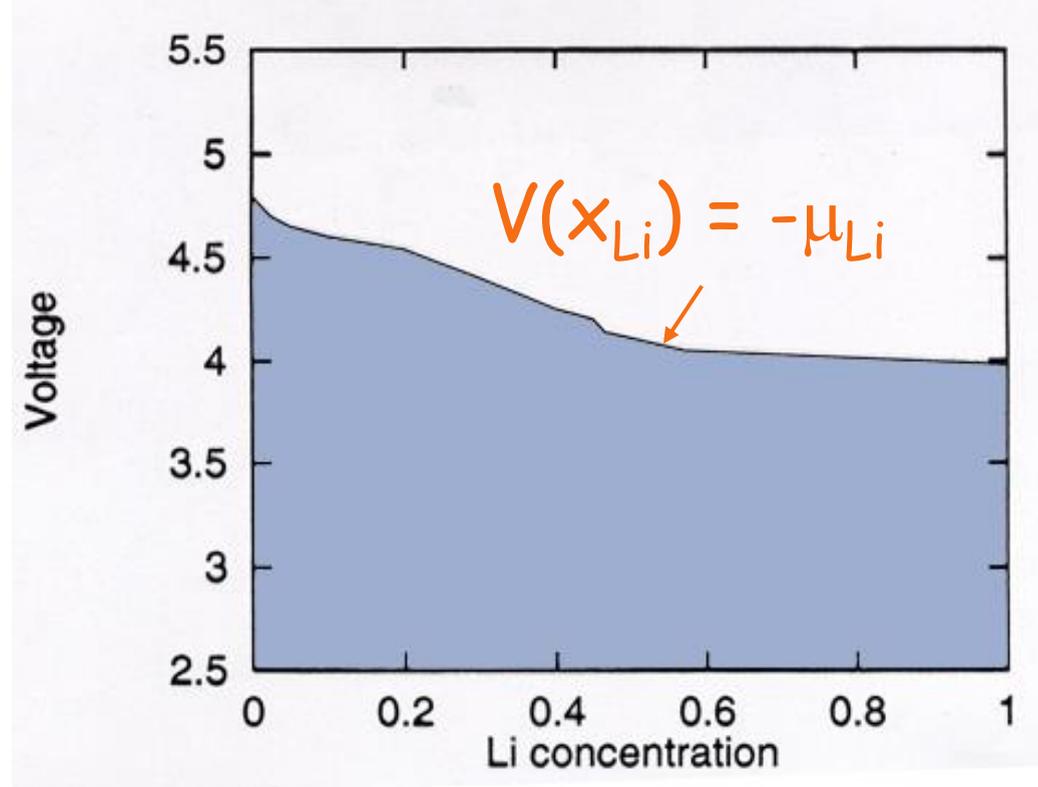
$$H\psi = E\psi$$



Propriedades

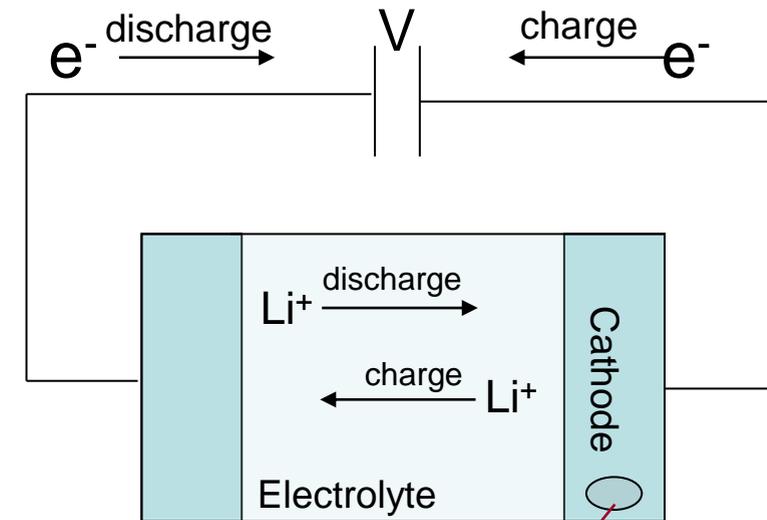
Capacidade / Voltagem
Parametro de rede
Densidade de carga
Estrutura eletrônica
Barreira de ativação

Voltage é o potencial químico do Li

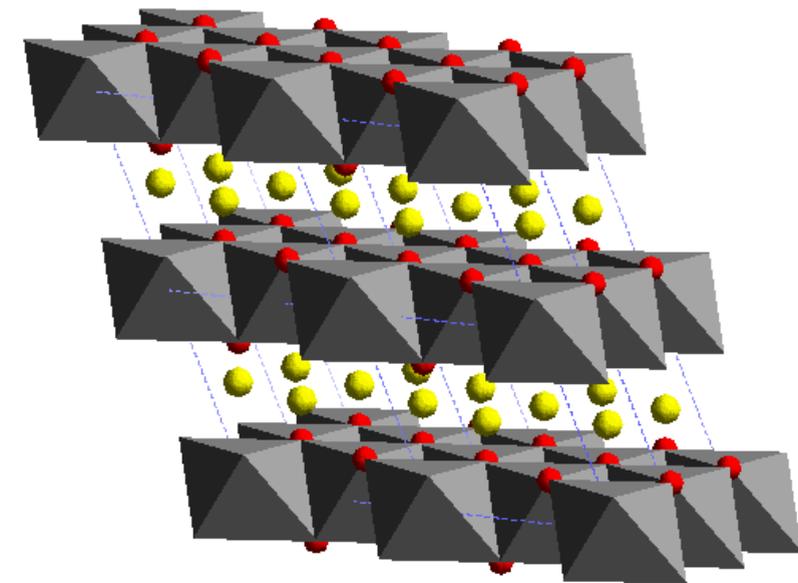


$$V(x) = - \left(\mu_{Li}(x) - \mu_{Li}^{ref} \right)$$

$$\mu_{Li}(x) = \frac{\partial G}{\partial x_{Li}}$$



←
Extract Li

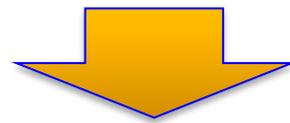


Rechargeable Li and Mg batteries

- Good electrochemical devices for energy storage and conversion
- Clean and renewable source of energy
- However, the large scale commercial use depends on the improvement of:

1) Charging time

2) Amount of power that the battery can supply



Depends on the fast mobility of Li or Mg ion

Important to understand the adsorption and diffusion phenomena of Li and Mg!!

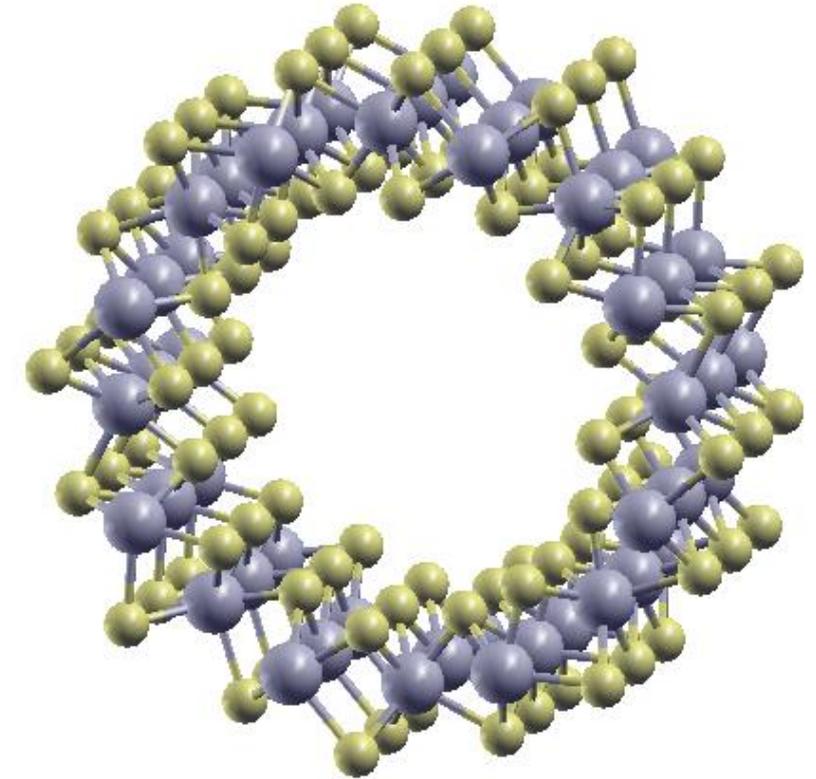


Rechargeable Li and Mg batteries

TMD Nanotubes

Experimental and theoretical data suggests that TiS_2 and MoS_2 nanotubes are good material candidates for Li battery cathodes.

- TiS_2 : $V \sim 1.53$ V; $E_a \sim 180$ meV
- MoS_2 : $V \sim 0.10$ V; $E_a \sim 146$ meV



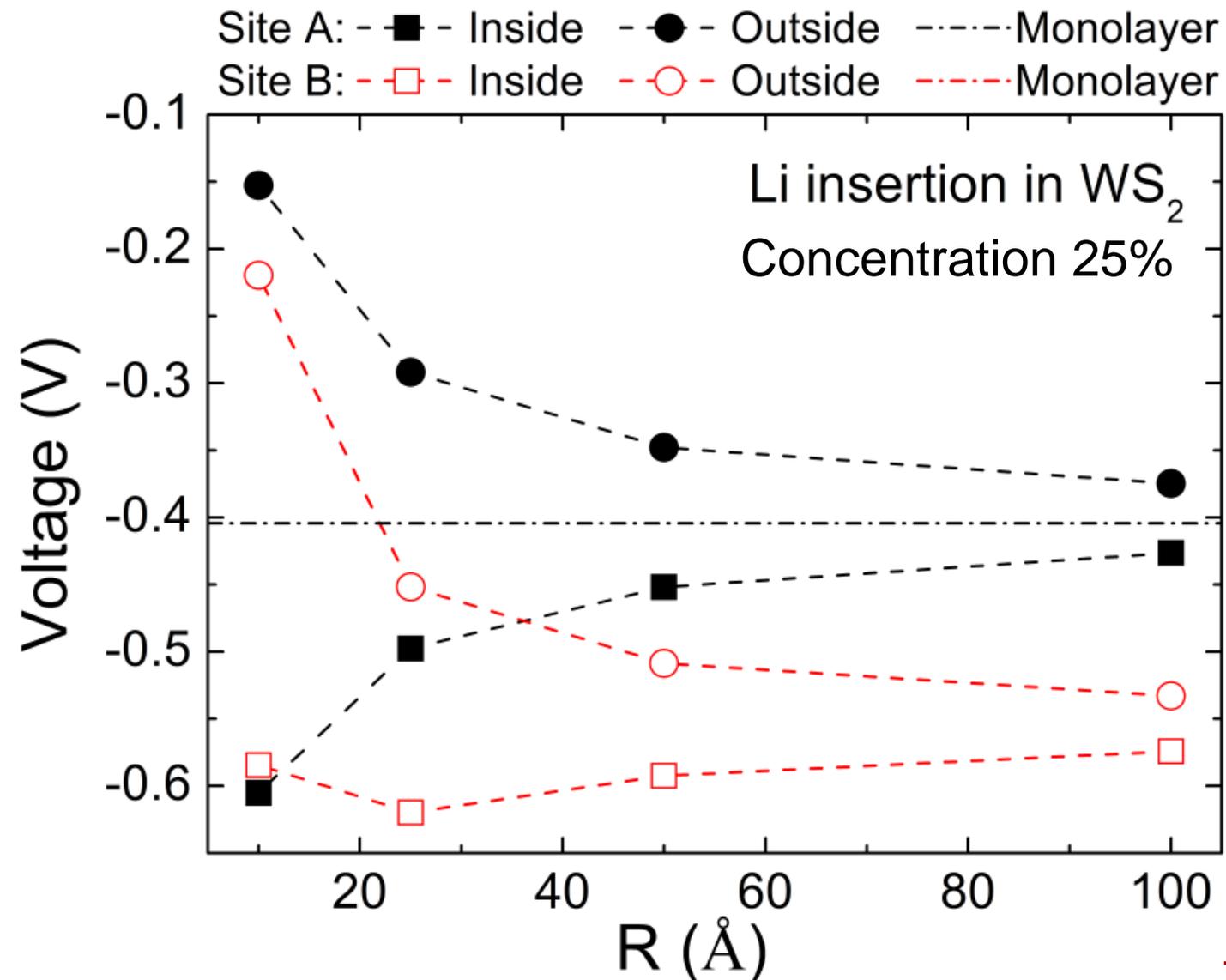
● M = transition metal

● X = S, Se

Explore Li and Mg adsorption
and diffusion in MoS_2 and WS_2
nanotubes

Rechargeable Li and Mg batteries

Li Insertion

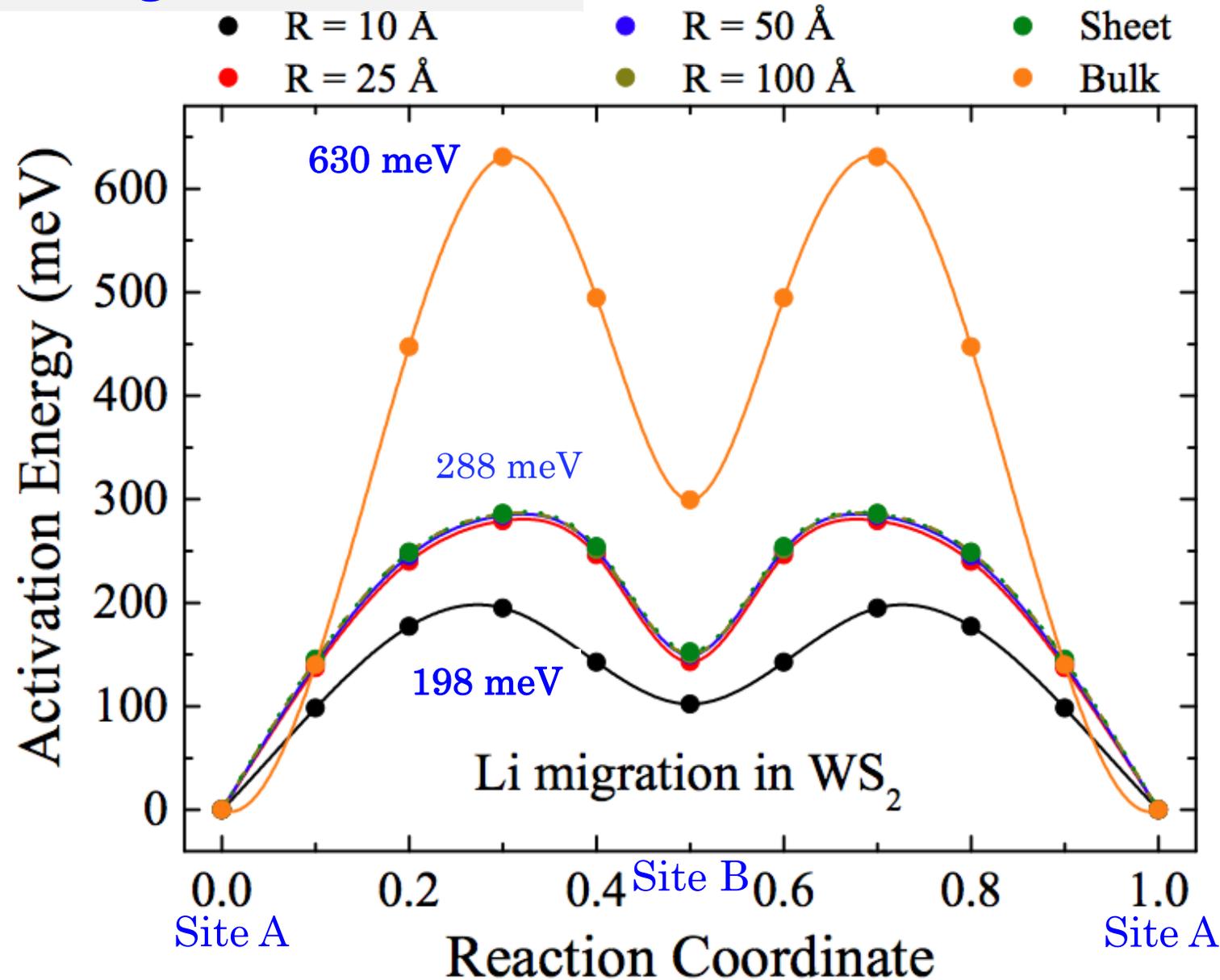


$$V = -\frac{(E_{YMS_2} - E_{MS_2} - E_Y)}{zF}$$

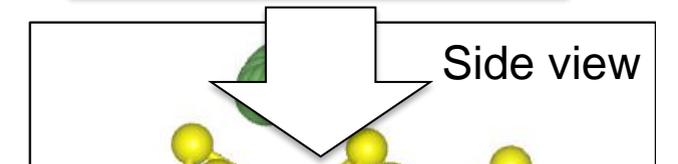
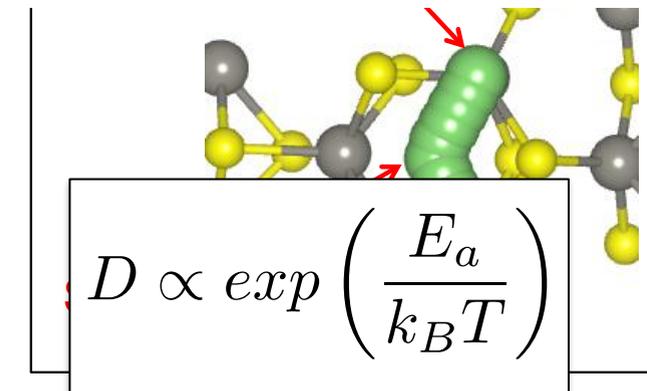
- Outside insertion at site A is more stable
- Voltage decreases as the curvature radius increases

Rechargeable Li and Mg batteries

Li Migration

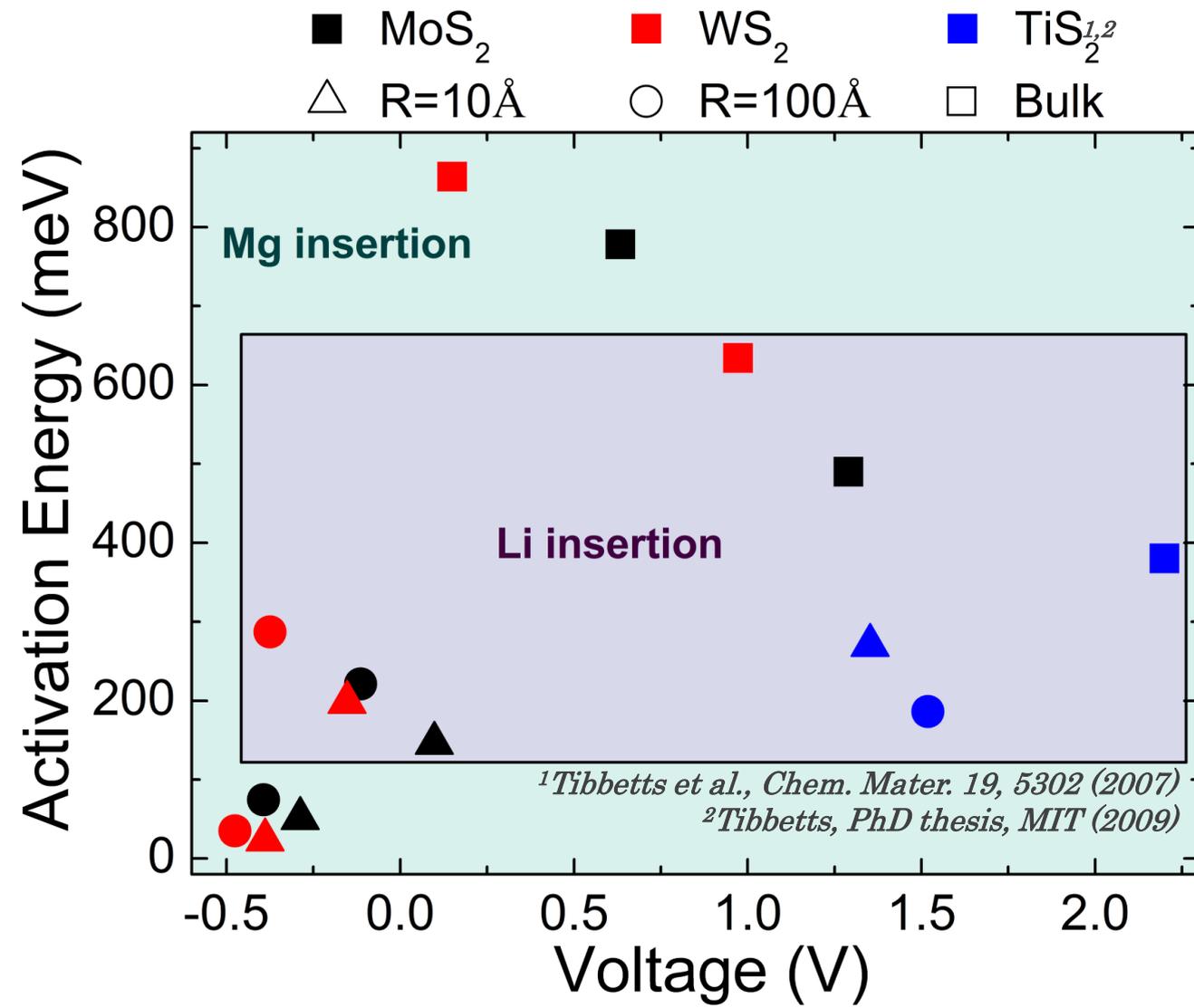


Use of nanotubes can considerably improve the Li mobility in relation to the bulk structure



At room temperature a change of 400 meV will result an improvement in Li mobility by a factor of 10⁶

Rechargeable Li and Mg batteries



- MoS₂: improved Li mobility 4 times faster than in TiS₂
- WS₂: improved Mg mobility 3 times faster than in MoS₂
- Experimentally studies: electrode composed of WS₂ open ended multiwalled nanotubes presents charge/discharge plateaus between 0.6 and 2.0 V

LAB 2 – Descoberta de novos materiais com AM

Etapa 1 - Banco de dados

Propriedade	Property (EN)	Intervalo
Tensão média	Average Voltage	-2, 9 (V)
Capacidade volumétrica	Capacity Vol	32-3200 (Ah/L)
Capacidade gravimétrica	Capacity Grav	6-680 (mAh/g)

Etapa 2 - Variáveis descritivas

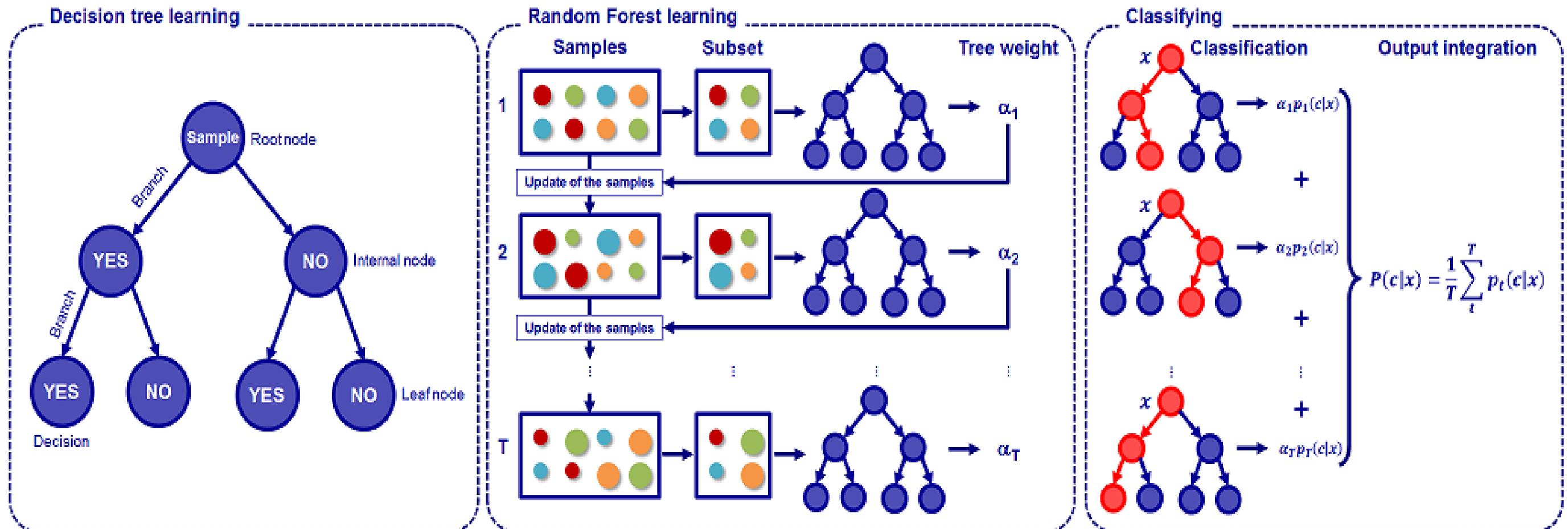
potenciais variáveis-alvo (desempenho)

composição do material (Reduced Formula) e o grupo espacial (Spacegroup),
que a estrutura cristalina do composto.

LAB 2 – Descoberta de novos materiais com AM

Etapa 3 - Modelagem

cálculo simultâneo de árvores de decisão aleatórias, onde a predição é a média sob todas as árvores.



LAB 2 – Descoberta de novos materiais com AM

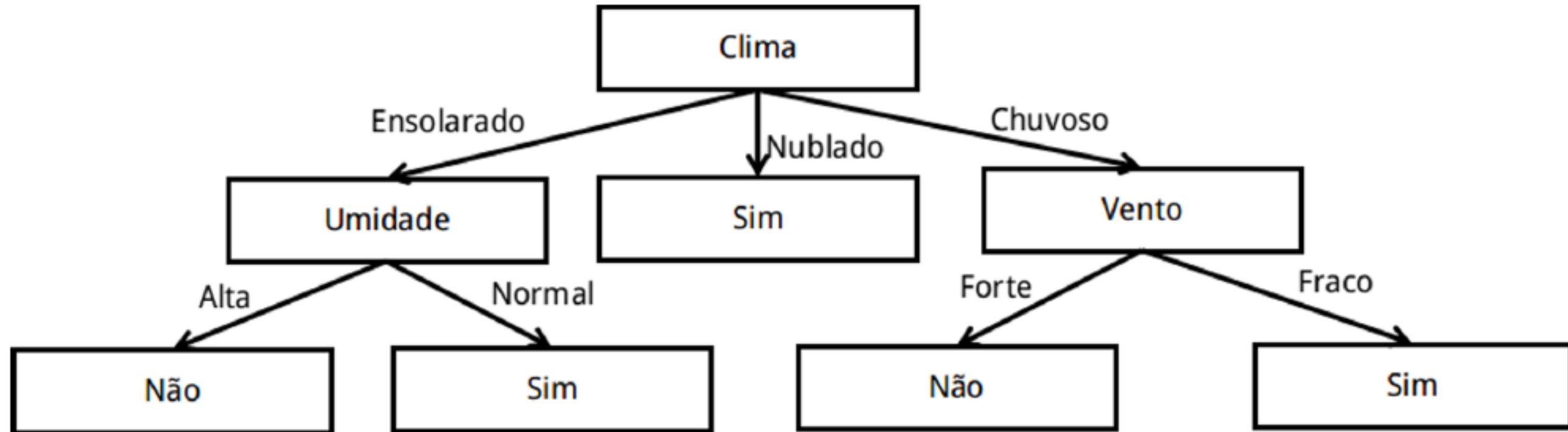
Etapa 3 - Modelagem

Qual a possibilidade de se jogar tênis (Sim ou Não) ?

YURI MENZL CELASCHI

Modelagem de fenômenos interfaciais combinando simulações moleculares e aprendizado de máquina com aplicações em processos de recuperação de petróleo. – UFABC (2019)

Orientador: Prof. Dr. Caetano Rodrigues Miranda



LAB 2 – Descoberta de novos materiais com AM

Etapa 4 - Avaliação

importância relativa de cada *feature* para a floresta final

capacidade preditiva do modelo, na base de treino e de testes.

Propriedade-alvo	Grupo
Capacity Grav	1
Capacity Vol	2
Specific E Wh/kg	3
E Density Wh/l	4
Stability Charge	5
Stability Discharge	6