

# SCM 2020

---

**Prof. Caetano R. Miranda**

IFUSP, São Paulo - Brazil

[cmiranda@if.usp.br](mailto:cmiranda@if.usp.br)

**Camilo A. F. Salvador**

IFUSP, São Paulo - Brazil

[csalvador@usp.br](mailto: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

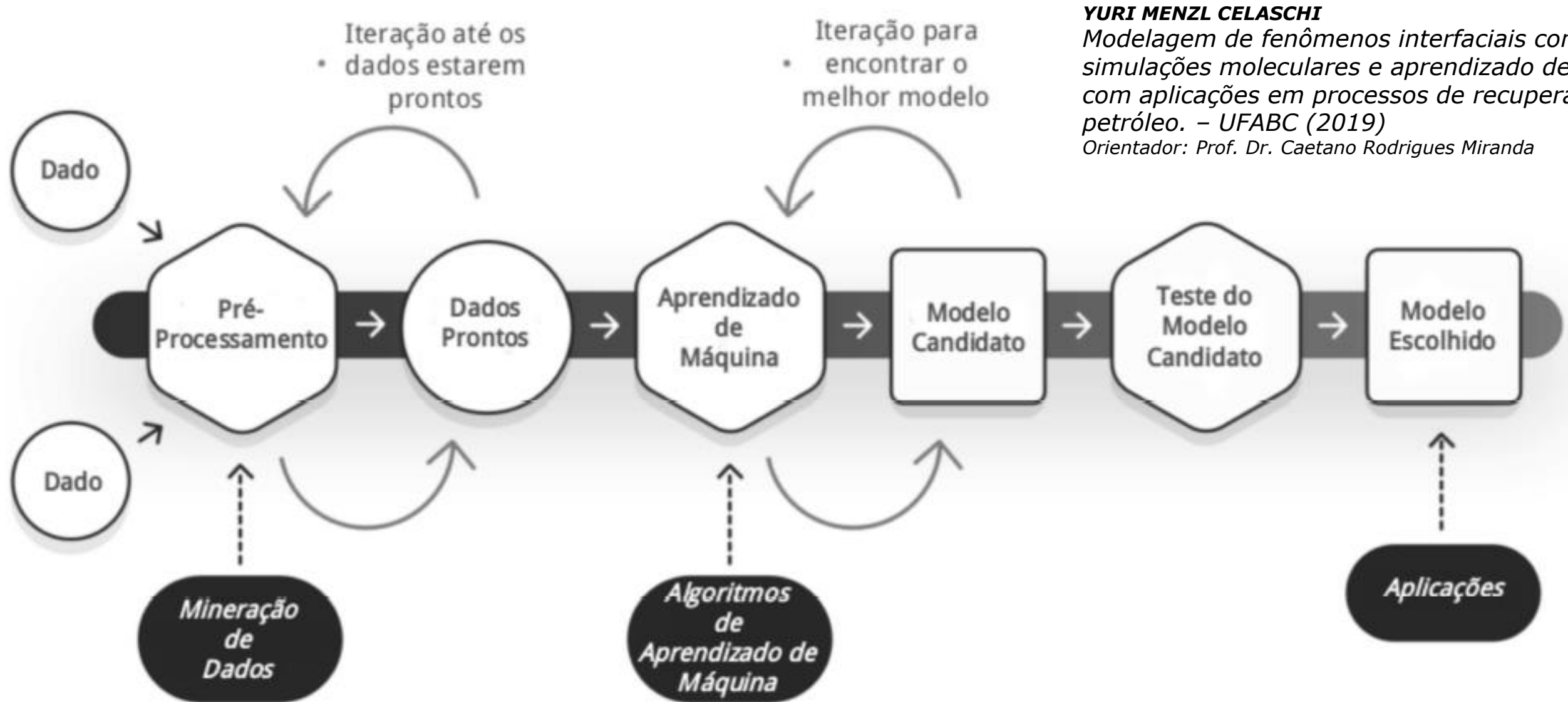
03/12 e 04/12 – Discussão Wikipédia - Discussão Projetos

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)*

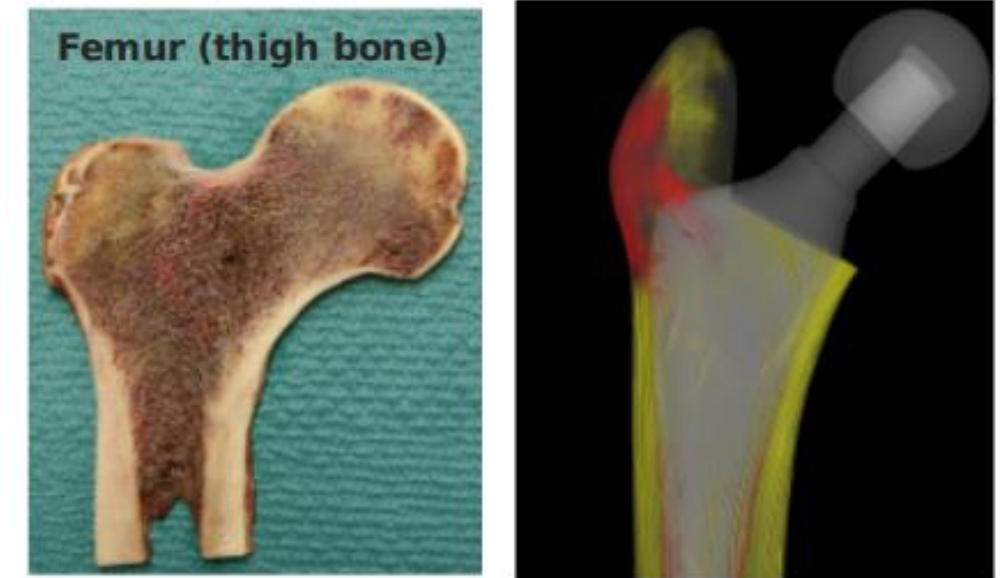
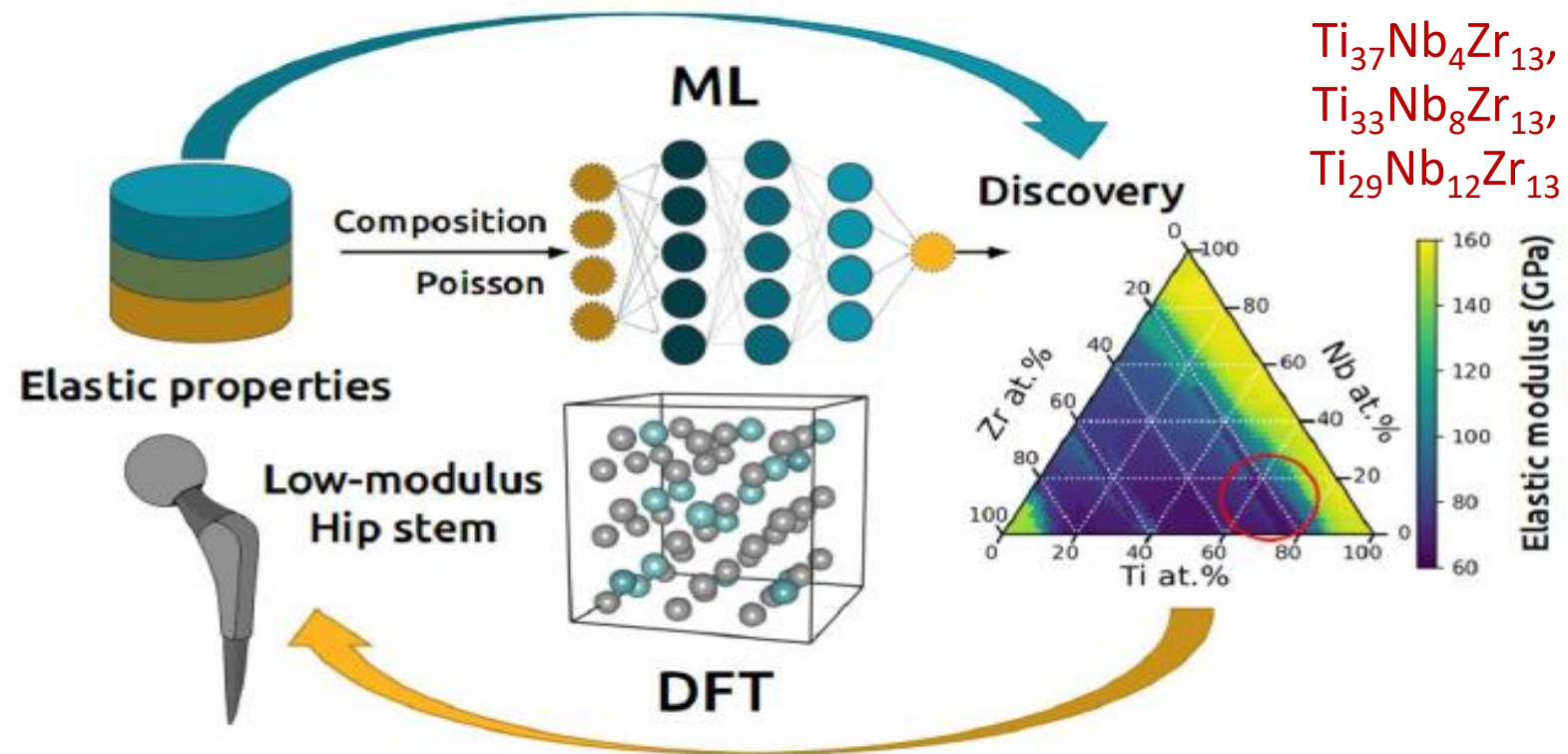
*Orientador: Prof. Dr. Caetano Rodrigues Miranda*

# 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

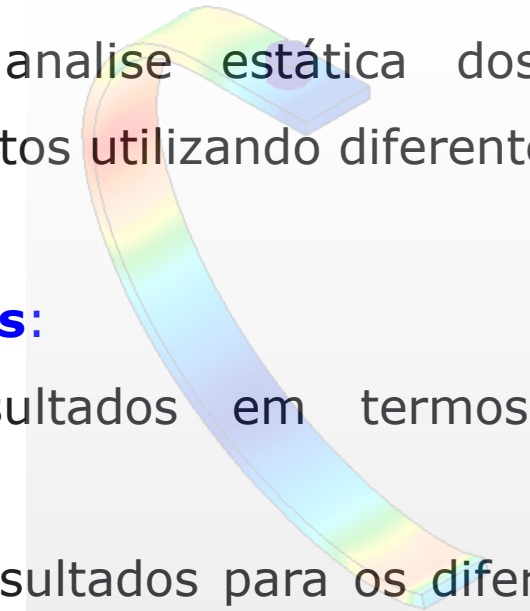
Aplicar o método de elementos finitos (MEF) usando o software Elmer para:

### 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;

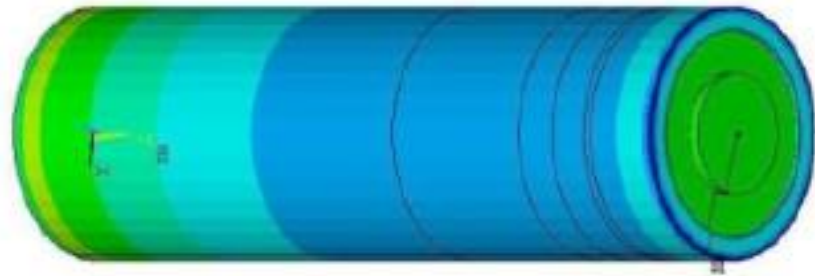


# Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li

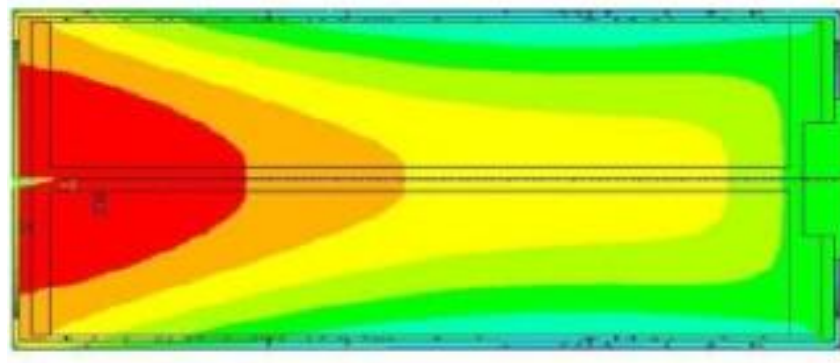
---

## 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*

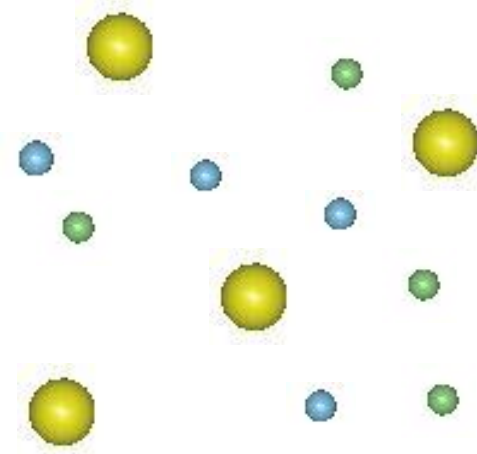
Parâmetros físicos importantes  
Condições iniciais e de contorno  
Metodologia



# Design virtual de materiais

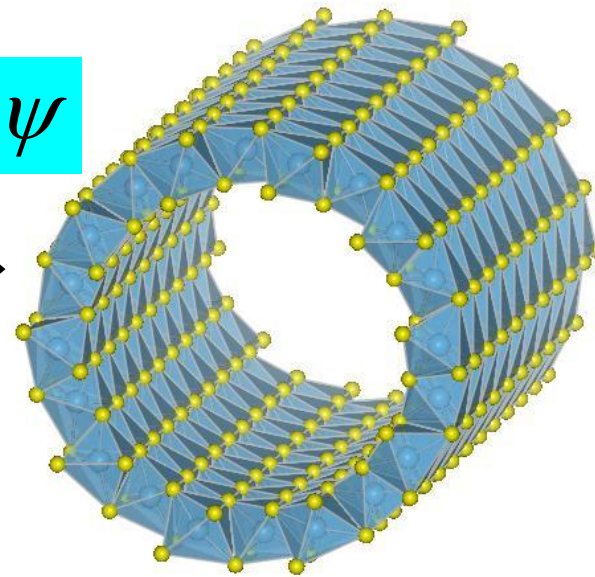
$$\langle \psi | \text{Melhor bateria} | \psi^* \rangle$$

Composição



Estruturas

$$H\psi = E\psi$$

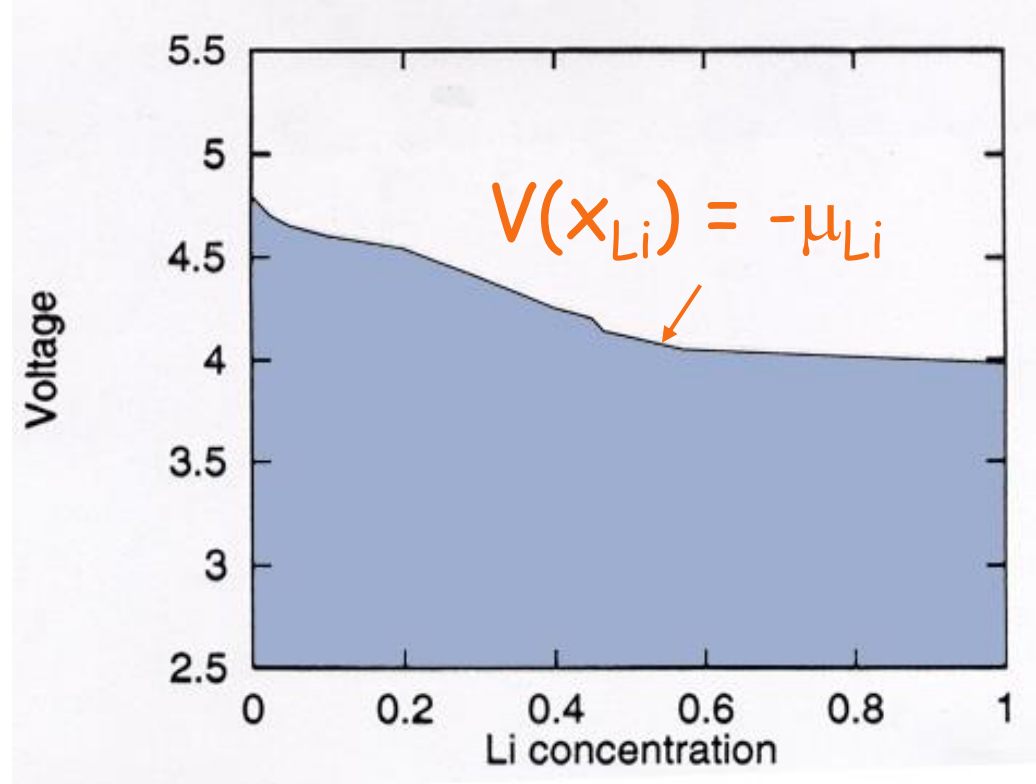


Propriedades

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

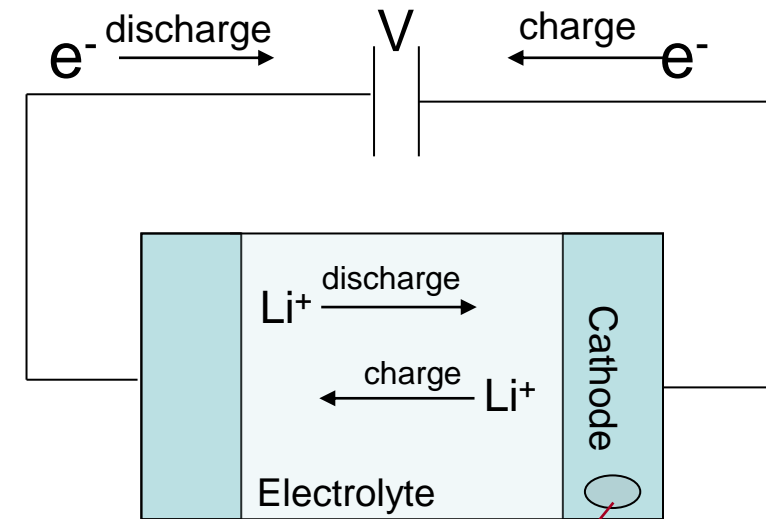


# Voltage é o potencial químico do Li

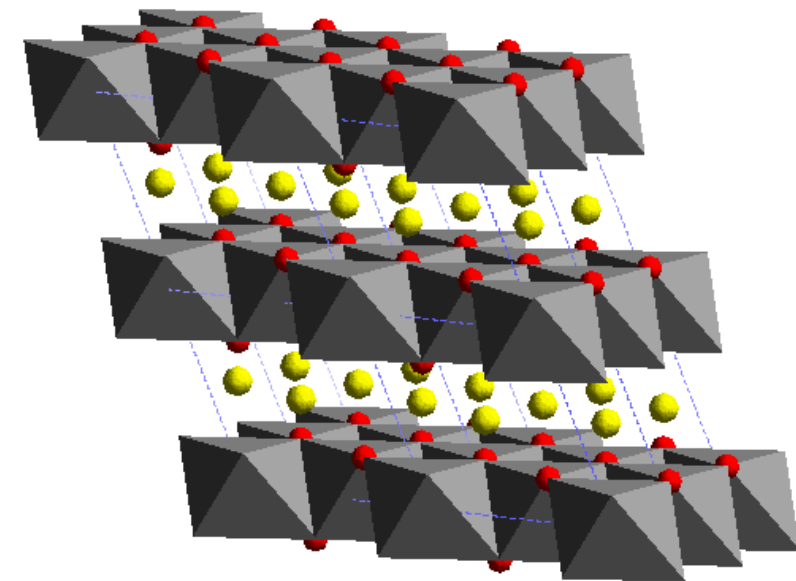


$$V(x) = - \left( \mu_{Li}(x) - \mu_{Li}^{ref} \right)$$

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



←  
Extract Li



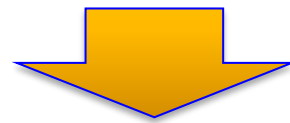
# Rechargeable Li and Mg batteries

---

- 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!!**

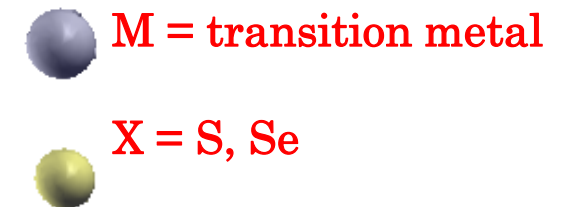
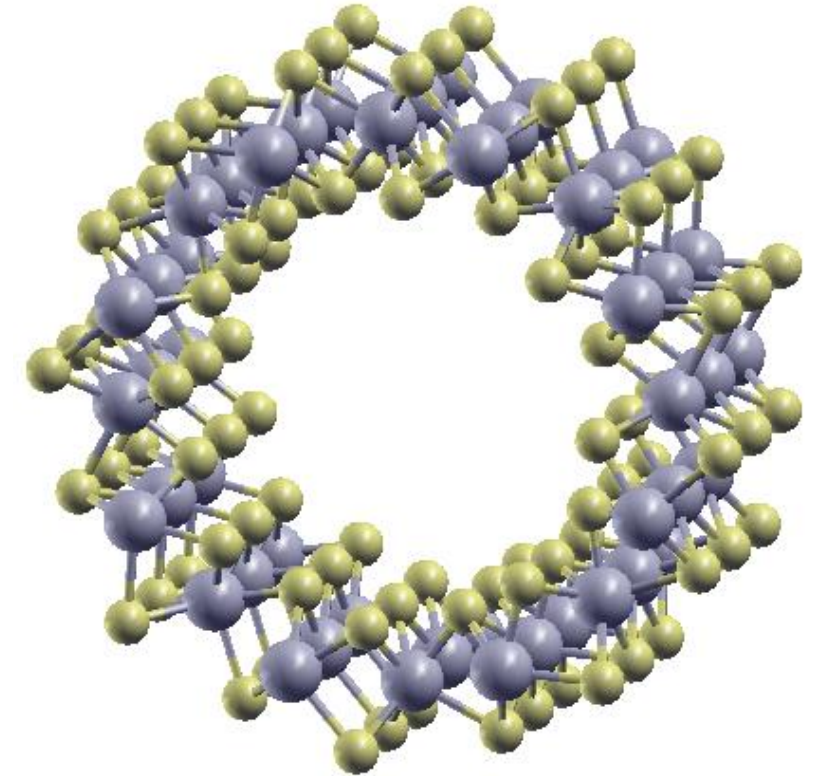


# Rechargeable Li and Mg batteries

## TMD Nanotubes

Experimental and theoretical data suggests that  $\text{TiS}_2$  and  $\text{MoS}_2$  nanotubes are good material candidates for Li battery cathodes.

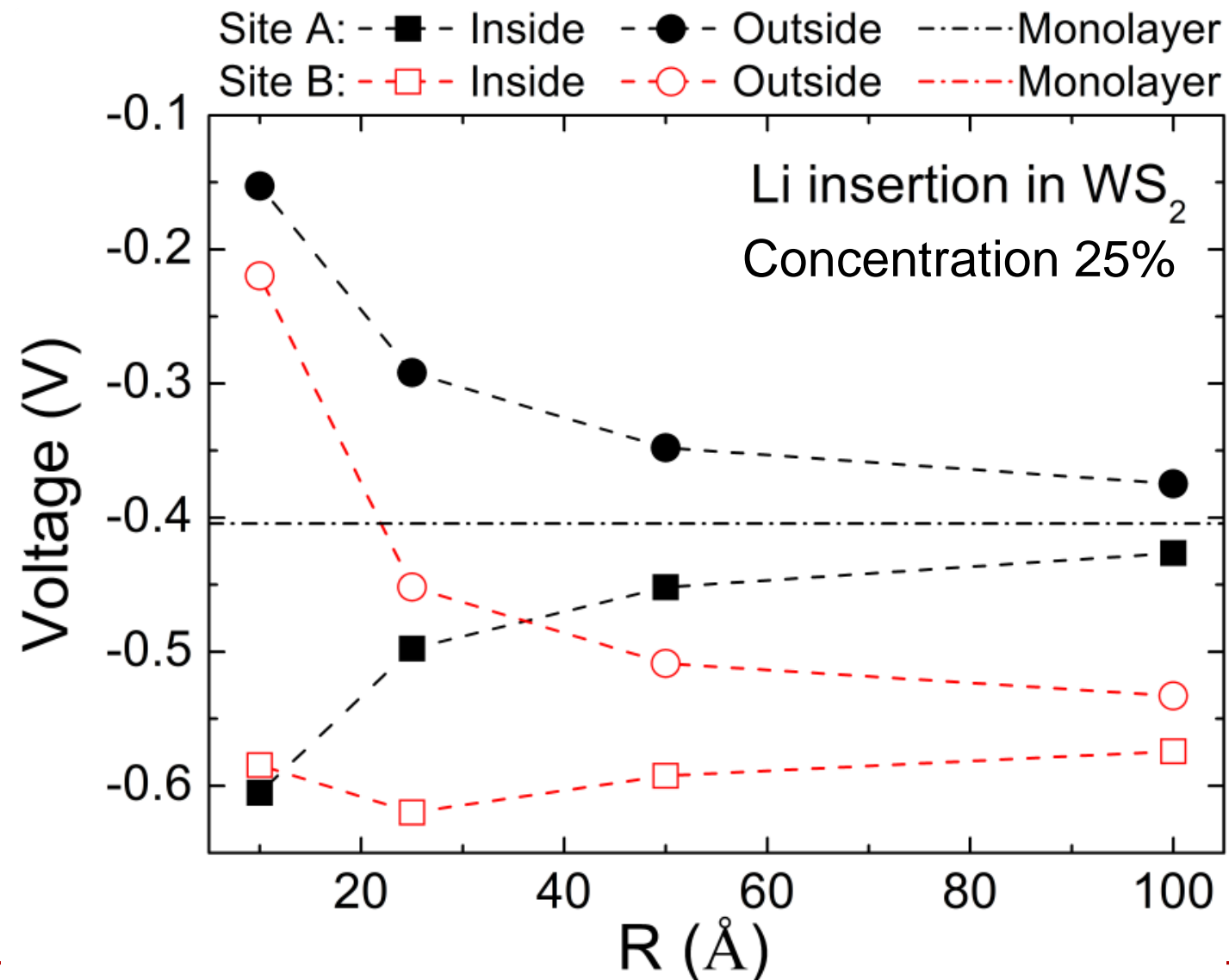
- $\text{TiS}_2$ :  $V \sim 1.53 \text{ V}$ ;  $E_a \sim 180 \text{ meV}$
- $\text{MoS}_2$ :  $V \sim 0.10 \text{ V}$ ;  $E_a \sim 146 \text{ meV}$



Explore Li and Mg adsorption and diffusion in  $\text{MoS}_2$  and  $\text{WS}_2$  nanotubes

# Rechargeable Li and Mg batteries

## Li Insertion

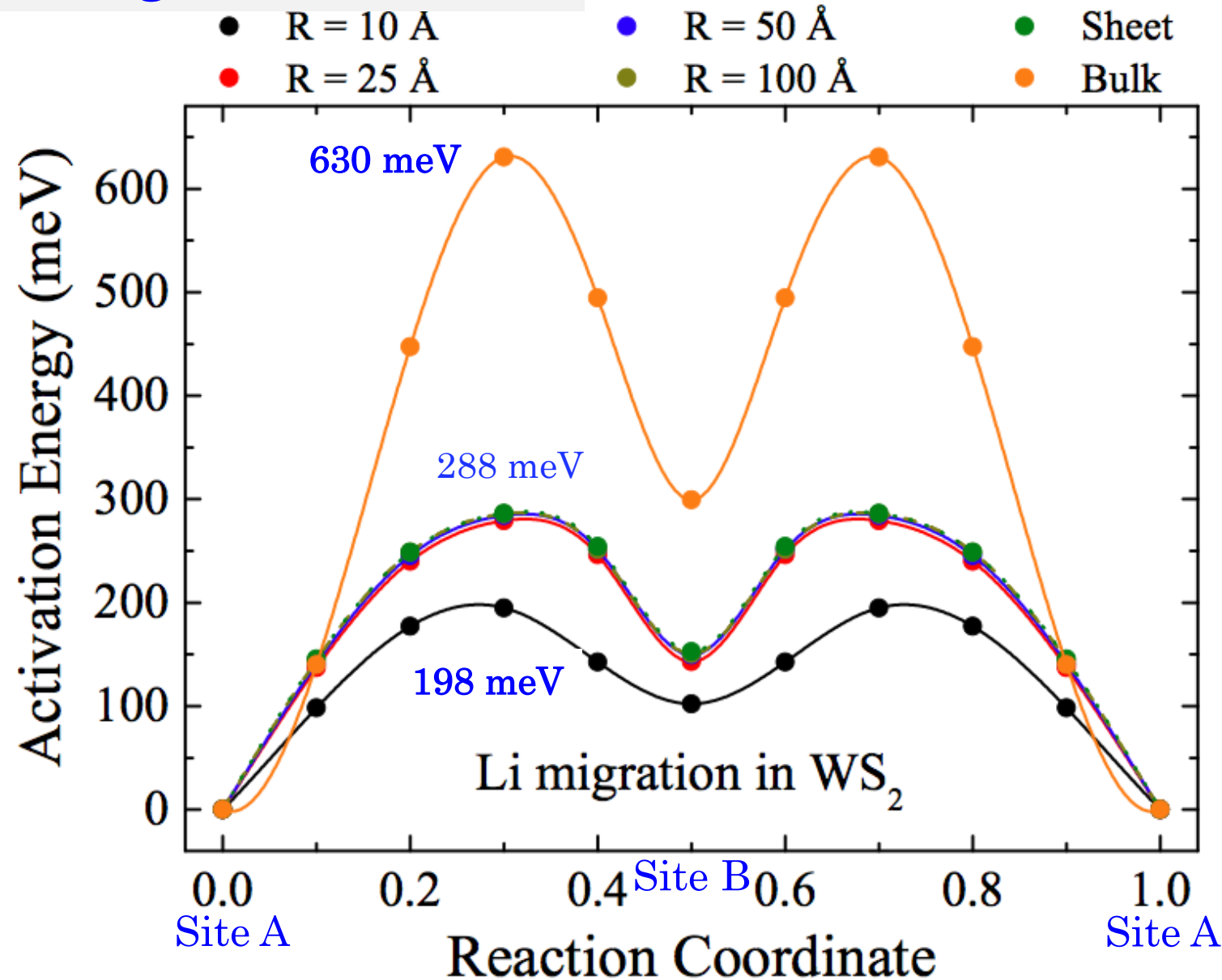


$$V = -\frac{(E_{YMS_2} - E_{MS_2} - E_Y)}{zF}$$

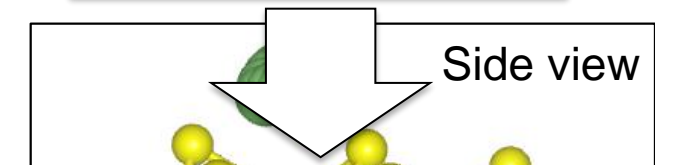
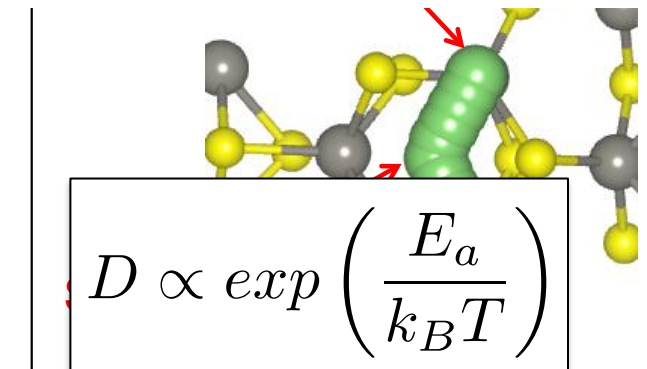
- Outside insertion at site A is more stable
- Voltage decreases as the curvature radius increases

# Rechargeable Li and Mg batteries

## Li Migration

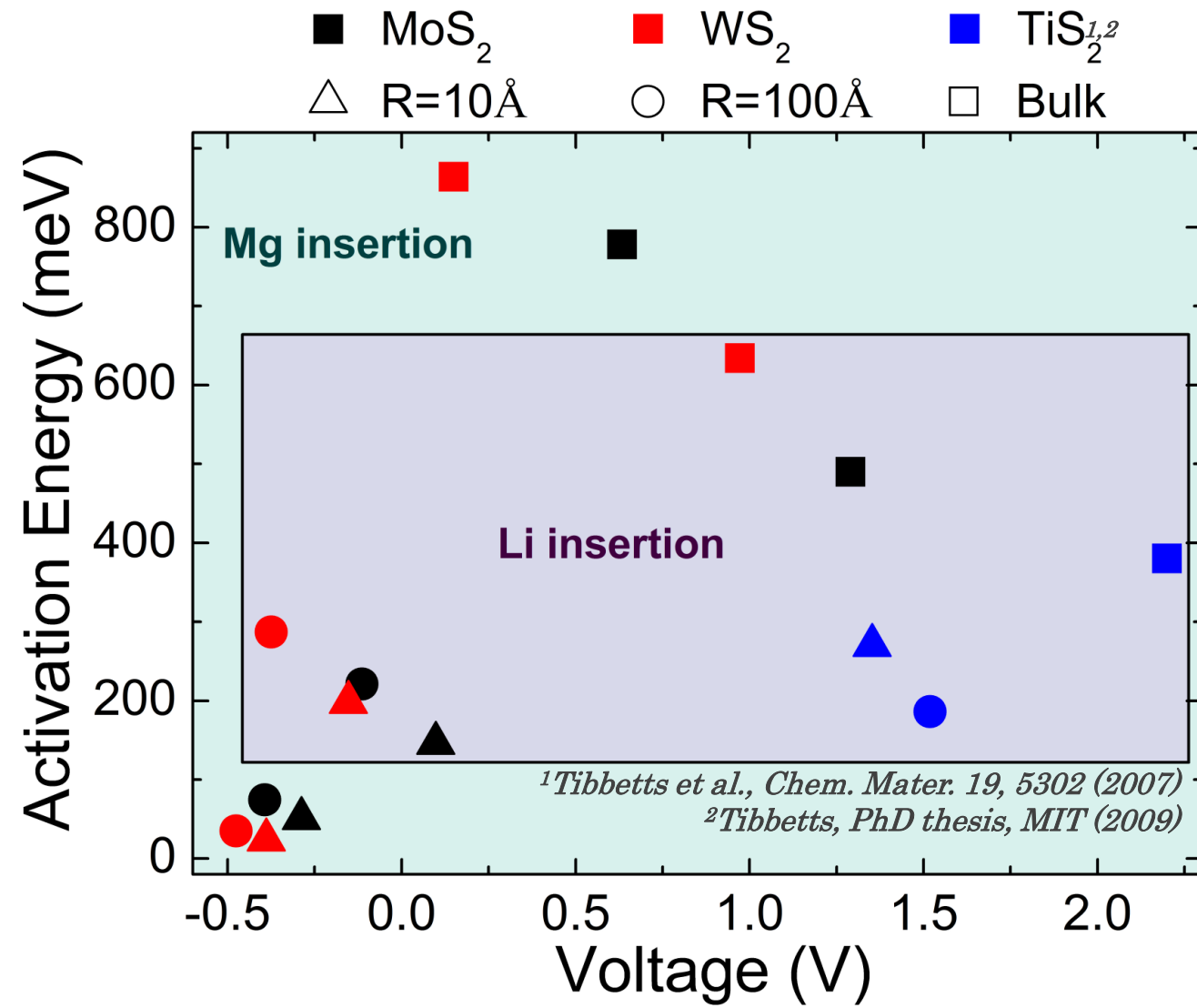


Use of nanotubes can considerably improve the Li mobility in relation to the bulk structure



At room temperature a change of 400 meV will result an improvement in Li mobility by a factor of 10<sup>6</sup>

# Rechargeable Li and Mg batteries



- MoS<sub>2</sub>: improved Li mobility 4 times faster than in TiS<sub>2</sub>
- WS<sub>2</sub>: improved Mg mobility 3 times faster than in MoS<sub>2</sub>
- Experimentally studies: electrode composed of WS<sub>2</sub> 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

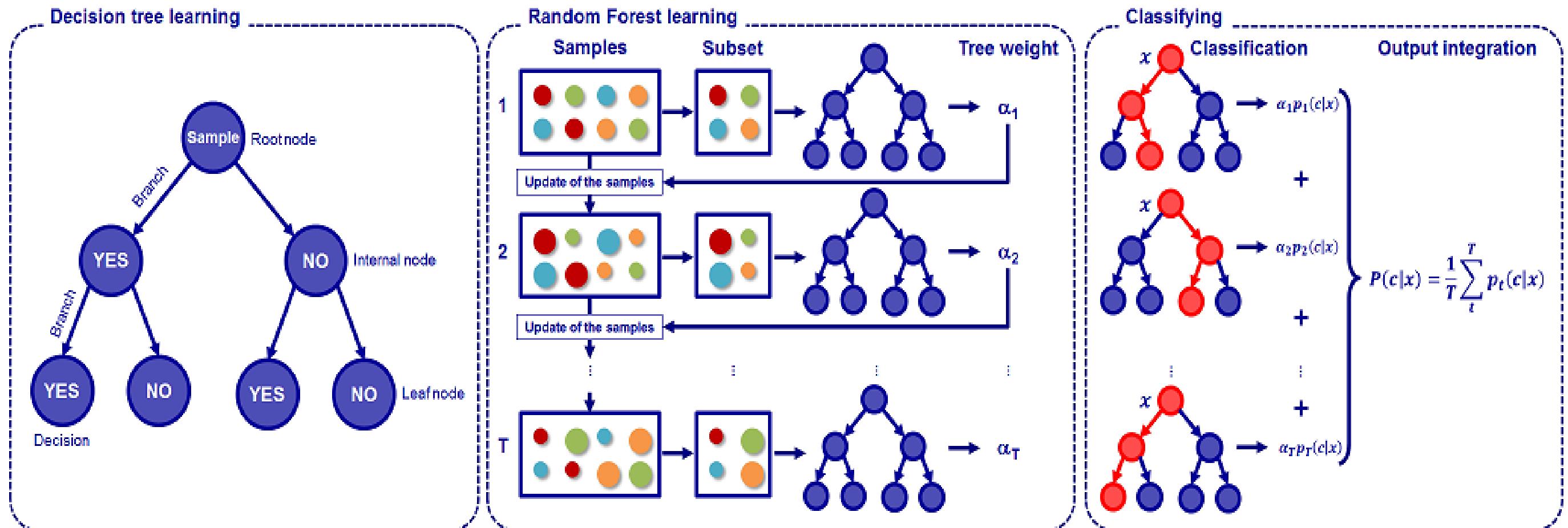
potenciais variáveis-alvo (desempenho )

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

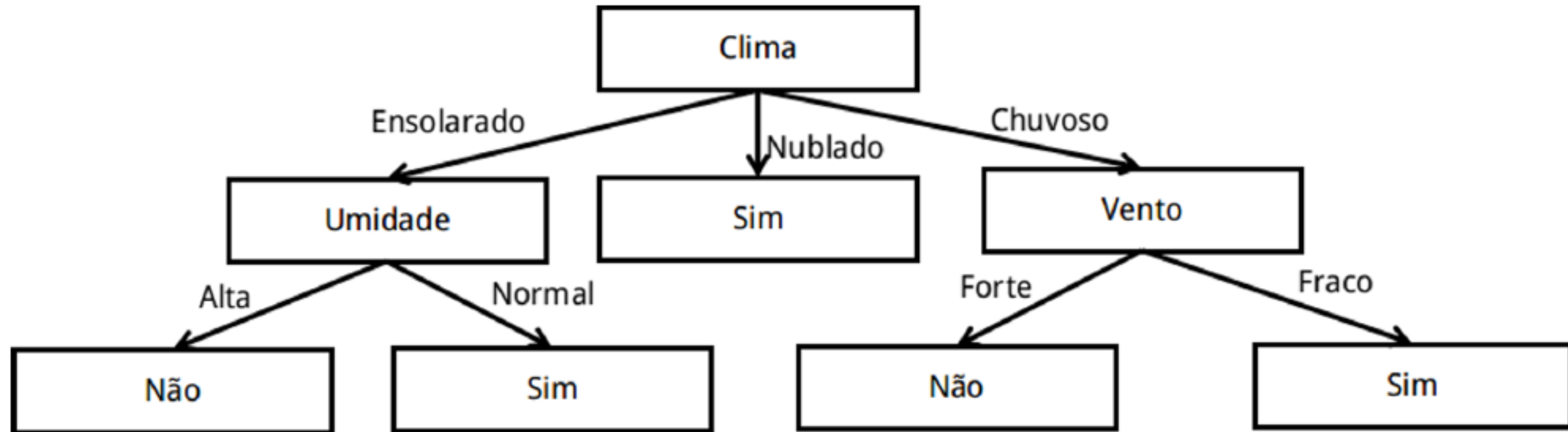
## Etapa 3 - Modelagem

*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