



MceMss08-002

Uso e otimização de métodos de machine learning e simulação molecular na obtenção de propriedades elásticas de vidros com bioatividade.

Lucena, S.(1); De Oliveira, J.A.(1); Pereira, A.(1); Sydriao, V.(1);
(1) UFC;

De uma maneira geral, poucos estudos estão disponíveis na literatura com valores de propriedades mecânicas dos vidros com bioatividade. Propriedades elásticas são importantes numa série de aplicações como peças monolíticas para dentes e ouvido, malhas de fibras de vidro bioativo ou cobertura de próteses metálicas. A medição de propriedades mecânicas em larga escala esbarra na necessidade de uma grande demanda de experimentos de síntese e subsequente teste das formulações. Métodos baseados na mecânica estatística com dinâmica molecular vem sendo aplicados com regularidade no levantamento de propriedades elásticas de outras classes de materiais com grande economia de tempo e custos. No entanto, a demanda por recursos computacionais ainda é muito alta. Aqui, propomos associar os métodos de machine learning para reduzir o esforço computacional e tornar mais acessível ao pesquisador de síntese, o uso destes recursos. Duas classes de vidros bioativos foram examinadas neste estudo, a série clássica de Biovidros® e os formulados com Boro. Cinco diferentes modelos de machine learning com crescentes grau de complexidade foram testados. Testamos o impacto no método de machine learning quanto ao tratamento dos dados como diferentes métodos de otimização (enxame e genético), representação de dados (não escalonado, escalonado e escalonado por polinômio) e o número e espécies de parâmetros de entrada. Com base em dados experimentais, foi possível prever com bom grau de precisão, usando simulação molecular, os valores de módulo de Young da série de Biovidros® e da série formulada com Boro. Dentre os modelos de machine learning testados o Random Forest e Redes Neurais Artificiais apresentaram os melhores resultados. A influência de cada um dos elementos testados, inerentes ao método de machine learning, são discutidos com detalhes.