

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS**

**ESTUDO DO ALGORITMO DE CLUSTERIZAÇÃO**  
**K-MEANS NO PROCESSO DE SELEÇÃO DE**  
**MATERIAIS**

**GUILHERME DE OLIVEIRA ORTIZ**

**SÃO CARLOS -SP**  
**2023**

# **ESTUDO DO ALGORITMO DE CLUSTERIZAÇÃO K-MEANS NO PROCESSO DE SELEÇÃO DE MATERIAIS**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Lucas Henrique Staffa

São Carlos-SP

2023

## **DEDICATÓRIA**

Dedico este trabalho a Tarciana dos Santos Pinheiro, que me incentivou a crescer como estudante e como pessoa.

## AGRADECIMENTO

Agradeço a cada pessoa que de alguma forma contribuiu para a conclusão deste trabalho.

Primeiramente à minha companheira Tarciana dos Santos Pinheiro, o qual me serve de inspiração para ser uma pessoa melhor dia após dia.

Aos meus pais, Paulo Henrique Ortiz e Vanise Aparecida de Oliveira Ortiz que sempre incentivaram eu e minhas irmãs a buscar uma vida melhor através do estudo.

Ao meu orientador Lucas Henrique Staffa, que teve a maior paciência do mundo para revisar os conceitos da disciplina Seleção de Materiais e me guiar quando estava totalmente no escuro.

A Pablo de Azevedo Santos e Kymie Karina Silva Saito, que em nossas conversas, pude obter e compartilhar conhecimentos sobre *Machine Learning*.

A Jéssica Silva de Paula e Samuel Redekop que me aturavam todos os dias falando sobre os avanços que tive neste trabalho.

A todos os integrantes e ex-integrantes da moradia estudantil da UFSCar, em especial do Apartamento 59, o qual guardo boas lembranças.

E por último, porém mais importante, aos programas de Assistência e Permanência Estudantil fornecidos pela UFSCar, o qual me proporcionaram moradia e alimentação em um dos momentos mais críticos da minha vida. Sem tais programas eu não chegaria aonde estou.

*“Se eu vi mais longe, foi por estar sobre ombros de gigantes”*

***Isaac Newton***

## RESUMO

O uso de algoritmos de *Machine Learning* tem se tornado comum no cotidiano, levando a realizar experimentos em diversas áreas da Engenharia de Materiais. Este trabalho tem como objetivo complementar a metodologia de Ashby com a técnica de *machine learning* de clusterização *K-means*, através da aplicação de um algoritmo no processo de seleção de materiais para uma chave de fenda. Para isso, foram realizados dois processos de seleção no qual o primeiro consistia em utilizar integralmente a metodologia de Ashby. Já no segundo, foram utilizados os materiais resultantes da etapa de triagem do primeiro processo e aplicado o algoritmo de clusterização *K-means* diversas vezes a fim de se reduzir o número de materiais. Após isto, foram realizadas comparações entre os dois resultados obtidos em cada processo, possibilitando observar as vantagens e desvantagens presentes na utilização do *K-means*. Foram obtidos quatro materiais idênticos em ambas as abordagens. A principal vantagem observada consiste na possibilidade de trabalhar com um grande número de variáveis com o *K-means*, enquanto que na metodologia de Ashby só é possível utilizar dois materiais por mapa de propriedade. Já a principal desvantagem consiste na queda da capacidade do algoritmo diferenciar os materiais após cada execução, devido à similaridade entre os mesmos.

**Palavras-chave:** *Machine Learning*. *K-means*. Ashby. Seleção de Materiais. Engenharia de materiais.

## **ABSTRACT**

The use of machine learning algorithms has become common in everyday life, bringing to realize experiments in several fields of material engineering. This study complements the Ashby methodology with the clustering machine learning technic K-means, by the application of an algorithm in the material selection process for a screwdriver. For that, two materials processes were performed, where the firsts consisted in use integrally the Ashby's methodologies. In the second one, materials resulting from the screening step of first process were used and applied the clustering algorithm K-means several times in order to reduce the number of materials. After that, comparisons are made with the two obtained results by each process, making it possible to observe the advantages and disadvantages present in the use of K-means. Four identical materials were obtained in both results. The main advantage observed is the possibility of working with a large number of variables with K-means, whereas in Ashby's methodology it is only possible to use two materials per property map. The main disadvantage is the loss of the algorithm's capacity to differentiate the materials after each run, due to the similarity between them.

**Keyword:** Machine Learning. K-means. Ashby. Materials selection. Materials engineering.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 Fluxograma de um projeto (ASHBY, 2004) .....	7
Figura 2 Análise de um sistema técnico como uma subdivisão de subunidades e componentes (ASHBY, 2004) .....	8
Figura 3 Diagrama que relaciona os insumos e saída de um sistema técnico(ASHBY, 2004) .....	8
Figura 4 Relação entre Função, Material, Forma e Processo (ASHBY, 2004)	9
Figura 5 Exemplo de obtenção de índice de mérito (ASHBY, 2004) .....	10
Figura 6 Diagrama módulo de elasticidade por densidade (ASHBY, 2004) ..	11
Figura 7 Diagrama módulo de elasticidade por densidade(ASHBY, 2004) ...	12
Figura 8 A estratégia de seleção de materiais do Método de Ashby (ASHBY, 2004) .....	13
Figura 9 Diagrama Módulo de Elasticidade por Densidade(ASHBY, 2004) ..	15
Figura 10 Diagrama Módulo de Elasticidade por Densidade com aplicação de diferentes índices de mérito (ASHBY, 2004) .....	16
Figura 11 Diagrama esquemático Módulo de Elasticidade por Densidade, destacando uma grade de linhas paralelas (ASHBY, 2004) .....	16
Figura 12 Funcionamento de um algoritmo de aprendizado supervisionado (Adaptado para o português de MAHESH, 2020) .....	18
Figura 13 Funcionamento de um algoritmo de aprendizado não supervisionado(ALMEIDA et al., [S.d.]) .....	18
Figura 14 Exemplo do resultado final de um algoritmo de Clusterização (“Clustering in Machine Learning - GeeksforGeeks”, 2023) .....	20
Figura 15 Fluxo de execução do algoritmo K-means (adaptado de SAXENA et al., 2017) .....	21
Figura 16 Exemplo de um Gráfico de Voronoi resultante de um conjunto de dados que foi aplicado o algoritmo K-means(“k-means clustering and Voronoi sets   Freakonometrics”, 2015) .....	21
Figura 17 Exemplificação de distância intercluster e intracluster(YEOMANS e XU, 2020) .....	22
Figura 18 Modelo de uma chave de fenda (“Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio 3x50 mm (1/8x2”) Tramontina PRO   Tramontina”, [S.d.].....	25
Figura 19 Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio 3x50 mm (1/8x2”) Tramontina PRO(“Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio	

3x50 mm (1/8x2") Tramontina PRO   Tramontina", [S.d.].....	26
Figura 20 Diagrama módulo de elasticidade por densidade .....	33
Figura 21 Diagrama limite de resistência à tração por densidade .....	34
Figura 22 Materiais resultantes após a etapa de triagem .....	34
Figura 23 Aplicação do primeiro índice de mérito no mapa de propriedades	
Limite de resistência à tração por Densidade .....	35
Figura 24 Aplicação do segundo índice de mérito no mapa de propriedades	
Módulo de elasticidade por Densidade .....	35

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Índices de mérito (adaptado de ASHBY, 2004) .....	10
Tabela 2 Etapas do processo de Tradução (ASHBY, 2004).....	14
Tabela 3 Propriedades mecânicas do aço cromo vanádio (“ASTM A231 Chromium-Vanadium Spring Steel:: MakeltFrom.com”, [S.d.] .....	26
Tabela 4 Requisitos e propriedades equivalentes de uma chave de fenda (DURYAT, 2020) .....	27
Tabela 5 Relação propriedades e objetivos utilizados.....	28
Tabela 6 : Propriedades e objetivos selecionados.....	31
Tabela 7 Propriedades dos materiais resultantes da etapa de classificação. 36	
Tabela 8 Classificação dos materiais resultantes segundos os índices de mérito .....	37
Tabela 9 Valores resultantes em cada execução do algoritmo .....	38
Tabela 10 Valor do Silhouette Score referente a quantidade de clusters para a primeira execução do algoritmo .....	38
Tabela 11 Média das propriedades dos materiais de cada cluster .....	39
Tabela 12 Valor do Silhouette Score referente a quantidade de clusters para a segunda execução do algoritmo .....	40
Tabela 13 Média das propriedades dos materiais de cada Cluster .....	40
Tabela 14 Valor do Silhouette Score referente a quantidade de clusters para a segunda execução do algoritmo .....	42
Tabela 15 Média das propriedades dos materiais de cada Cluster .....	42
Tabela 16 Materiais selecionados através do uso do K-means.....	43
Tabela 17 Materiais resultantes da seleção através do uso do algoritmo K-means e do Método de Ashby.....	44
Tabela 18 Valor médio das propriedades selecionadas dos materiais resultantes após a etapa de triagem .....	51
Tabela 19 Valor obtido dos índices de mérito para cada material .....	55
Tabela 20 Propriedades dos materiais obtidos após a etapa de triagem do método de Ashby .....	56
Tabela 21 Resultados obtidos durante a primeira execução do algoritmo ....	60
Tabela 22 Resultados obtidos durante a segunda execução do algoritmo....	66
Tabela 23 Resultados obtidos durante a terceira execução do algoritmo .....	70

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. OBJETIVO.....	4
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	7
3.1.    MÉTODO DE ASHBY .....	7
3.1.1. Projeto e sistema técnico .....	7
3.1.2. Tipos de Projeto .....	9
3.1.3. Função, Material, Forma e Processo .....	9
3.1.4. Método de Seleção Ashby.....	9
3.1.5. Mapa de Propriedades .....	11
3.1.6. Etapas de um projeto de seleção de materiais.....	12
3.2.    MACHINE LEARNING .....	17
3.2.1. Aprendizado supervisionado .....	17
3.2.2. Aprendizado não supervisionado .....	18
3.3.    CLUSTERIZAÇÃO.....	19
3.3.1. K-means.....	20
3.3.2. Definindo o valor de k.....	22
3.3.3. Exemplos de uso.....	23
4. MATERIAIS E MÉTODOS.....	25
4.1.    CHAVE DE FENDA.....	25
4.2.    UTILIZANDO O MÉTODO DE ASHBY .....	27
4.3.    REALIZANDO O TREINAMENTO DO DATASET DE PROPRIEDADES COM O K-MEANS.....	29
5. RESULTADOS .....	33
5.1.    MÉTODO DE ASHBY .....	33
5.1.1. Tradução e triagem .....	33
5.1.2. Classificação .....	34
5.1.3. Documentação .....	36

5.2.	K-MEANS.....	37
5.2.1.	Primeira execução.....	38
5.2.2.	Segunda execução.....	40
5.2.3.	Terceira execução.....	42
5.2.4.	Escolhendo os melhores materiais.....	43
5.3.	COMPARANDO OS RESULTADOS OBTIDOS .....	43
5.3.1.	Materiais em comum .....	43
5.3.2.	Vantagens K-Means.....	45
5.3.3.	Desvantagens .....	46
6.	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	47
	REFERÊNCIAS.....	49
	APÊNDICE A – TABELAS RESULTANTES DO MÉTODO DE ASHBY .....	51
	APÊNDICE B – TABELAS UTILIZADAS COM K-MEANS .....	56

## 1. INTRODUÇÃO

Devido à ampla quantidade de materiais disponíveis no mercado e o avanço no desenvolvimento de novos materiais, tem-se a necessidade da utilização de novos métodos e tecnologias no processo de seleção de materiais. Ashby diz que a seleção de materiais para uma determinada aplicação envolve a busca do melhor entendimento entre os requisitos de projeto e as propriedades de materiais que poderiam ser utilizados para elaborar o projeto (ASHBY, 2004).

O método pioneiro em sistematizar a seleção de materiais foi definido por Ashby em 1992. Tal método consiste em realizar 4 etapas primordiais: tradução, triagem, classificação e documentação (ASHBY, 2004).

No entanto é visto na literatura algumas dificuldades em implementar a metodologia de Ashby devido a algumas limitações inerentes do método. Brechet discute sobre quatro limitações: (i) a dificuldade de ser preciso e objetivo para a definição dos requisitos da aplicação; (ii) a dificuldade de se obter informações detalhadas; (iii) a relação entre seleção de materiais e processos é muito forte, tornando-se difícil descrever de maneira simples; e por último, (iv) os casos de estruturas que são compostos por mais de um material (BRECHET e colab., 2001).

Outra dificuldade do método de Ashby consiste na utilização de múltiplas restrições e objetivos conflitantes, sendo necessário o uso de funções de penalidade, o que torna o trabalho de seleção mais complexo.

Neste contexto, algumas estratégias surgiram para complementar a seleção de materiais, sendo baseadas em Métodos de Apoio à Decisão Multicritério (*Multi-criteria decision making*) ou por nível de entropia, podendo citar *TOPSIS*, *VIKOR* e *AHP* (DAY et al., 2012) (ÇALIŞKAN et al., 2013).

A tecnologia de *Machine Learning*, também conhecida como aprendizado de máquina, é amplamente utilizada diariamente para diferentes propósitos, que vão desde detectores de *spam* até a segmentação de clientes por meio de algoritmos, auxiliando a tomadas de decisões importantes.

Na área de materiais, assim como outras áreas, a tecnologia de *Machine Learning* tem sido amplamente explorada. Jing Wei e colaboradores descreveram em seu artigo diversos algoritmos de *machine learning* e seus usos no campo da ciência

de materiais (WEI et al., 2019), nos quais destacam-se:

- Mineração de dados, a fim de encontrar materiais relevantes e enriquecer banco de dados que contém informações sobre materiais.
- Análise de propriedades de materiais, podendo-se analisar desde a degradação de um trilho de trem, até predizer estruturas e propriedades de moléculas.
- Descobrimto de novos materiais através de *designs* orientados tanto pela estrutura quanto pela composição.
- Resolução de problemas complexos de química quântica.

Apesar de haver uso em atividades complexas, é escassa a bibliografia disponível que relata o uso de algoritmos de *machine learning* para casos de seleção de materiais.

Entre os principais algoritmos de *machine learning*, destaca-se o *k-means* um algoritmo utilizado para realizar o processo de clusterização de um conjunto de dados. Este processo consiste em dividir um conjunto de dados em vários subconjuntos, também chamado de *clusters*.

Neste contexto, a fim de complementar metodologias consagradas como a metodologia de Ashby, este trabalho tem como objetivo verificar possibilidade de aplicação do algoritmo de *machine learning k-means* em conjunto ao método de Ashby para auxiliar na seleção dos materiais mais apropriados para uma chave de fenda.



## 2. OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é complementar a metodologia de Ashby com técnicas de *machine learning* a fim de verificar a possibilidade de aplicação do algoritmo de *k-means* no processo de seleção de materiais para uma chave de fenda. Desta maneira, a metodologia utilizada neste trabalho consiste em aplicar um algoritmo baseado em *k-means* na etapa de classificação do método de Ashby.

Para isso, algumas metas são necessárias:

- i. O primeiro passo consiste em aplicar o método de Ashby aplicando as quatro etapas do método e chegando a uma lista reduzida de materiais candidatos para tal aplicação;
- ii. Utilizando a lista de materiais candidatos gerada na etapa de triagem do método de Ashby, o qual cumprem os requisitos mínimos para a aplicação desejada, realizar o treinamento do algoritmo *k-means* para segregarmos os materiais em diferentes *clusters*. Analisando os materiais presentes em cada *cluster*, seleciona-se o *cluster* que contenha os materiais mais adequados para a aplicação desejada e, em seguida, realizar o treinamento utilizando apenas os dados do *cluster* selecionado, repetindo o processo várias vezes até chegar a um número reduzido de materiais e, se necessário, aplicar mais restrições.
- iii. Por fim, deve-se comparar os resultados obtidos pelos dois métodos, destacando as possíveis vantagens e/ou desvantagens do *k-means* no processo de seleção de materiais.





### 3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1. MÉTODO DE ASHBY

##### 3.1.1. Projeto e sistema técnico

Para Ashby, um projeto é uma necessidade de mercado ou uma nova ideia, tendo como ponto final obter a especificação completa de um produto que atende uma necessidade. Na **Figura 1**, são mostradas as etapas entre a declaração da necessidade e as especificações de um determinado produto.

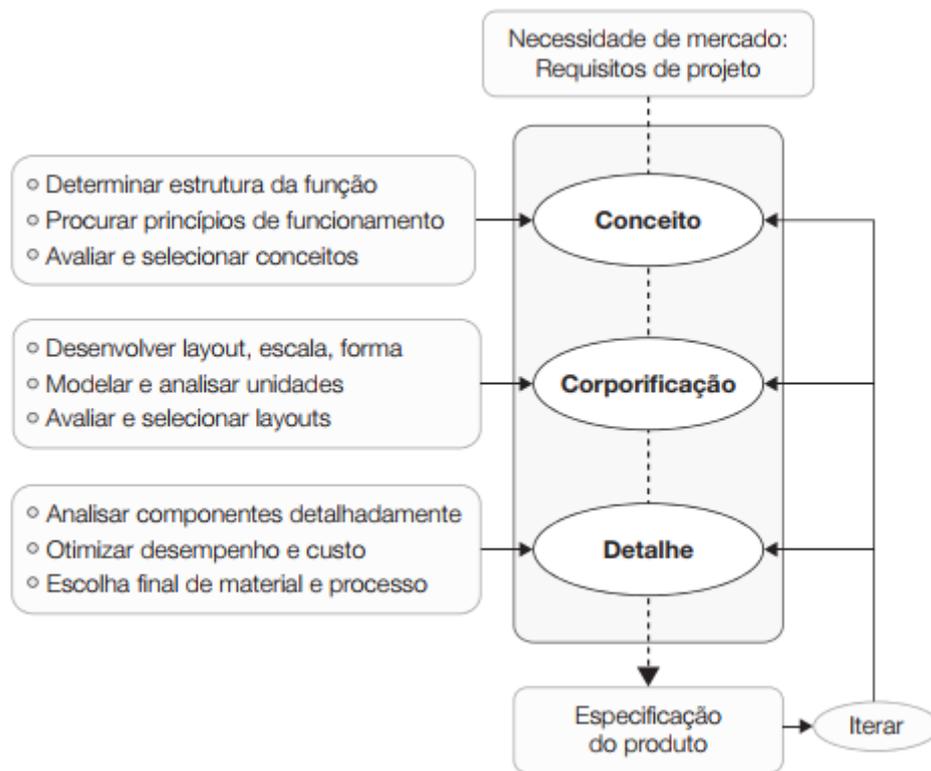
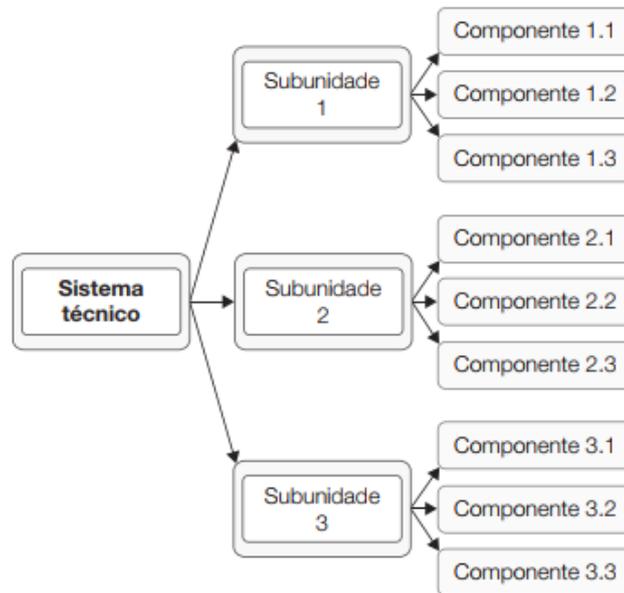


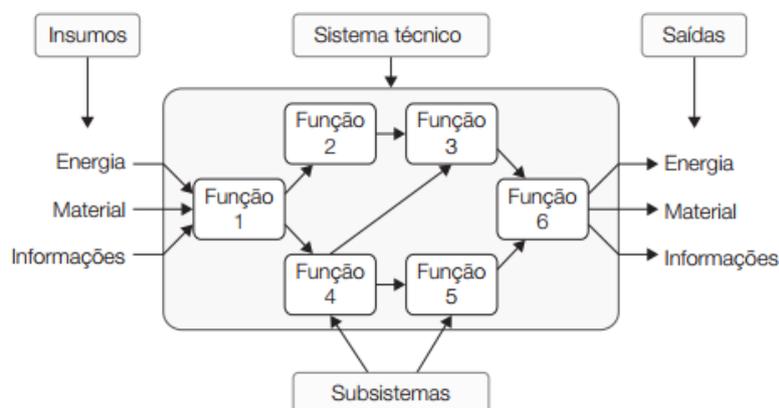
Figura 1 Fluxograma de um projeto (ASHBY, 2004)

Ashby também define que o produto final como sistema técnico, constituído por subunidades e componentes, organizados de maneira que seja capaz de realizar uma atividade atribuída ao mesmo, como exemplificado na **Figura 2** (ASHBY, 2004).



*Figura 2 Análise de um sistema técnico como uma subdivisão de subunidades e componentes (ASHBY, 2004)*

De acordo com Ashby, a subdivisão utilizada na **Figura 2** é útil para examinar projetos já existentes, porém não ajudando no planejamento para novos projetos. Para tal caso, é recomendado utilizar uma subdivisão que se baseia na análise de sistemas, considerando insumos, entrada e saída de informações, energia e materiais, como representado na **Figura 3** (ASHBY, 2004).



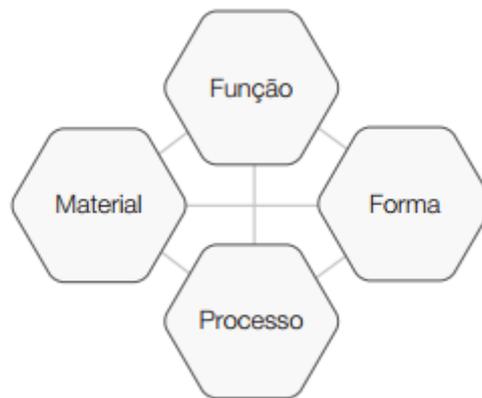
*Figura 3 Diagrama que relaciona os insumos e saída de um sistema técnico(ASHBY, 2004)*

### 3.1.2. Tipos de Projeto

Ashby estabelece uma classificação para projetos que se divide em três tipos: original, adaptativos ou desenvolvimentistas e projetos variantes. O projeto original tem como objetivo a concepção de uma nova ideia ou princípio de desenvolvimento, podendo ser viável com o avanço de tecnologia e desenvolvimentos de novos materiais. Por sua vez, projeto adaptativo, também chamado de desenvolvimentista, visa aprimorar o desempenho, reduzir o custo e/ou adaptar às um produto já existente no mercado. Por fim, o projeto variante consiste em uma mudança de escala ou detalhamento sem alterar a função final do produto (ASHBY, 2004).

### 3.1.3. Função, Material, Forma e Processo

Ashby destaca a interação entre função, material, forma e processo tal como mostrado na **Figura 4**. A função do produto irá influenciar na escolha do material. O material irá influenciar na escolha do processo de fabricação. O processo irá influenciar na forma final do produto, devido às suas limitações.



*Figura 4 Relação entre Função, Material, Forma e Processo (ASHBY, 2004)*

### 3.1.4. Método de Seleção Ashby

De acordo com Ashby, um índice de mérito é o resultado da combinação de uma função, um objetivo e uma restrição imposta (ASHBY, 2004). A **Figura 5** exemplifica o processo de obtenção desse um índice.

O autor destaca que as restrições de um projeto irão determinar os limites das

propriedades. Já um objetivo determina um índice de mérito (ou índice do material), o qual é procurado em seus extremos (maior ou menor). Caso o objetivo não esteja ligado a uma restrição, o índice se transformará em uma propriedade do material. Caso contrário, o índice se tornará um conjunto de propriedades (ASHBY, 2004).

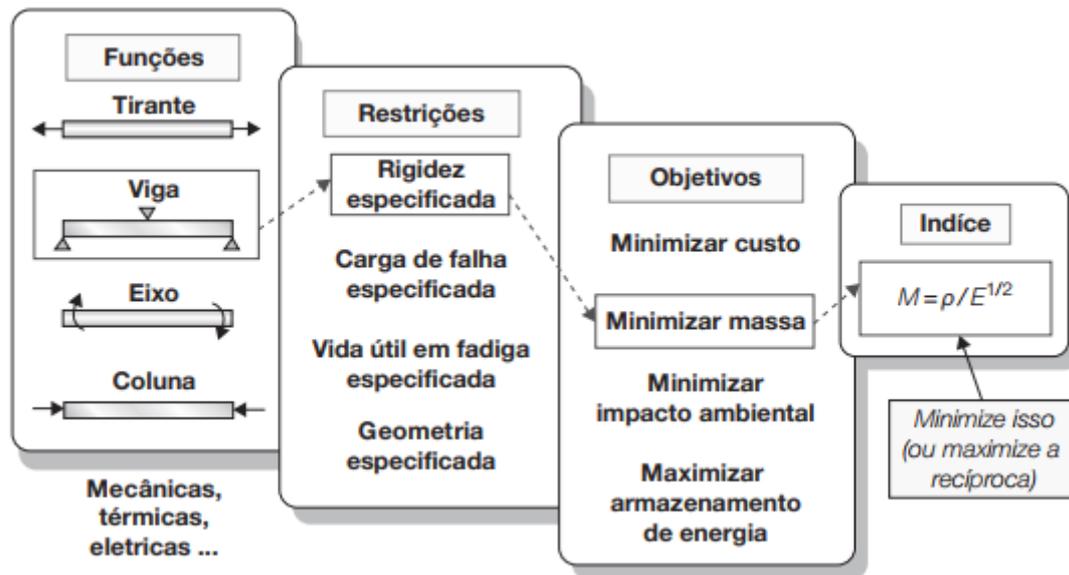


Figura 5 Exemplo de obtenção de índice de mérito (ASHBY, 2004)

Cada combinação de função, objetivo e restrição irá resultar em um índice de mérito, o qual é característico da combinação. A Tabela 1 traz exemplos de diferentes índices de mérito (ASHBY, 2004).

Tabela 1 Índices de mérito (adaptado de ASHBY, 2004)

Função, objetivo e restrições	Índice
Tirante, peso mínimo, rigidez prescrita	$\frac{E}{\rho}$
Viga, peso mínimo, rigidez prescrita	$\frac{E^{1/2}}{\rho}$
Viga, peso mínimo, resistência prescrita	$\frac{\sigma_y^{2/3}}{\rho}$
Viga, custo mínimo, rigidez prescrita	$\frac{E^{1/2}}{C_m \rho}$
Viga, custo mínimo, resistência prescrita	$\frac{\sigma_y^{2/3}}{C_m \rho}$

Coluna, custo mínimo, carga de flambagem prescrita	$\frac{E^{1/2}}{C_m \rho}$
Mola, peso mínimo para armazenamento de energia dado	$\frac{\sigma_y^2}{E \rho}$
Isolamento térmico, custo mínimo, fluxo de calor prescrita	$\frac{1}{\lambda C_p \rho}$
Eletromagneto, campo máximo, elevação de temperatura prescrita	$\frac{C_p \rho}{\rho_0}$

### 3.1.5. Mapa de Propriedades

Os índices de méritos devem ser analisados por meio do uso de um mapa de propriedades. Ashby desenvolveu um mapa de propriedade que permite criar tabelas básicas ou realizar a busca de propriedades de maneira computadorizada, com base em propriedades de materiais armazenadas em um banco de dados (ASHBY, 2004).

O autor ainda descreve a criação de gráficos que relacionam os valores de duas propriedades, uma no eixo X e outra no eixo Y, para mapear áreas no espaço da propriedade ocupadas por cada classe do material e subáreas ocupadas por materiais individuais, tal como representado na **Figura 6** (ASHBY, 2004).

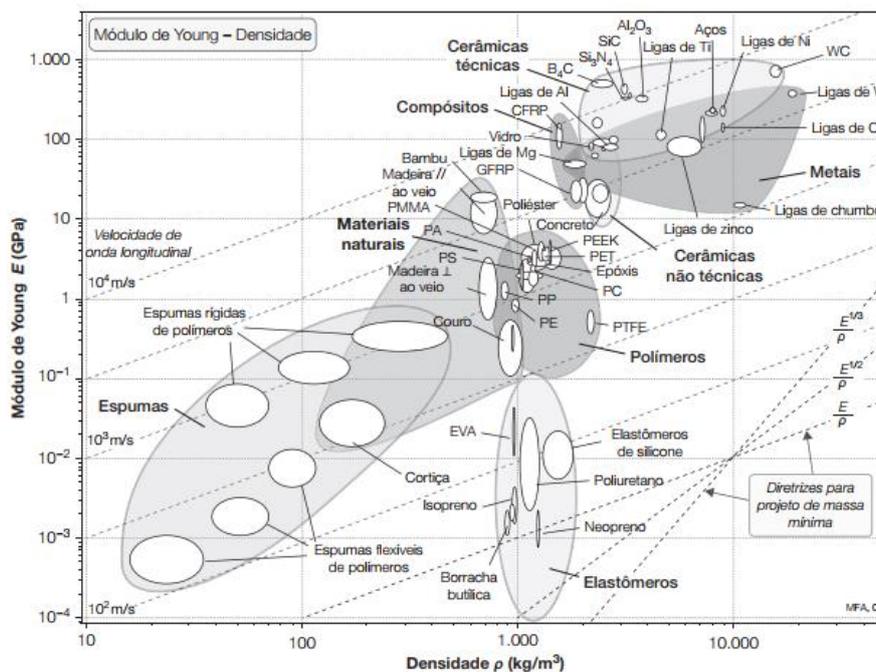


Figura 6 Diagrama módulo de elasticidade por densidade (ASHBY, 2004)

Nesse contexto, os índices de mérito podem ser utilizados em conjunto com esses mapas, sendo representados como retas que descrevem uma família de retas paralelas associadas a um respectivo índice de mérito, como denotado na **Figura 7**.

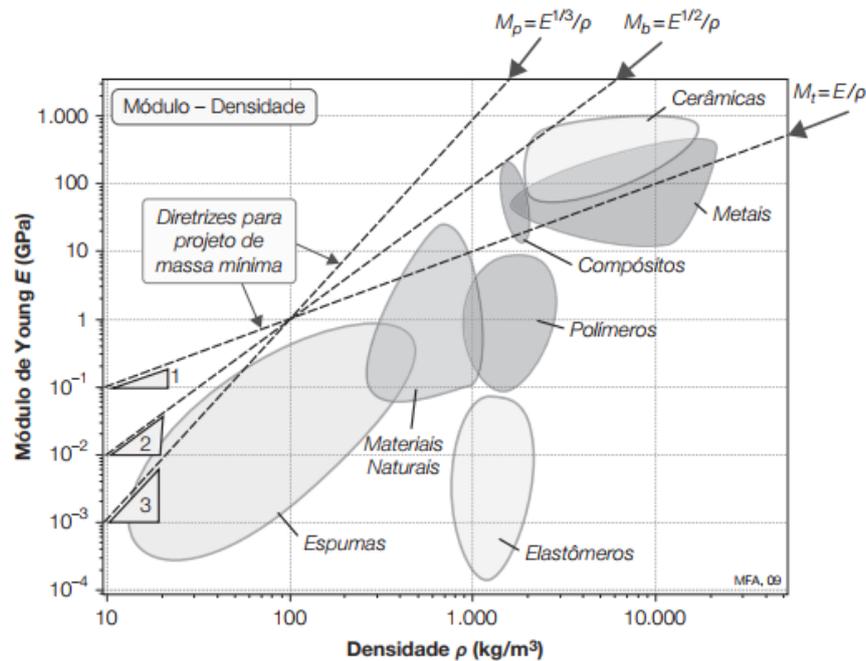


Figura 7 Diagrama módulo de elasticidade por densidade (ASHBY, 2004)

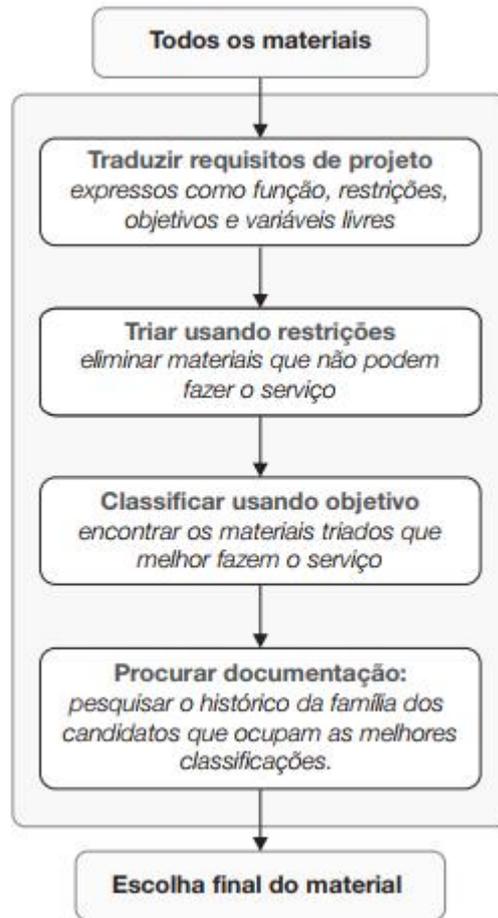
Neste quadro, a linha  $M_t$  pode ser representada por  $\frac{E}{\rho} = C$  ou em termos de logaritmo, conforme Equação 1.:

$$\log E = \log \rho + \log C \quad (\text{Equação 1})$$

em que para uma reta com inclinação 1, cada linha irá representar o valor da constante C.

### 3.1.6. Etapas de um projeto de seleção de materiais

Ashby diz que um projeto de seleção de materiais deve conter quatro etapas: tradução, triagem, classificação e documentação tal como denotado na **Figura 8** (ASHBY, 2004).



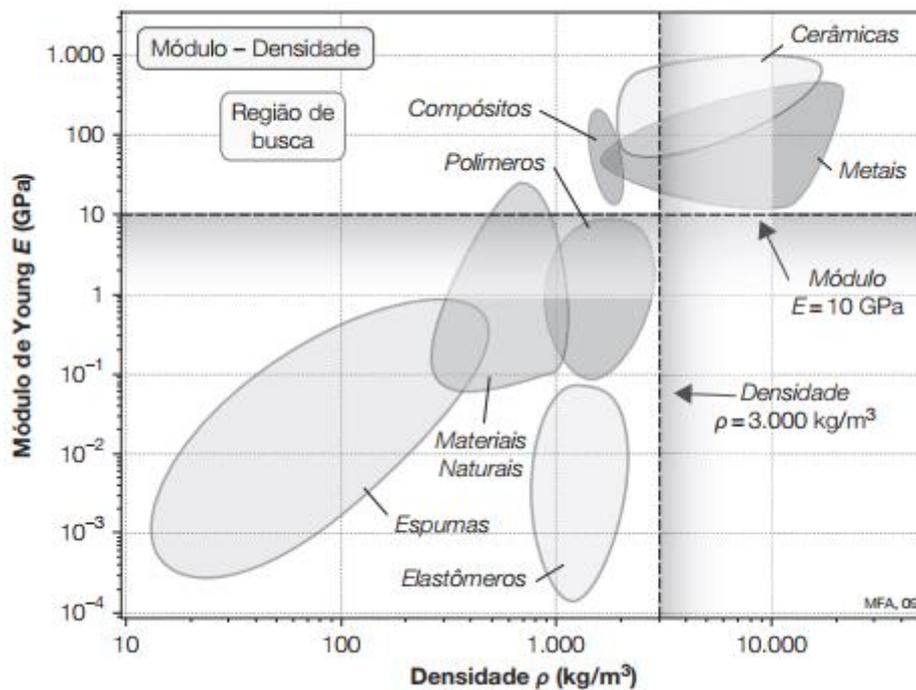
*Figura 8 A estratégia de seleção de materiais do Método de Ashby (ASHBY, 2004)*

A etapa de tradução consiste em converter os requisitos do projeto em restrições e objetivos. Para alcançar isso, é necessário identificar as propriedades que serão limitadas pelo projeto, estabelecer o critério de excelência que deverá ser minimizado ou maximizado conforme a necessidade, substituir as variáveis livres aplicando uma das restrições do projeto e finalmente, determinar a melhor combinação de propriedades de materiais que otimiza o critério de excelência (ASHBY, 2004). Tal processo é detalhado na **Tabela 2**.

Tabela 2 Etapas do processo de Tradução (ASHBY, 2004)

Nº da etapa	Ação
1	<p>Definir os requisitos de projeto:</p> <p><i>Função:</i> O que componente faz?</p> <p><i>Restrições:</i> Requisitos essenciais que devem ser cumpridos: por exemplo, rigidez, resistência mecânica, resistência à corrosão, características de conformação etc.</p> <p><i>Objetivo:</i> O que deve ser maximizado ou minimizado?</p> <p><i>Variáveis livres:</i> Quais são as variáveis não restringidas do problema?</p>
2	Fazer uma lista de restrições (não sofrer escoamento, não sofre fratura, não sofrer flambagem etc.) e desenvolver uma equação para elas, se necessário
3	Desenvolver uma equação para o objetivo em termos dos requisitos funcionais, geometria e propriedades de materiais ( <i>função objetivo</i> ).
4	Identificar as variáveis livres (não especificadas)
5	Substituir as variáveis livres das equações de restrição na função objetivo.
6	Reunir as variáveis em três grupos: requisitos funcionais $F$ , geometria $G$ e propriedades de material $M$ ; assim Métrica de desempenho $P \leq f_1(F) \cdot f_2(G) \cdot f_3(M)$ ou métrica de desempenho $P \leq f_1(F) \cdot f_2(G) \cdot f_3(M)$
7	Ler o índice de material, expresso como uma quantidade $M$ que otimiza a métrica de desempenho $P$ . $M$ é o critério de excelência.

Durante a etapa de triagem, realiza-se a eliminação dos materiais que não satisfazem as restrições e objetivos do projeto. Essas restrições podem ser interpretadas como limites de propriedade que são representados como linhas verticais e/ou horizontais em um mapa de propriedades. A **Figura 9** exemplifica um mapa de propriedades que relaciona o módulo de elasticidade com a densidade. Neste mesmo diagrama, é observada a limitação de um módulo de elasticidade maior que 10 GPa e uma densidade menor que 3000 kg/m<sup>3</sup>, gerando uma região de busca restrita (ASHBY, 2004).



*Figura 9 Diagrama Módulo de Elasticidade por Densidade (ASHBY, 2004)*

Na próxima etapa, a de classificação, busca-se ordenar os materiais que passaram na etapa de triagem, utilizando como ranking o valor de uma propriedade crítica para a aplicação, com objetivo de maximizar o desempenho. Para tal propósito, é possível utilizar os índices de mérito aplicados no mapa de propriedades, o qual cada índice terá uma inclinação diferente, como mostrado na **Figura 10** (ASHBY, 2004).

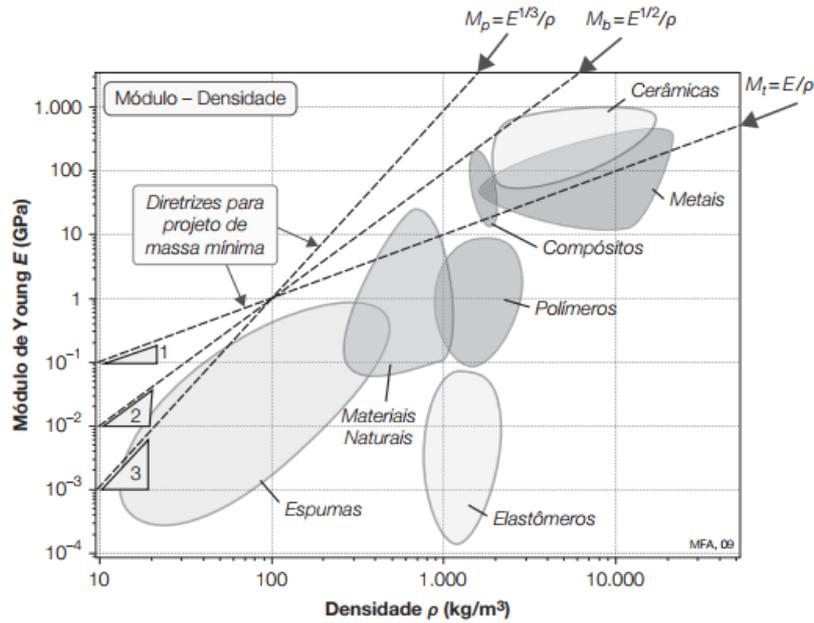


Figura 10 Diagrama Módulo de Elasticidade por Densidade com aplicação de diferentes índices de mérito (ASHBY, 2004)

Cada índice poderá gerar um conjunto de retas paralelas o qual facilitará a identificação e classificação dos materiais que maximizam o desempenho, tal como mostrado na **Figura 11**.

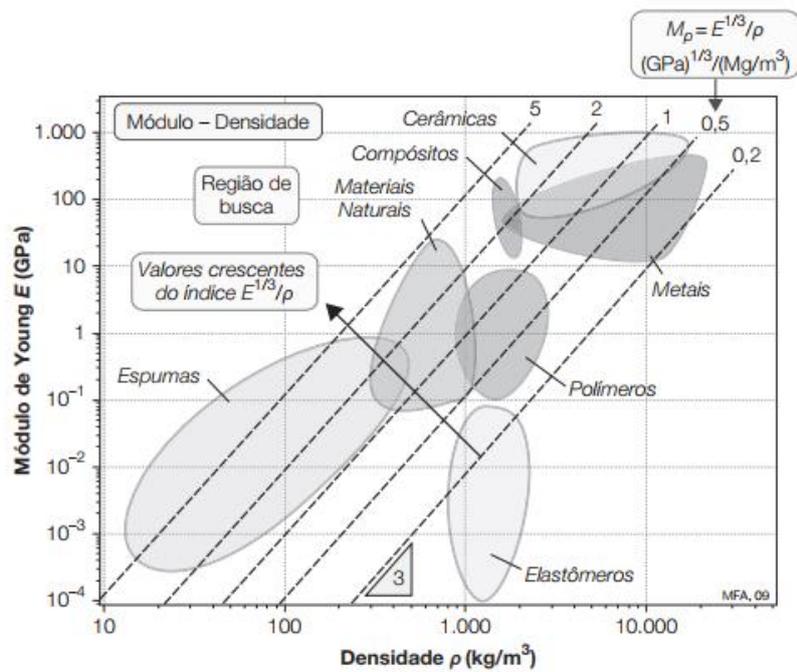


Figura 11 Diagrama esquemático Módulo de Elasticidade por Densidade, destacando uma grade de linhas paralelas (ASHBY, 2004)

Por último, a etapa de documentação consiste em analisar a lista de materiais aptos, obtida como resultado da etapa de classificação, realizando comparações com os materiais utilizados atualmente e quando possível, comparar com históricos de utilizações. Além disso, é válido revisar o comportamento de tais materiais sob o ambiente de aplicação, disponibilidade e possíveis restrições ignoradas anteriormente (ASHBY, 2004).

### 3.2. MACHINE LEARNING

*Machine Learning*, ou aprendizado de máquina, é uma disciplina da ciência da computação que permite que um algoritmo aprenda com um conjunto de dados (GÉRON, 2019).

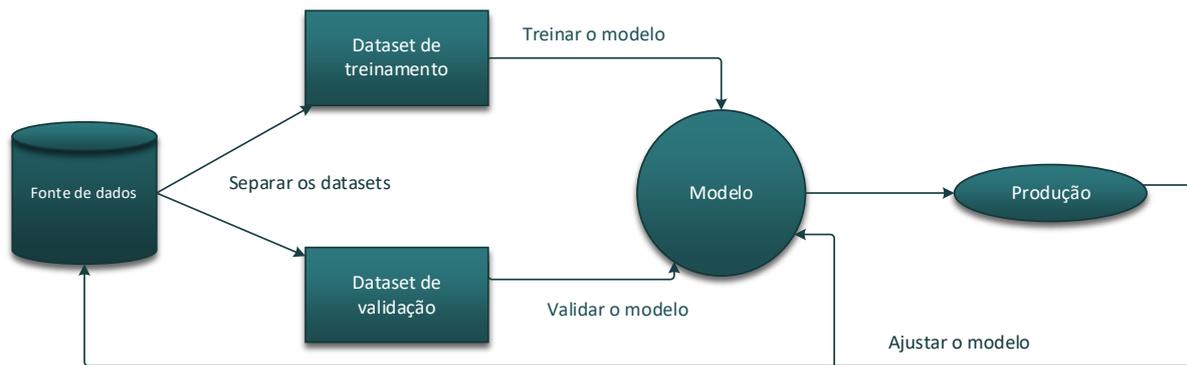
Um exemplo prático de sua aplicação é o uso de algoritmos para classificação de *spams*. Com base em classificações realizadas pelos usuários, o algoritmo é capaz de adquirir experiência e identificar de forma mais precisa se um e-mail é spam ou não.

Os algoritmos de *Machine Learning* possuem diversos tipos de classificações, dependendo de sua abordagem. Neste trabalho, será enfatizada a classificação pelo tipo de aprendizado, que pode ser supervisionado ou não supervisionado.

#### 3.2.1. Aprendizado supervisionado

No contexto de *Machine Learning*, o modelo supervisionado requer uma base de dados rotulada, ou seja, que apresente os resultados finais para o treinamento do algoritmo. Por exemplo, uma base de e-mails no qual cada e-mail é identificado como *spam* ou não.

Na **Figura 12**, é apresentado o funcionamento de um algoritmo de aprendizado supervisionado. Primeiramente uma fonte de dados deverá ser dividida em dois conjuntos de dados, um para o treinamento e outro para validação. O algoritmo é treinado com base no conjunto de dados de treinamento, realizando a classificação ou predição. Depois de treinado, o algoritmo identifica os padrões da base de treinamento e pode ser aplicado no conjunto de dados de validação para avaliar sua eficácia. Caso o desempenho do algoritmo não seja satisfatório, é possível realizar ajustes para melhorar sua performance e treiná-lo novamente (MAHESH, 2020).



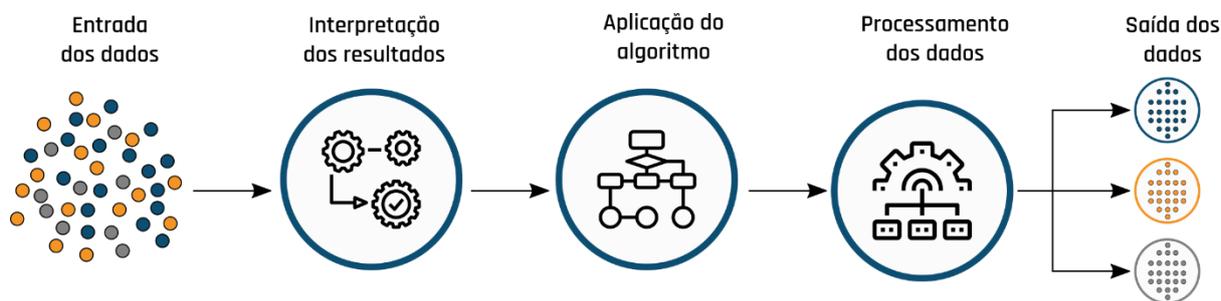
*Figura 12 Funcionamento de um algoritmo de aprendizado supervisionado (Adaptado para o português de MAHESH, 2020)*

Alguns exemplos de algoritmos de *machine learning* com aprendizado supervisionado são:

- Árvore de decisões;
- Classificador de Navie Bayes;
- Máquinas de vetores de suporte (*Support Vector Machine*).

### 3.2.2. Aprendizado não supervisionado

No aprendizado não supervisionado, os dados não são rotulados, de maneira que o algoritmo irá identificar padrões presentes nos dados, tal como exemplificado na **Figura 13**. Ao inserir um novo conjunto de dados, o algoritmo irá utilizar os padrões aprendidos anteriormente para classificar os dados (MAHESH, 2020).



*Figura 13 Funcionamento de um algoritmo de aprendizado não supervisionado (ALMEIDA et al., [S.d.]*

As técnicas de aprendizado não supervisionado podem ser aplicadas para diversas tarefas: redução de dimensionalidade, clusterização, detecção de anomalias e estimativas de densidade (GÉRON, 2019).

Os principais algoritmos de *machine learning* com aprendizado não supervisionado são:

- *K-means*;
- DBSCAN;
- Agrupamento Hierárquico.

### 3.3. CLUSTERIZAÇÃO

Um algoritmo de clusterização consiste em uma técnica de *Machine Learning* de aprendizado não supervisionado que tem como objetivo agrupar instâncias semelhantes em *clusters* (GÉRON, 2019). Tal ferramenta pode atuar em diferentes áreas:

- Segmentação de clientes;
- Análise de dados;
- Técnica de redução de dimensionalidade;
- Detecção de outliers em um conjunto de dados;
- Mecanismos de buscas;
- Segmentação de imagens.

Segundo Géron, não existe uma definição universal do que é um *cluster*, pois dependerá do contexto e dos diferentes algoritmos identificarem tipos distintos de *clusters*. Alguns algoritmos buscam instâncias centradas em torno de um ponto específico (também chamado centroide), outros procuram regiões contínuas de instâncias densamente compactadas, outros por nível hierárquico e etc. (GÉRON, 2019).

A **Figura 10** exemplifica um conjunto de dados antes de depois de se aplicar um algoritmo de clusterização.

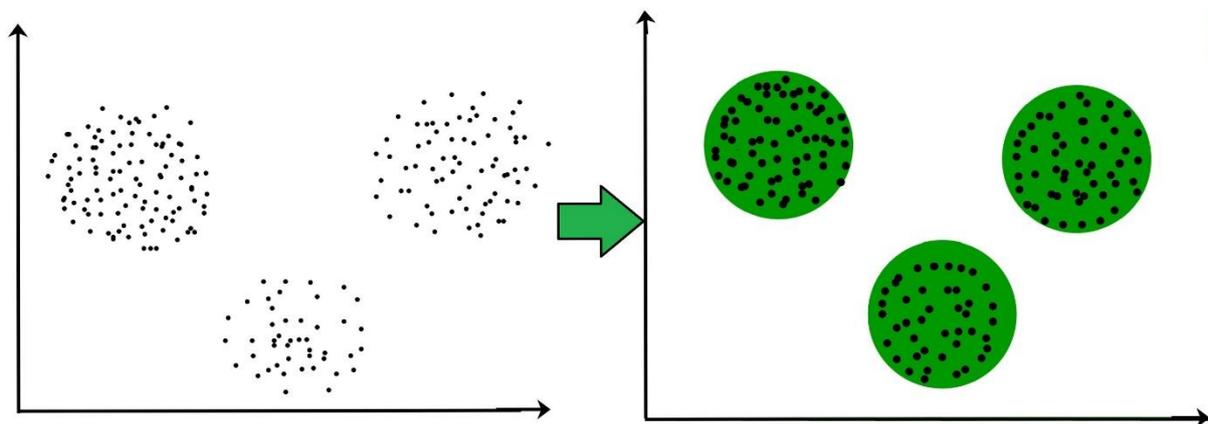


Figura 14 Exemplo do resultado final de um algoritmo de Clusterização  
 (“Clustering in Machine Learning - GeeksforGeeks”, 2023)

### 3.3.1. K-means

Sendo o algoritmo de clusterização mais simples e popular, o *k-means* atua agrupando instâncias semelhantes de um conjunto de dados em um número  $k$  de *clusters*, que deverá definidos pelo usuário. Cada *cluster* possuirá um centroide, isto é, um conjunto de coordenadas que está localizado no centro de cada *cluster* (SAXENA e colab., 2017).

O algoritmo possui quatro etapas(SAXENA et al., 2017):

- i. Tendo definido o número  $k$  de *clusters*, o algoritmo irá criar  $k$  centroides em posições aleatórias;
- ii. Desta maneira, o algoritmo irá realizar uma iteração entre cada dado do conjunto e cada centroide verificando a distância geométrica entre ambos e atribuindo cada dado ao *cluster* que possuir a menor distância geométrica em relação ao centroide do mesmo;
- iii. Em seguida, o algoritmo irá recalcular a posição dos centroides baseados nos dados que estão alocados ao mesmo;
- iv. Por fim, o algoritmo irá repetir a segunda e a terceira etapa atingindo o número de iterações estipuladas pelo usuário ou até que não haja mudanças na posição do centroide.

A **Figura 15** ilustra o processo descrito anteriormente.

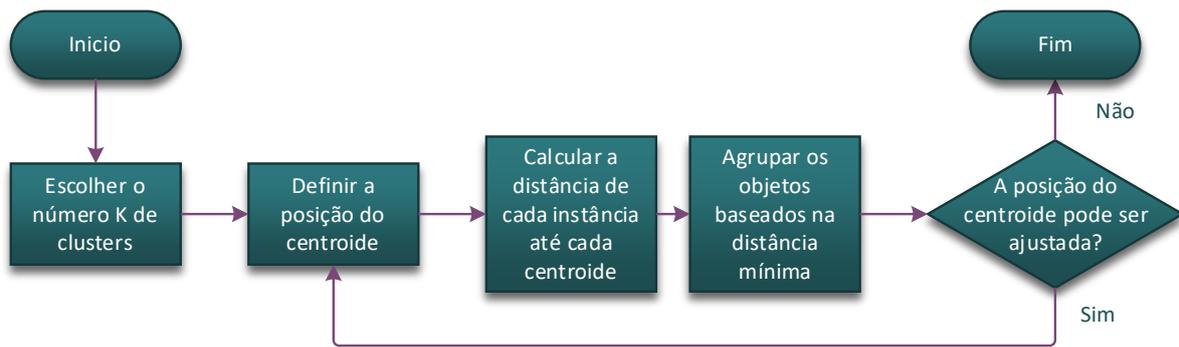


Figura 15 Fluxo de execução do algoritmo K-means (adaptado de SAXENA et al., 2017)

Por fim, quando utilizado o processo de clusterização com um conjunto de dados que possua apenas duas variáveis, é possível gerar um gráfico de Voronoi semelhante ao da **Figura 16**, no qual cada sinal de adição corresponde a um centroide.

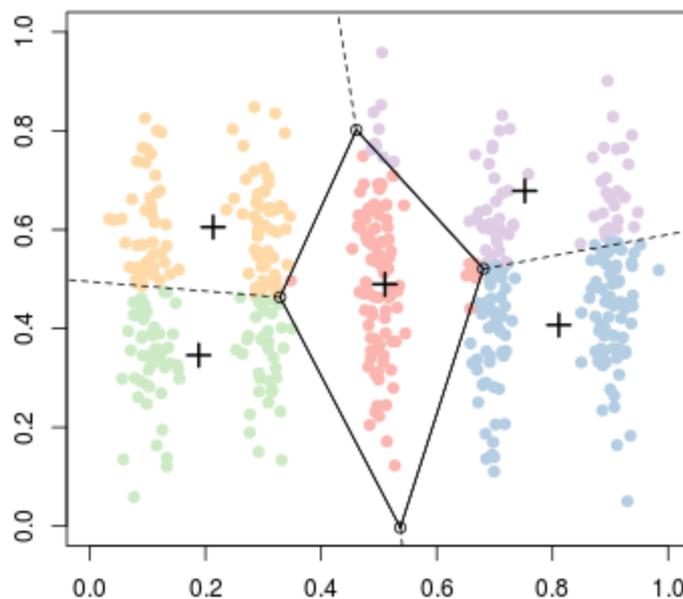


Figura 16 Exemplo de um Gráfico de Voronoi resultante de um conjunto de dados que foi aplicado o algoritmo K-means("k-means clustering and Voronoi sets | Freakonometrics", 2015)

### 3.3.2. Definindo o valor de k

Para se definir o número ideal de k pode-se utilizar o coeficiente de *Silhouette* ou também chamado de *Silhouette Score*, o qual mede a distância de quão perto cada instância está dentro de um *cluster* em relação às instâncias de um *cluster* vizinho, fornecendo um valor entre 1 e -1 (GÉRON, 2019).

O coeficiente pode ser calculado pela Equação 2:

$$silhouette\ score = \frac{(b-a)}{\max(a,b)} \quad (\text{Equação 2})$$

Sendo:

- a é a distância média intracluster, isto é, a distância média de cada dado até às outras instâncias do mesmo *cluster* ao qual está assimilado.
- b é a distância média intercluster, isto é, distância de cada dado média às instancias do *cluster* vizinho mais próximo.

O conceito de distância intracluster e interclusters pode ser melhor compreendido ao se observar a **Figura 17**.

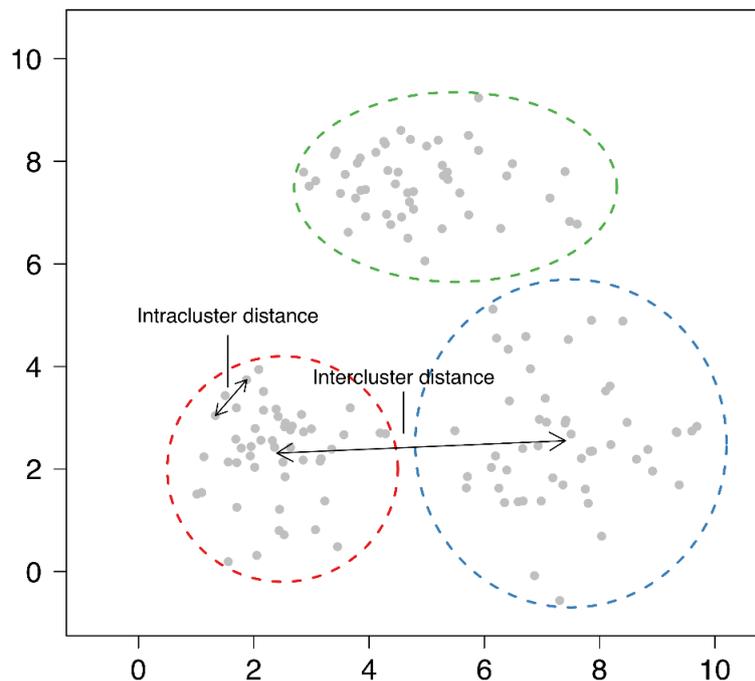


Figura 17 Exemplificação de distância intercluster e intracluster(YEOMANS e XU, 2020)

Quando o resultado é próximo de 1, tem-se que a instancia está próxima ao seu *cluster* e distante dos demais. Quando próximo a 0, tem-se que a instância está na fronteira entre dois *clusters*. E por fim, quando próximo a -1, tem-se que a instância foi atribuída a um *cluster* errado(GÉRON, 2019).

Calculando o coeficiente de Silhouette para diferentes números de *clusters*, é possível determinar qual a quantidade de *clusters* ideal para o conjunto de dados utilizado(GÉRON, 2019).

### 3.3.3. Exemplos de uso

Com o intuito de exemplificar os usos do *K-means* foram selecionados três casos no qual o algoritmo foi utilizado para finalidades diferentes:

- (i) O primeiro caso consiste em um estudo de segmentação de imagens utilizando um algoritmo de clusterização subtrativa para gerar os centroides iniciais, aplica-los no K-means e por último, aplicar um filtro na imagem segmentada para remover regiões indesejadas da imagem(DHANACHANDRA et al., 2015);
- (ii) No segundo caso, foi utilizado um algoritmo de clusterização de eficiência energética baseado no *K-means* para encontrar o consumo de energia de cada nó em uma de redes de sensores sem fio (*Wireless sensor network*) (EL KHEDIRI et al., 2020).
- (iii) E o último caso, consiste em um artigo de review envolvendo uso de algoritmos de agrupamento hierárquico e *K-means* em estudos de poluição de ar executados entre 1980 e 2019 (GOVENDER e SIVAKUMAR, 2020).

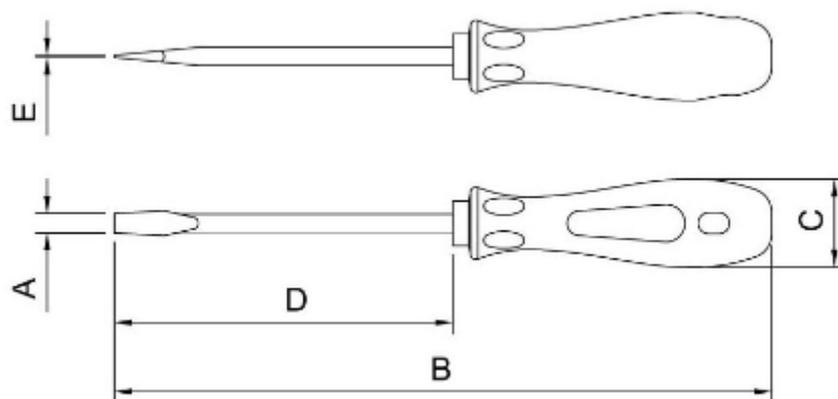
Em nosso conhecimento, não foram encontradas referências de aplicações do algoritmo K-means na área de seleção de materiais.



## 4. MATERIAIS E MÉTODOS

### 4.1. CHAVE DE FENDA

Segundo Duryat a chave de fenda consiste em uma ferramenta que tem como principal função primária transmitir torque das mãos para o parafuso (DURYAT, 2020). A **Figura 18** ilustra um modelo da ferramenta, composta por uma haste metálica com ponta chata, seguida de um apoio ergonômico para a mão do usuário.



*Figura 18 Modelo de uma chave de fenda (“Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio 3x50 mm (1/8x2”) Tramontina PRO | Tramontina”, [S.d.]*

A norma ISO (*International Organization for Standardization*) 2380-1 define as propriedades e formatos padrões para chaves de fenda de uso manual ou com o auxílio de uma máquina (“ISO 2380-1 Assembly tools for screws and nuts- Screwdrivers for slotted-head screws-Part 1: Tips for hand-and machine-operated screwdrivers”, 2004). A norma determina que para chaves de uso manual deve-se obter uma dureza mínima de 50 HRC (513 HV) à pelo menos um comprimento de três vezes a largura da ponta da chave.

Sendo um dos principais fabricantes nacionais de ferramentas manuais, a Tramontina utilizada aço cromo vanádio na fabricação de chaves de fenda. O aço cromo vanádio segue a norma ASTM A231 (“Designation: A 231/A231M-96 (Reapproved 2002) Standard Specification for Chromium-Vanadium Alloy Steel Spring Wire 1”, 2020), o qual possui algumas propriedades de interesse listadas na **Tabela 3**.

*Tabela 3 Propriedades mecânicas do aço cromo vanádio (“ASTM A231 Chromium-Vanadium Spring Steel:: MakeltFrom.com”, [S.d.]*

<i>Propriedade</i>	<i>Valor</i>
<i>Dureza Vickers</i>	577 HV
<i>Módulo de elasticidade</i>	190 GPa
<i>Limite de resistência à tração</i>	1790 MPa
<i>Limite de escoamento</i>	1570 MPa
<i>Módulo de cisalhamento</i>	73 GPa
<i>Densidade</i>	7800 kg/m <sup>3</sup>

Para este trabalho, será utilizado a chave de fenda do modelo Tramontina PRO Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio com dimensões 3x50 mm (1/8x2"), ilustrada na **Figura 19**. Serão considerados como requisitos mínimo os valores das propriedades mecânicas citadas na **Tabela 3**, tal como valor máximo da densidade encontrada na ISO 2380-1.



*Figura 19 Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio 3x50 mm (1/8x2") Tramontina PRO (“Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio 3x50 mm (1/8x2") Tramontina PRO | Tramontina”, [S.d.]*

## 4.2. UTILIZANDO O MÉTODO DE ASHBY

Em 2020 Duryat escreveu um artigo de revisão, descrevendo o processo de seleção de materiais para uma chave de fenda utilizando o método de Ashby, o qual realiza a etapa de tradução e o cálculo dos índices de mérito, sem chegar a escolher o melhor material para a aplicação (DURYAT, 2020).

Inicialmente, Duryat realiza a etapa de tradução, listando as principais propriedades e requisitos, o qual pode ser observado na **Tabela 4**:

*Tabela 4 Requisitos e propriedades equivalentes de uma chave de fenda (DURYAT, 2020)*

	<i>Requisito</i>	<i>Propriedades do Material</i>
<i>Função</i>	Transmitir torque	Resistência
	Deve suportar cargas compressivas	Rigidez
<i>Restrições</i>	Não sofrer deformação plástica	Resistência mecânica
	Não quebrar facilmente	Resistência à fratura
	Não deve entortar	Módulo de elasticidade
	Não deve ser riscado	Dureza
	Não deve sofrer desgaste	Resistência ao desgaste
	Não deve degradar	Resistência à corrosão
<i>Objetivo</i>	Minimizar a massa	Densidade

Para restringir os materiais, foram utilizados os valores ilustrados na **Tabela 5**, o qual foram baseados nas propriedades do aço cromo vanádio. Após a restrição, chegou-se a um total de 54 materiais candidatos listados no **Apêndice A** na **Tabela 18**.

Tabela 5 Relação propriedades e objetivos utilizados

Propriedade	Mínimo	Máximo
Dureza Vickers	577 HV	-
Módulo de elasticidade	190 GPa	-
Limite de resistência à tração	1790 MPa	-
Limite de escoamento	1570 MPa	-
Módulo de cisalhamento	73 GPa	-
Densidade	-	7800 kg/m <sup>3</sup>

Duryat também realizou o equacionamento dos índices de méritos chegando aos índices  $M_1$  e  $M_2$  abaixo, o qual foram invertidos com o objetivo de minimizar a densidade. Nas equações abaixo (Equação 3 e 4),  $\sigma$  representa o limite de resistência à tração,  $\rho$  a densidade e  $E$  o módulo de elasticidade.

$$M_1 = \frac{\sigma^2}{\rho} \quad (\text{Equação 3})$$

$$M_2 = \frac{E^{\frac{1}{2}}}{\rho} \quad (\text{Equação 4})$$

Com base nos índices de méritos listados acima, utilizou-se o software Granta Edupack 2020 para criação dos mapas de propriedades e classificação com base nos índices de mérito.

Na etapa de classificação, foi utilizado o índice  $M_1$  e  $M_2$  para gerar o feixe de retas paralelas, diminuindo o escopo de materiais aptos para a aplicação. Para remover possíveis *outliers*, foi definido trabalhar apenas com os materiais metálicos, obtendo-se assim os dez materiais que simultaneamente maximizam ambos os índices de mérito.

Por fim, na etapa de documentação, foram obtidos os valores de cada índice de mérito, o qual foi utilizado como ranking para se definir o melhor material.

### 4.3. REALIZANDO O TREINAMENTO DO DATASET DE PROPRIEDADES COM O K-MEANS

Aos dados utilizados nesta etapa (**Apêndice B, Tabela 20**), ou seja, os materiais candidatos sobreviventes do processo de triagem (item **4.2**), foi adicionado mais um aspecto para ser considerado: o preço, sendo posteriormente convertidos em uma tabela utilizando o software Microsoft Excel. Tais dados foram tratados e utilizados os valores médios de suas propriedades. Ao contrário do método de Ashby que só é possível utilizar duas variáveis por vez, com o *K-means* é possível realizar o agrupamento dos materiais através do uso de todas as variáveis disponíveis.

Para a seleção com o auxílio do algoritmo *k-means* foi desenvolvido um código em *Python 3.9* abaixo, o qual será descrito etapa por etapa.

A primeira etapa do código consiste em realizar a importação das bibliotecas necessárias para a execução do algoritmo.

```
#Importação de bibliotecas
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn.metrics import silhouette_score
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
import seaborn as sns
```

Em seguida, é gerado um *dataframe* importando a tabela descrita anteriormente.

```
#ler o arquivo Excel com as propriedades dos materiais
df = pd.read_excel("base_materiais.xlsx")
```

É realizado a remoção da coluna com os nomes dos materiais para não influenciar no processo.

```
#Drop da coluna com o nome de cada material
df_nonames = df.drop(['Name'], axis=1)
```

A seguir os dados são normalizados.

```
#normalizar os dados
scaler = StandardScaler()
X_std = scaler.fit_transform(df_nonames)
```

Nesta etapa do código, é realizado o cálculo do *Silhouette Score* a fim de identificar o número ideal de *clusters* a serem utilizados.

```
#determinar o valor ideal de n
range_n_clusters = list(range(3,9))
for n_clusters in range_n_clusters:
    clusterer = KMeans(n_clusters=n_clusters)
    preds = clusterer.fit_predict(X_std)
    centers = clusterer.cluster_centers_

    score = silhouette_score(X_std, preds)
    print("For n_clusters = {}, silhouette score is {}".format(n_clusters,
                                                                score))
```

Em seguida é realizado o treinamento do algoritmo.

```
#treinar o modelo para o valor encontrado de N
kmeans = KMeans(n_clusters = 4,random_state = 111)
kmeans.fit(X_std)
KMeans(n_clusters=4, random_state=111)
pd.Series(kmeans.labels_).value_counts()
```

Por último é criada uma nova coluna ao conjunto de dados inicial, indicando a qual *cluster* cada material irá pertencer.

```
#atribuir uma nova coluna no dataframe original indicando a qual cluster
cada dado pertence
preds = kmeans.labels_
kmeans_df = pd.DataFrame(df)
kmeans_df['Labels'] = preds
```

Buscando selecionar o *cluster* que contenha os materiais que melhor se que enquadram na aplicação, foram estabelecidos quais propriedades deveriam ser

maximizadas ou minimizadas como descrito na **Tabela 6**.

*Tabela 6 : Propriedades e objetivos selecionados*

<b>Propriedade</b>	<b>Objetivo</b>
<b>Módulo de elasticidade</b>	Maximizar
<b>Limite de escoamento</b>	Maximizar
<b>Limite de resistência à tração</b>	Maximizar
<b>Dureza Vickers</b>	Maximizar
<b>Densidade</b>	Minimizar
<b>Preço</b>	Minimizar

Com os resultados obtidos, foi criado uma tabela contendo a média das propriedades dos materiais presentes em cada *cluster*, selecionando cluster que melhor se enquadrava aos objetivos citados na **Tabela 6**. Tal *cluster* foi utilizado como um novo conjunto de dados para executar o algoritmo novamente, repetindo este processo até chegar à uma quantidade reduzida de materiais candidatos.



## 5. RESULTADOS

### 5.1. MÉTODO DE ASHBY

#### 5.1.1. Tradução e triagem

Utilizando o trabalho realizado anteriormente por Duryat, foi possível pular da etapa de tradução para a etapa de triagem. Em tal etapa, foram aplicadas as propriedades do aço cromo vanádio descritos na **Tabela 3**, o qual utilizando o software *Granta Edupack 2020*, foi possível obter os seguintes mapas de propriedades ilustrado na **Figura 20** e **Figura 21**. O resultado desta etapa foi uma lista de 54 materiais que cumprem os requisitos mínimos adotados, o qual podem ser consultados na **Tabela 18** presente no **Apêndice A**.

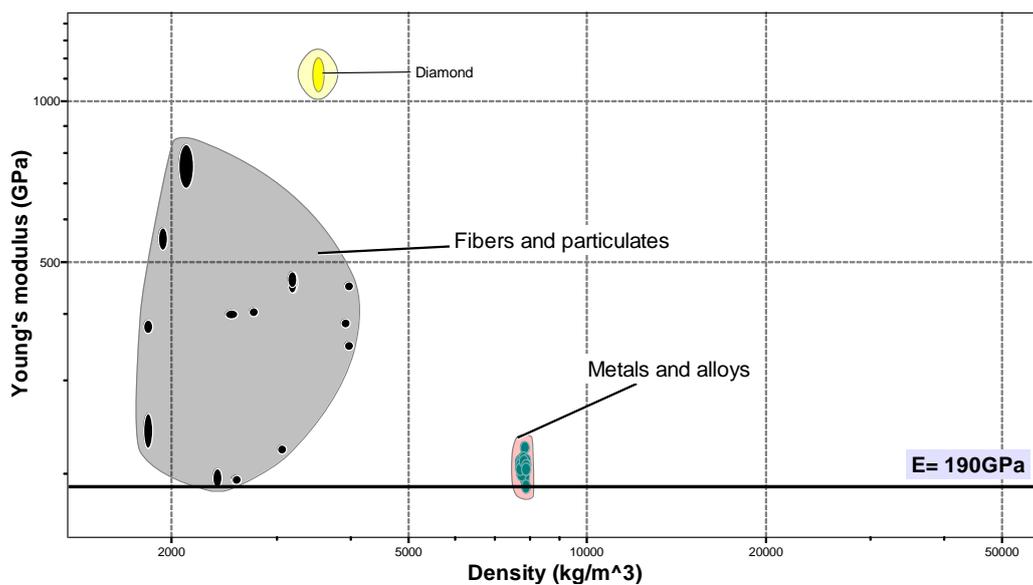


Figura 20 Diagrama módulo de elasticidade por densidade

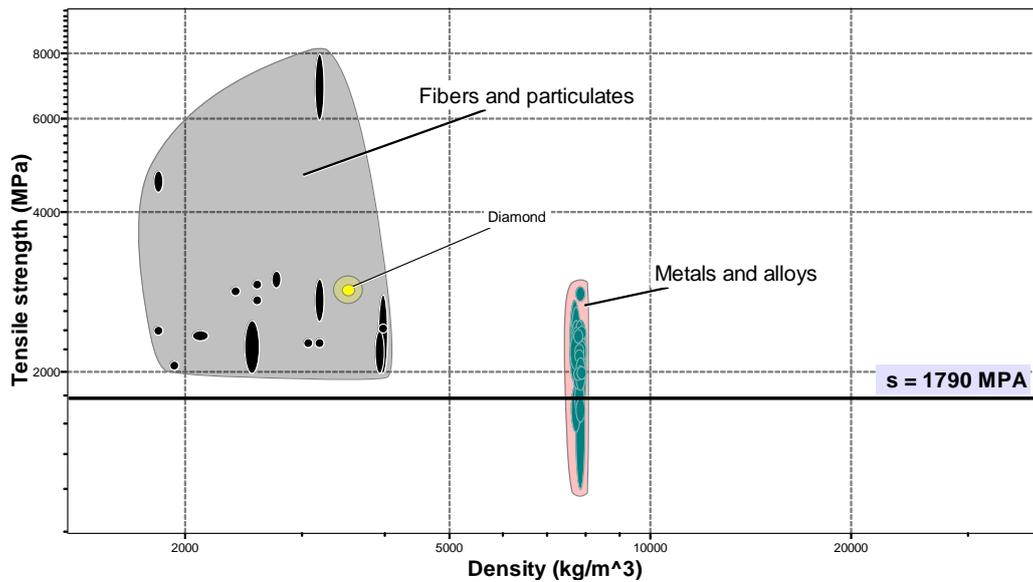


Figura 21 Diagrama limite de resistência à tração por densidade

### 5.1.2. Classificação

Na etapa de classificação, a fim de remover possíveis *outliers* como exemplificado na **Figura 22**, foi inserido um filtro de tipo de material, optando por trazer apenas os materiais metálicos.

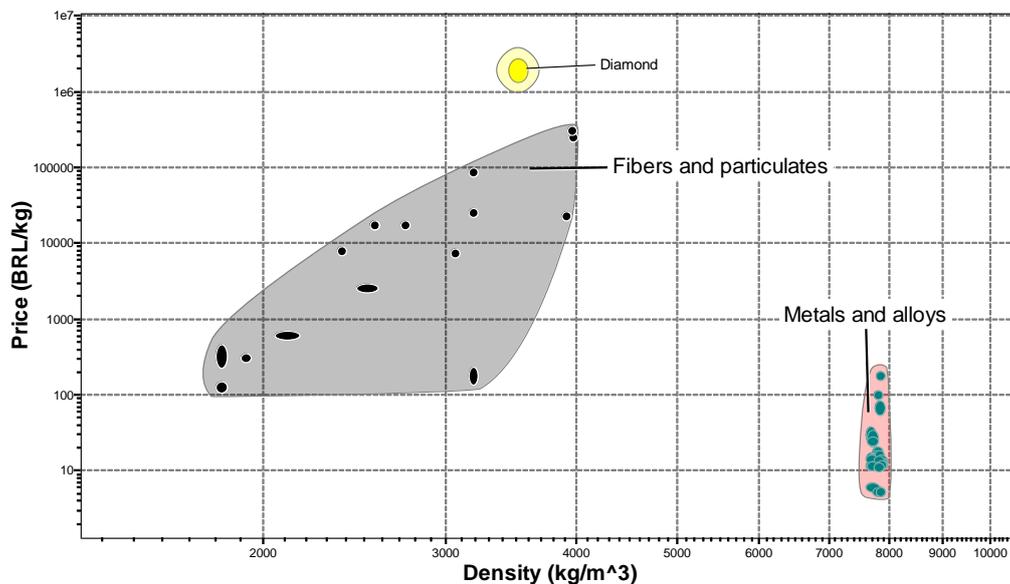
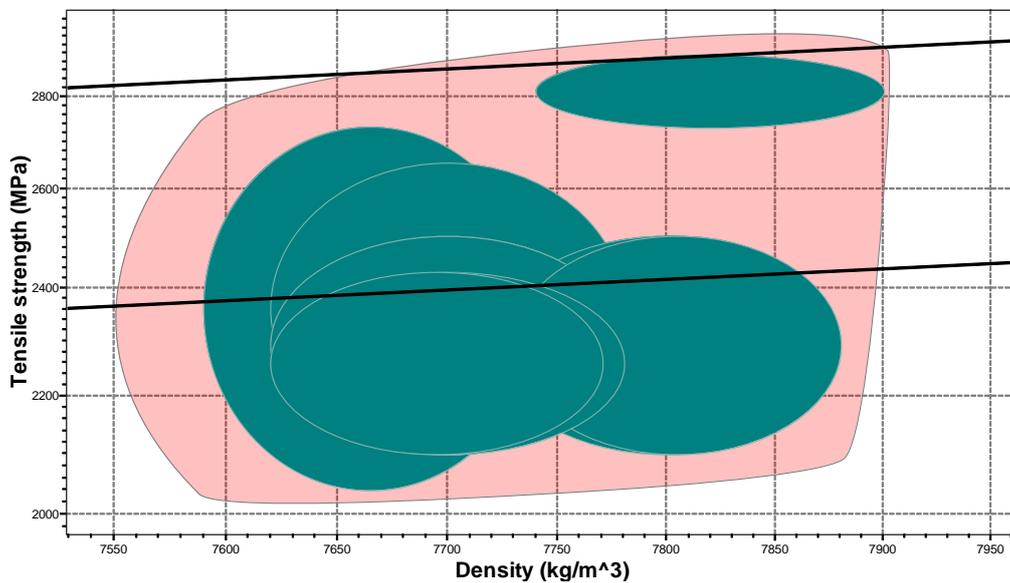


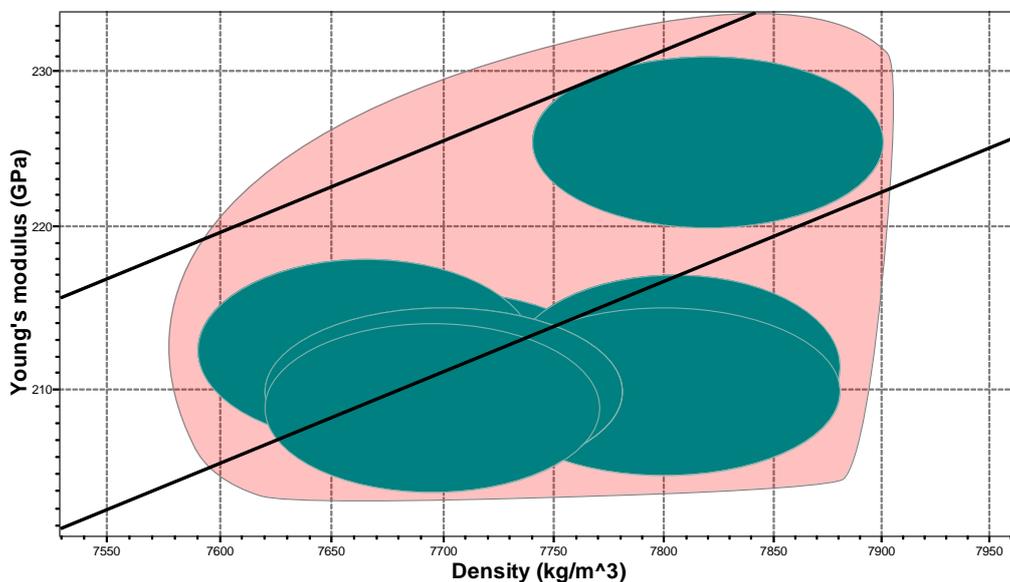
Figura 22 Materiais resultantes após a etapa de triagem

Em seguida, foram aplicados os dois índices de méritos em seus devidos

mapas de propriedades, definidos na **Seção 4.2**, de modo que podem ser observados na **Figura 23** e **Figura 24**. Desta maneira, através da maximização dos índices, foi possível selecionar os dez melhores materiais presentes no conjunto de materiais que pode ser observado na **Tabela 7**.



*Figura 23 Aplicação do primeiro índice de mérito no mapa de propriedades Limite de resistência à tração por Densidade*



*Figura 24 Aplicação do segundo índice de mérito no mapa de propriedades Módulo de elasticidade por Densidade*

Tabela 7 Propriedades dos materiais resultantes da etapa de classificação

Nome	Módulo de Elasticidade (GPa)	Limite de resistência à tração (MPa)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	212,5	2170,0	7665
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	2035,0	7695
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	211,5	2075,0	7805
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	2075,0	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	210,5	2075,0	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	2075,0	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	210	2035,0	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	210	2155,0	7700
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	210	2075,0	7800
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	225,5	2630,0	7820

### 5.1.3. Documentação

Na etapa de documentação, foi realizado a seleção do melhor material do conjunto resultante para a aplicação. Para tal, foi buscado utilizar o material que maximiza os índices de mérito, resultando na liga AISI M46 assim como descrito na **Tabela 8**.

Tabela 8 Classificação dos materiais resultantes segundos os índices de mérito

Nome	Ranking IM1	Ranking IM2
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	1	1
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	2	2
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	3	4
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	4	4
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	4	3
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	4	4
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	7	8
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	8	10
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	9	4
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	10	9

## 5.2. K-MEANS

O algoritmo citado no item 3.3 foi executado utilizando a lista de materiais presentes na **Tabela 21** do **Apêndice B**, considerando as propriedades e objetivos listados na **Tabela 5**. A **Tabela 9** apresenta os dados referentes à cada execução do algoritmo, no qual na última execução será discutida posteriormente.

Nota-se a que há uma queda do valor do *Silhouette Score* e no número de *clusters* gerados conforme avança o número de execuções do algoritmo. Isso ocorre pois ao se selecionar um *cluster* como um conjunto de dados para executar o algoritmo, os dados dos materiais ali presentes possuem valores próximos, fazendo com que as distâncias entre cada *cluster* diminua.

Tabela 9 Valores resultantes em cada execução do algoritmo

Número da execução do algoritmo	Quantidade N de <i>clusters</i> utilizados	Valor do <i>Silhouette Score</i>	Número do <i>cluster</i> selecionado	Nº de materiais no <i>cluster</i> selecionado
1	8	0,671	0	37
2	4	0,355	0	21
3	3	0,289	Não se aplica	Não se aplica

### 5.2.1. Primeira execução

Durante a primeira execução do algoritmo, o maior valor obtido do *Silhouette Score* de 0,671 para 8 *clusters* como descrito na **Tabela 10**. O alto valor do *Silhouette Scores* se dá à diversidade de materiais presentes no conjunto de dados.

Tabela 10 Valor do *Silhouette Score* referente a quantidade de *clusters* para a primeira execução do algoritmo

Quantidade de <i>clusters</i>	<i>Silhouette Score</i>
3	0,612
4	0,636
5	0,658
6	0,642
7	0,635
8	0,671

A **Tabela 11** contém a média das propriedades dos materiais presentes em cada *cluster*. Neste primeiro resultado nota-se o potencial do algoritmo em segregar materiais semelhantes. Destaca-se que *cluster* 1 contém apenas o Diamante, que se comporta como um *outlier* em relação aos demais materiais. O *cluster* 0 destaca-se por ser composto exclusivamente por ligas metálicas, o qual possui um preço extremamente baixo quando comparado aos demais e valores de propriedades

satisfatórios para a aplicação. Sendo assim escolhido para a próxima execução do algoritmo.

*Tabela 11 Média das propriedades dos materiais de cada cluster*

Propriedade	Número do cluster							
	0	1	2	3	4	5	6	7
<b>Quantidade de Materiais</b>	37	1	3	6	1	2	6	1
<b>Módulo de elasticidade (GPa)</b>	209	1130	197	357	460	658	459	243
<b>Limite de escoamento (MPa)</b>	1898	2865	2375	2198	5835	1838	2063	3875
<b>Limite de resistência à tração (MPa)</b>	2132	2865	2850	2426	7000	2208	2475	4600
<b>Módulo de cisalhamento (GPa)</b>	81	455	79	145	200	288	194	105
<b>Dureza Vickers - (HV)</b>	636	4550	3250	798	950	735	2950	735
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	7782	3510	2493	2994	3180	2013	3437	1820
<b>Preço (BRL/kg)</b>	22	2095000	14593	61549	88450	476	94079	132

### 5.2.2. Segunda execução

Durante a segunda execução do algoritmo, o maior valor obtido do *Silhouette Score* foi de 0,355 para 4 *clusters*, tal como descrito na **Tabela 12**. A queda drástica do valor do *Silhouette Score* se dá devido ao executar o algoritmo utilizando materiais semelhantes, a distância entre os clusters irá diminuir, resultando em um *score* menor.

*Tabela 12 Valor do Silhouette Score referente a quantidade de clusters para a segunda execução do algoritmo*

Quantidade de <i>clusters</i>	<i>Silhouette Score</i>
3	0,290
4	0,355
5	0,323
6	0,341
7	0,354
8	0,289

A **Tabela 13** contém a média das propriedades dos materiais presentes em cada *cluster*. Destaca-se que o *cluster 1* possui materiais com boas propriedades e baixo preço de modo que poderiam ser utilizados caso as restrições impostas fossem diferentes.

*Tabela 13 Média das propriedades dos materiais de cada Cluster*

Propriedade	Número do Cluster			
	0	1	2	3
Quantidade de Materiais	21	13	2	1
Módulo de elasticidade (GPa)	210	205	210	226
Limite de escoamento (MPa)	2002	1729	1540	2630
Limite de resistência à tração (MPa)	2251	1945	1750	2815

<b>Módulo de cisalhamento (GPa)</b>	82	79	78	88
<b>Dureza Vickers - (HV)</b>	646	604	578	960
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	7759	7813	7805	7820
<b>Preço (BRL/kg)</b>	16	10	143	70

### 5.2.3. Terceira execução

Durante a segunda execução do algoritmo, o maior valor obtido do *Silhouette Score* foi de 0,268 para 3 *clusters*, como descrito na **Tabela 14**. Como o valor do *Silhouette Score* obtido foi muito baixo, decidiu-se não realizar a seleção de um cluster específico e utilizar outro método para diminuir o escopo.

*Tabela 14 Valor do Silhouette Score referente a quantidade de clusters para a segunda execução do algoritmo*

<b>Quantidade de clusters</b>	<b>Silhouette Score</b>
3	0,268
4	0,209
5	0,227
6	0,205
7	0,220
8	0,217

A **Tabela 15** contém a média das propriedades dos materiais presentes em cada *cluster*. Nota-se a dificuldade do algoritmo em segregar os materiais, conforme o aumento do número de execuções.

*Tabela 15 Média das propriedades dos materiais de cada Cluster*

<b>Propriedade</b>	<b>Número do Cluster</b>		
	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>2</b>
<b>Quantidade de Materiais</b>	2	16	3
<b>Módulo de elasticidade (GPa)</b>	213,8	209,8	210,8
<b>Limite de escoamento (MPa)</b>	1715,0	2016,3	2120,0
<b>Limite de resistência à tração (MPa)</b>	2097,5	2253,4	2341,7
<b>Módulo de cisalhamento (GPa)</b>	83,0	81,3	81,7
<b>Dureza Vickers - (HV)</b>	485,0	661,3	671,7
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	7775,0	7770,6	7688,3
<b>Preço (BRL/kg)</b>	18,0	13,3	28,2

#### 5.2.4. Escolhendo os melhores materiais

Para realizar a escolha dos melhores materiais, foram aplicados dois filtros nos materiais utilizados na terceira execução do algoritmo: o preço médio do material deveria ser menor que 20 BRL/kg e sua densidade média deveria ser menor do que a do aço cromo vanádio, ou seja, um valor menor que 7800 kg/m<sup>3</sup>. O resultado pode ser observado nos materiais presentes na **Tabela 16**.

*Tabela 16 Materiais selecionados através do uso do K-means*

Nome do material	Propriedades		
	Módulo de elasticidade (GPa)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	Preço (BRL/kg)
Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)	211,5	7680	14,9
Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)	211,5	7785	18,85
Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)	205	7665	11,95
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	7695	11,9
Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)	209,5	7795	12,1
Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)	210	7765	13,45
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	7700	16,05
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	210,5	7700	12,05
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	7700	15,25
Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)	216	7765	17,1

### 5.3. COMPARANDO OS RESULTADOS OBTIDOS

#### 5.3.1. Materiais em comum

É possível observar na **Tabela 17** que ambos os métodos, de Ashby e K-means, encontraram quatro materiais semelhantes para tal aplicação, indicando o potencial do uso do algoritmo para a seleção de materiais.

Em ambas as metodologias foram obtidos como resultado final ligas de aços

ferramenta, aos quais variam sua composição e tratamento térmico. Tais aços são utilizados para a fabricação de ferramentas manuais ou matrizes de máquinas (“Aços Ferramenta: Tudo o que você precisa saber! » Aços Nobre em Sorocaba”, [S.d.]).

*Tabela 17 Materiais resultantes da seleção através do uso do algoritmo K-means e do Método de Ashby*

<b>Nome do Material</b>	<b>Método</b>		<b>Resultado</b>
	Ashby	K-means	Ambos
<i>Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)</i>	Não	Sim	Não
<i>Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)</i>	Sim	Não	Não
<i>Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)</i>	Não	Sim	Não
<i>Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)</i>	Não	Sim	Não
<i>Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)</i>	Sim	Sim	Sim
<i>Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)</i>	Sim	Não	Não
<i>Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)</i>	Não	Sim	Não
<i>Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)</i>	Não	Sim	Não
<i>Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)</i>	Sim	Sim	Sim
<i>Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)</i>	Sim	Sim	Sim

<i>Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)</i>	Sim	Sim	Sim
<i>Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)</i>	Sim	Não	Não
<i>Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)</i>	Sim	Não	Não
<i>Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)</i>	Não	Sim	Não
<i>Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)</i>	Sim	Não	Não
<i>Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)</i>	Sim	Não	Não

### 5.3.2. Vantagens K-Means

Durante o decorrer do uso do algoritmo foi possível observar algumas vantagens do K-means quando comparado ao método de Ashby:

- (i) A primeira vantagem consiste na ausência do cálculo dos índices de mérito, possibilitando o uso do algoritmo para usuários com baixo conhecimento na área de mecânica dos sólidos. Tal fato, também dispensa o conhecimento sobre mapas de seleção de materiais, pois não haveria índice de mérito a ser maximizado ou minimizado.
- (ii) O segundo benefício consiste em poder-se avaliar múltiplas propriedades ao mesmo tempo, enquanto o método de Ashby se limita a analisar duas variáveis por mapa, resultando em um melhor método a ser utilizado na etapa de triagem.
- (iii) O terceiro benefício está relacionado ao fato que o algoritmo possui a capacidade de separar grupos de materiais similares através dos valores de suas propriedades. Tal capacidade possibilita encontrar facilmente um grupo de materiais que possa satisfazer as restrições e objetivos do projeto. Como neste trabalho foi realizado uma micro-seleção, é necessário realizar

mais estudos para verificar como o k-means se comporta com diferentes famílias de materiais envolvidas na seleção.

### 5.3.3. Desvantagens

Por mais que o algoritmo *k-means* possua diversas vantagens sobre o método de Ashby, há alguns pontos negativos que devem ser destacados:

- (i) O primeiro ponto é que o método atua na etapa de classificação. Desta maneira, é necessário realizar a etapa de tradução do método de Ashby para que sejam estabelecidas as restrições, variáveis-livres e objetivos do projeto.
- (ii) Em segundo lugar, com o avanço da seleção de *clusters* ocorre um aumento na dificuldade de o algoritmo conseguir separar os materiais em diferentes *clusters*, devido ao aumento da semelhança entre os materiais. Tal fato pode ser notado através da queda do *Silhouette Score* ocorrida devido à queda da distância *intercluster* e *intracluster* com o avanço do processo, indicando que os *clusters* estão muito próximos, podendo-se concluir que se chegou à limitação dos resultados do algoritmo quando o valor do *Silhouette Score* estiver próximo de zero.
- (iii) Por último, assim como o método de Ashby quando utilizado com múltiplos índices de mérito, o K-means não define qual o melhor material a ser aplicado no projeto. Desta maneira, é necessário utilizar um método complementar (AHP, TOPSIS, entre outros) para finalizar a seleção.

## 6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foram realizados a seleção de materiais para uma chave de fenda, utilizando o método de Ashby e o algoritmo de clusterização K-means.

Realizado a seleção pelo método de Ashby, foi criada uma lista com os materiais resultantes na etapa de triagem do Método de Ashby e utilizadas as suas propriedades para treinar um algoritmo utilizando *K-means*. Após a execução do algoritmo foram selecionados os *clusters* que melhor se enquadravam nos requisitos e, em seguida, realizado o treinamento novamente com os materiais presentes em tais *clusters*. Em seguida, aplicou-se as devidas restrições para chegar em um conjunto de materiais.

A partir dos resultados obtidos em ambos os processos, foi possível verificar a possibilidade do uso do algoritmo de clusterização K-means como uma alternativa à etapa de classificação do método de Ashby. A capacidade do algoritmo em agrupar materiais com propriedades semelhantes pode ser útil em diversos casos além da seleção de materiais.

O fato de o K-means poder trabalhar com diversas variáveis ao mesmo tempo, o torna extremamente vantajoso, pois complementa uma das principais desvantagens do método de Ashby que consiste em trabalhar apenas com duas variáveis por mapa de propriedades.

A desvantagem encontrada da diminuição do Silhouette Score, pode ser interpretada de outra maneira, quando se atenta ao fato de que quanto mais próximo estiver de zero, menor será a distância entre os *clusters*, indicando um possível valor limite que pode ser utilizado para a diferenciação dos materiais.

Para estudos futuros, é sugerido utilizar outros métodos de clusterização: clusterização baseada em densidades, clusterização baseada em distribuições e clusterização hierárquica. Uma segunda sugestão seria aplicar a técnica de clusterização k-means em outros casos de seleção de materiais, a fim de validar o potencial do algoritmo.



## REFERÊNCIAS

**Aços Ferramenta: Tudo o que você precisa saber! » Aços Nobre em Sorocaba.** Disponível em: <<https://acosnobre.com.br/blog/acos-ferramenta-matrizes-corte-trabalho-a-frio-tipos/>>. Acesso em: 28 fev 2023.

ALMEIDA, Adriano e CARVALHO, Felipe e MENINO, Felipe. **1 Introdução | Introdução ao Machine Learning.** Disponível em: <<https://dataat.github.io/introducao-ao-machine-learning/introdu%C3%A7%C3%A3o.html#machine-learning>>. Acesso em: 9 fev 2023.

ASHBY, M F. **Materials Selection in Mechanical Design.** [S.l.]: Elsevier Science, 2004. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=5q24vUQBD44C>>.

**ASTM A231 Chromium-Vanadium Spring Steel :: MakeltFrom.com.** Disponível em: <<https://www.makeitfrom.com/material-properties/ASTM-A231-Chromium-Vanadium-Spring-Steel>>. Acesso em: 4 fev 2023.

BRECHET, Y e colab. **Challenges in materials and process selection.** . [S.l.: s.n.], 2001. Disponível em: <[www.elsevier.com/locate/pmatsci](http://www.elsevier.com/locate/pmatsci)>.

ÇALIŞKAN, Halil e colab. **Material selection for the tool holder working under hard milling conditions using different multi criteria decision making methods.** Materials and Design, v. 45, p. 473–479, 2013.

**Chave de Fenda Ponta Chata em Aço Cromo Vanádio 3x50 mm (1/8x2") Tramontina PRO | Tramontina.** Disponível em: <<https://www.tramontina.com.br/p/44130009-467-chave-de-fenda-ponta-chata-em-aco-cromo-vanadio-3x50-mm-18x2-tramontina-pro>>. Acesso em: 29 jan 2023.

**Clustering in Machine Learning - GeeksforGeeks.** Disponível em: <<https://www.geeksforgeeks.org/clustering-in-machine-learning/>>. Acesso em: 28 jan 2023.

DAY, Richard e REZNIK, S. V. e GLYNDŴR UNIVERSITY. **Proceedings of the Second International Workshop on Advanced Composite Materials and Technologies for Aerospace Applications, Wrexham United Kingdom, June 11-13, 2012.** [S.l.]: North East Wales Institute, 2012.

**Designation: A 231/A231M-96 (Reapproved 2002) Standard Specification**

**for Chromium-Vanadium Alloy Steel Spring Wire 1.** . [S.l: s.n.], 2022.

DHANACHANDRA, Nameirakpam e MANGLEM, Khumanthem e CHANU, Yambem Jina. Image Segmentation Using K-means Clustering Algorithm and Subtractive Clustering Algorithm. 2015, [S.l.]: Elsevier, 2015. p. 764–771.

DURYAT, R S. The screwdriver: A basic review on design and material selection. 2020, [S.l.]: AIP Publishing LLC, 2020. p. 040005.

EL KHEDIRI, Salim e colab. **Improved node localization using K-means clustering for Wireless Sensor Networks.** Computer Science Review. [S.l.]: Elsevier Ireland Ltd. , 1 Ago 2020

GÉRON, A. **Hands-on Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems.** [S.l.]: O'Reilly Media, Incorporated, 2019. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=OCS1twEACAAJ>>.

GOVENDER, P. e SIVAKUMAR, V. **Application of k-means and hierarchical clustering techniques for analysis of air pollution: A review (1980–2019).** Atmospheric Pollution Research. [S.l.]: Elsevier B.V. , 1 Jan 2020

**ISO 2380-1 Assembly tools for screws and nuts-Screwdrivers for slotted-head screws-Part 1: Tips for hand-and machine-operated screwdrivers.** . [S.l: s.n.], 2004. Disponível em: <<https://standards.iteh.ai/catalog/standards/sist/aaa2f0cae683-4254-9822->>.

**k-means clustering and Voronoi sets | Freakonometrics.** Disponível em: <<https://freakonometrics.hypotheses.org/19156>>. Acesso em: 28 jan 2023.

MAHESH, Batta. **Machine learning algorithms-a review.** International Journal of Science and Research (IJSR).[Internet], v. 9, p. 381–386, 2020.

SAXENA, Amit e colab. **A review of clustering techniques and developments.** Neurocomputing, v. 267, p. 664–681, 6 Dez 2017. Acesso em: 9 jan 2023.

WEI, Jing e colab. **Machine learning in materials science.** InfoMat. [S.l.]: Blackwell Publishing Ltd. , 1 Set 2019

YEOMANS, Chris e XU, Jiangjiao. **Introduction to Machine Learning.** Disponível em: <<https://exeter-data-analytics.github.io/MachineLearning/index.html>>. Acesso em: 4 mar 2023.

## APÊNDICE A – TABELAS RESULTANTES DO MÉTODO DE ASHBY

Tabela 18 Valor médio das propriedades selecionadas dos materiais resultantes após a etapa de triagem

Name	Módulo de elasticidade (GPa)	Limite de escoamento (MPa)	Limite de resistência à tração (MPa)	Módulo de cisalhamento (GPa)	Dureza Vickers (HV)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )
Alumina (w)	453	2000	2400	180	2350	3960
Alumina, Nextel 480 (11 micron, f)	224	1900	2275	93	650	3050
Alumina, Nextel 610 (12 micron, f)	385	1900	2200	155	650	3900
Alumina, Saphikon sapphire monocrystal (100 micron, f)	350	2025	2425	138	950	3950
Boron (AVCO 102-200 micron, f)	400	1960	2250	158	900	2515
Borsic (SiC/B/S 100-150 micron, f)	405	3000	3000	158	900	2730
Carbon fibers, high modulus (5 micron, f)	380	2405	2405	170	735	1820
Carbon fibers, high strength (5 micron, f)	243	3875	4600	105	735	1820
Carbon fibers, ultra high modulus (10 micron, f)	760	1835	2350	340	735	2105
Carbon fibers, very high modulus (5 micron, f)	555	1840	2065	235	735	1920

Diamond	1130	2865	2865	455	455 0	3510
High alloy steel, AF1410, solution treated & overaged	208	1560	1705	79	550	7830
Intermediate alloy, Fe-5Cr-Mo-V aircraft steel, quenched & tempered	213	1520	1795	78	605	7780
Low alloy steel, 300M (high carbon), quenched & tempered	205	1670	2030	78	580	7830
Low alloy steel, 300M (low carbon), quenched & tempered	205	1600	1960	78	580	7830
Silicon carbide (140 micron, f)	460	1900	2275	200	325 0	3175
Silicon carbide (p)	465	2290	2750	203	325 0	3175
Silicon carbide (w)	460	5835	7000	200	950	3180
Silicon carbide, Nicalon NL-200 (15 micron, f)	196	2295	2755	79	325 0	2550
Silicon carbide, Nicalon NL-300 (12 micron, f)	196	2455	2945	79	325 0	2555
Silicon carbide, Tyranno M (8.5 micron, f)	198	2375	2850	80	325 0	2375
Stainless steel, martensitic, AISI 420, tempered at 204°C	200	1480	1720	78	565	7700
Stainless steel, martensitic, AISI 440A, tempered at 316°C	200	1655	1790	78	550	7800
Stainless steel, martensitic, AISI 440B, tempered at 316°C	200	1860	1935	78	610	7800
Stainless steel, martensitic, AISI 440C, tempered at 316°C	200	1900	1970	78	640	7800

Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)	212	1910	2140	82	695	7680
Tool steel, AISI A2 (air-hardening cold work)	214	1970	2200	83	715	7865
Tool steel, AISI A6 (air-hardening cold work)	211	2100	2380	82	650	7845
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	213	2170	2385	82	790	7665
Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)	212	1780	2205	82	490	7785
Tool steel, AISI L2, tempered at 205°C (special-purpose)	209	1795	2000	81	625	7865
Tool steel, AISI L6, tempered at 315°C (special-purpose)	210	1795	2000	81	625	7865
Tool steel, AISI O1 (oil-hardening cold work)	190	1970	2200	74	715	7855
Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)	205	1970	2200	79	715	7665
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	2035	2265	81	745	7695
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	212	2075	2300	82	755	7805
Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)	210	2000	2150	81	610	7795
Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)	210	1930	2345	81	771	7765
Tool steel, AISI S6 (shock-resisting)	210	1685	1925	81	615	7755
Tool steel, AISI W2 (water-hardening)	210	1855	2080	81	670	7855

Tool steel, AISI W5 (water-hardening)	210	1855	2080	81	670	7805
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	2075	2300	82	610	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	211	2075	2300	82	610	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	2075	2300	82	610	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	210	2035	2265	82	605	7700
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	210	2155	2375	82	620	7700
Tool steel, chromium alloy, AISI H10 (hot work)	213	1357	1595	83	510	7815
Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)	216	1650	1990	84	480	7765
Tool steel, low carbon, AISI P2 (mold)	209	2075	2300	81	610	7860
Tool steel, low carbon, AISI P3 (mold)	209	2075	2300	81	610	7800
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	210	2075	2300	81	610	7800
Tool steel, low carbon, AISI P5 (mold)	209	1855	2080	81	570	7800
Tool steel, low carbon, AISI P6 (mold)	209	1965	2195	81	595	7850
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	226	2630	2815	88	960	7820

*Tabela 19 Valor obtido dos índices de mérito para cada material*

<b>Nome</b>	<b>IM1</b>	<b>IM2</b>
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	0,021867	0,001902
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	0,020869	0,001879
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	0,020844	0,001863
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	0,021128	0,001882
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	0,021128	0,001884
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	0,021128	0,001882
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	0,020855	0,001882
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	0,021667	0,001882
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	0,020857	0,001858
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	0,024365	0,001920

## APÊNDICE B – TABELAS UTILIZADAS COM K-MEANS

*Tabela 20 Propriedades dos materiais obtidos após a etapa de triagem do método de Ashby*

Nome	Módulo de elasticidade (GPa)	Limite de escoamento (MPa)	Limite de resistência à tração (MPa)	Módulo de cisalhamento (GPa)	Dureza Vickers (HV)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	Preço (BRL/kg)
Alumina (w)	453	2000	2400	180	2350	3960	256000
Alumina, Nextel 480 (11 micron, f)	224	1900	2275	93	650	3050	7635
Alumina, Nextel 610 (12 micron, f)	385	1900	2200	155	650	3900	24000
Alumina, Saphikon sapphire monocrystal (100 micron, f)	350	2025	2425	138	950	3950	316500
Boron (AVCO 102-200 micron, f)	400	1960	2250	158	900	2515	2655
Borsic (SiC/B/S 100-150 micron, f)	405	3000	3000	158	900	2730	18150
Carbon fibers, high modulus (5 micron, f)	380	2405	2405	170	735	1820	354
Carbon fibers, high strength (5 micron, f)	243	3875	4600	105	735	1820	132
Carbon fibers, ultra high modulus (10 micron, f)	760	1835	2350	340	735	2105	632
Carbon fibers, very high modulus (5 micron, f)	555	1840	2065	235	735	1920	320
Diamond	1130	2865	2865	455	4550	3510	2095000

High alloy steel, AF1410, solution treated & overaged	208	1560	1705	79	550	7830	185
Intermediate alloy, Fe-5Cr-Mo-V aircraft steel, quenched & tempered	213	1520	1795	78	605	7780	101
Low alloy steel, 300M (high carbon), quenched & tempered	205	1670	2030	78	580	7830	6
Low alloy steel, 300M (low carbon), quenched & tempered	205	1600	1960	78	580	7830	6
Silicon carbide (140 micron, f)	460	1900	2275	200	3250	3175	26050
Silicon carbide (p)	465	2290	2750	203	3250	3175	187
Silicon carbide (w)	460	5835	7000	200	950	3180	88450
Silicon carbide, Nicalon NL-200 (15 micron, f)	196	2295	2755	79	3250	2550	17700
Silicon carbide, Nicalon NL-300 (12 micron, f)	196	2455	2945	79	3250	2555	17700
Silicon carbide, Tyranno M (8.5 micron, f)	198	2375	2850	80	3250	2375	8380
Stainless steel, martensitic, AISI 420, tempered at 204°C	200	1480	1720	78	565	7700	6
Stainless steel, martensitic, AISI 440A, tempered at 316°C	200	1655	1790	78	550	7800	5
Stainless steel, martensitic, AISI 440B, tempered at 316°C	200	1860	1935	78	610	7800	5
Stainless steel, martensitic, AISI 440C, tempered at 316°C	200	1900	1970	78	640	7800	5
Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)	212	1910	2140	82	695	7680	15

Tool steel, AISI A2 (air-hardening cold work)	214	1970	2200	83	715	7865	14
Tool steel, AISI A6 (air-hardening cold work)	211	2100	2380	82	650	7845	13
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	213	2170	2385	82	790	7665	31
Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)	212	1780	2205	82	490	7785	19
Tool steel, AISI L2, tempered at 205°C (special-purpose)	209	1795	2000	81	625	7865	12
Tool steel, AISI L6, tempered at 315°C (special-purpose)	210	1795	2000	81	625	7865	14
Tool steel, AISI O1 (oil-hardening cold work)	190	1970	2200	74	715	7855	13
Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)	205	1970	2200	79	715	7665	12
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	2035	2265	81	745	7695	12
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	212	2075	2300	82	755	7805	14
Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)	210	2000	2150	81	610	7795	12
Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)	210	1930	2345	81	771	7765	13
Tool steel, AISI S6 (shock-resisting)	210	1685	1925	81	615	7755	13
Tool steel, AISI W2 (water-hardening)	210	1855	2080	81	670	7855	12
Tool steel, AISI W5 (water-hardening)	210	1855	2080	81	670	7805	12

Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	2075	2300	82	610	7700	16
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	211	2075	2300	82	610	7700	12
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	2075	2300	82	610	7700	15
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	210	2035	2265	82	605	7700	25
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	210	2155	2375	82	620	7700	28
Tool steel, chromium alloy, AISI H10 (hot work)	213	1357	1595	83	510	7815	17
Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)	216	1650	1990	84	480	7765	17
Tool steel, low carbon, AISI P2 (mold)	209	2075	2300	81	610	7860	12
Tool steel, low carbon, AISI P3 (mold)	209	2075	2300	81	610	7800	13
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	210	2075	2300	81	610	7800	13
Tool steel, low carbon, AISI P5 (mold)	209	1855	2080	81	570	7800	12
Tool steel, low carbon, AISI P6 (mold)	209	1965	2195	81	595	7850	15
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	226	2630	2815	88	960	7820	70

Tabela 21 Resultados obtidos durante a primeira execução do algoritmo

Nome	Módulo de elasticidade (GPa)	Limite de escoamento (MPa)	Limite de resistência à tração (MPa)	Módulo de cisalhamento (GPa)	Dureza Vickers - (HV)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	Preço (BRL/kg)	Labels
Alumina (w)	452,5	2000	2400	180	2350	3960	256000	6
Alumina, Nextel 480 (11 micron, f)	224	1900	2275	92,5	650	3050	7635	3
Alumina, Nextel 610 (12 micron, f)	385	1900	2200	155	650	3900	24000	3
Alumina, Saphikon sapphire monocrystal (100 micron, f)	350	2025	2425	137,5	950	3950	316500	3
Boron (AVCO 102-200 micron, f)	400	1960	2250	157,5	900	2515	2655	3
Borsic (SiC/B/S 100-150 micron, f)	405	3000	3000	157,5	900	2730	18150	3
Carbon fibers, high modulus (5 micron, f)	380	2405	2405	170	735	1820	353,5	3
Carbon fibers, high strength (5 micron, f)	242,5	3875	4600	105	735	1820	132	7

Carbon fibers, ultra high modulus (10 micron, f)	760	1835	2350	340	735	2105	631,5	5
Carbon fibers, very high modulus (5 micron, f)	555	1840	2065	235	735	1920	319,5	5
Diamond	1130	2865	2865	455	4550	3510	209500 0	1
High alloy steel, AF1410, solution treated & overaged	208	1560	1705	78,95	550	7830	184,5	0
Intermediate alloy, Fe-5Cr-Mo-V aircraft steel, quenched & tempered	212,5	1520	1795	77,95	605	7780	101,1	0
Low alloy steel, 300M (high carbon), quenched & tempered	205	1670	2030	77,95	580	7830	5,545	0
Low alloy steel, 300M (low carbon), quenched & tempered	205	1600	1960	77,95	580	7830	5,52	0
Silicon carbide (140 micron, f)	460	1900	2275	200	3250	3175	26050	6
Silicon carbide (p)	465	2290	2750	202,5	3250	3175	186,5	6
Silicon carbide (w)	460	5835	7000	200	950	3180	88450	4

Silicon carbide, Nicalon NL-200 (15 micron, f)	196	2295	2755	79	3250	2550	17700	2
Silicon carbide, Nicalon NL-300 (12 micron, f)	196	2455	2945	79	3250	2555	17700	2
Silicon carbide, Tyranno M (8.5 micron, f)	197,5	2375	2850	80	3250	2375	8380	2
Stainless steel, martensitic, AISI 420, tempered at 204°C	200	1480	1720	78	565	7700	6,325	0
Stainless steel, martensitic, AISI 440A, tempered at 316°C	200	1655	1790	78	550	7800	5,41	0
Stainless steel, martensitic, AISI 440B, tempered at 316°C	200	1860	1935	78	610	7800	5,41	0
Stainless steel, martensitic, AISI 440C, tempered at 316°C	200	1900	1970	78	640	7800	5,41	0
Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)	211,5	1910	2140	82	695	7680	14,9	0
Tool steel, AISI A2 (air-hardening cold work)	214	1970	2200	83	715	7865	14,25	0
Tool steel, AISI A6 (air-hardening cold work)	210,5	2100	2380	82	650	7845	12,95	0

Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	212,5	2170	2385	82	790	7665	31,35	0
Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)	211,5	1780	2205	82	490	7785	18,85	0
Tool steel, AISI L2, tempered at 205°C (special-purpose)	209	1795	2000	81	625	7865	12,3	0
Tool steel, AISI L6, tempered at 315°C (special-purpose)	209,5	1795	2000	81	625	7865	13,55	0
Tool steel, AISI O1 (oil-hardening cold work)	190	1970	2200	73,5	715	7855	12,5	0
Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)	205	1970	2200	79	715	7665	11,95	0
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	2035	2265	81	745	7695	11,9	0
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	211,5	2075	2300	82	755	7805	14,35	0
Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)	209,5	2000	2150	81	610	7795	12,1	0
Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)	210	1930	2345	81	771	7765	13,45	0

Tool steel, AISI S6 (shock-resisting)	209,5	1685	1925	81	615	7755	13,3	0
Tool steel, AISI W2 (water-hardening)	209,5	1855	2080	81	670	7855	12,45	0
Tool steel, AISI W5 (water-hardening)	209,5	1855	2080	81	670	7805	11,55	0
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	2075	2300	81,5	610	7700	16,05	0
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	210,5	2075	2300	81,5	610	7700	12,05	0
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	2075	2300	81,5	610	7700	15,25	0
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	210	2035	2265	81,5	605	7700	25,2	0
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	210	2155	2375	81,5	620	7700	28	0
Tool steel, chromium alloy, AISI H10 (hot work)	213	1356,5	1595	82,5	510	7815	16,7	0
Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)	216	1650	1990	84	480	7765	17,1	0

Tool steel, low carbon, AISI P2 (mold)	209	2075	2300	81	610	7860	12,25	0
Tool steel, low carbon, AISI P3 (mold)	208,5	2075	2300	81	610	7800	12,7	0
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	210	2075	2300	81	610	7800	13,05	0
Tool steel, low carbon, AISI P5 (mold)	208,5	1855	2080	81	570	7800	11,85	0
Tool steel, low carbon, AISI P6 (mold)	208,5	1965	2195	81	595	7850	14,6	0
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	225,5	2630	2815	87,5	960	7820	69,8	0

Tabela 22 Resultados obtidos durante a segunda execução do algoritmo

Nome do material	Módulo de elasticidade (GPa)	Limite de escoamento (MPa)	Limite de resistência à tração (MPa)	Módulo de cisalhamento (GPa)	Dureza Vickers - (HV)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	Preço (BRL/kg)	La be ls
High alloy steel, AF1410, solution treated & overaged	208	1560	1705	78,95	550	7830	184,5	0
Intermediate alloy, Fe-5Cr-Mo-V aircraft steel, quenched & tempered	212,5	1520	1795	77,95	605	7780	101,1	0
Low alloy steel, 300M (high carbon), quenched & tempered	205	1670	2030	77,95	580	7830	5,545	3
Low alloy steel, 300M (low carbon), quenched & tempered	205	1600	1960	77,95	580	7830	5,52	3
Stainless steel, martensitic, AISI 420, tempered at 204°C	200	1480	1720	78	565	7700	6,325	3
Stainless steel, martensitic, AISI 440A, tempered at 316°C	200	1655	1790	78	550	7800	5,41	3
Stainless steel, martensitic, AISI 440B, tempered at 316°C	200	1860	1935	78	610	7800	5,41	3
Stainless steel, martensitic, AISI 440C, tempered at 316°C	200	1900	1970	78	640	7800	5,41	3

Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)	211,5	1910	2140	82	695	7680	14,9	2
Tool steel, AISI A2 (air-hardening cold work)	214	1970	2200	83	715	7865	14,25	1
Tool steel, AISI A6 (air-hardening cold work)	210,5	2100	2380	82	650	7845	12,95	1
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	212,5	2170	2385	82	790	7665	31,35	2
Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)	211,5	1780	2205	82	490	7785	18,85	6
Tool steel, AISI L2, tempered at 205°C (special-purpose)	209	1795	2000	81	625	7865	12,3	1
Tool steel, AISI L6, tempered at 315°C (special-purpose)	209,5	1795	2000	81	625	7865	13,55	1
Tool steel, AISI O1 (oil-hardening cold work)	190	1970	2200	73,5	715	7855	12,5	4
Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)	205	1970	2200	79	715	7665	11,95	2
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	2035	2265	81	745	7695	11,9	2

Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	211,5	2075	2300	82	755	7805	14,35	1
Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)	209,5	2000	2150	81	610	7795	12,1	1
Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)	210	1930	2345	81	771	7765	13,45	2
Tool steel, AISI S6 (shock-resisting)	209,5	1685	1925	81	615	7755	13,3	6
Tool steel, AISI W2 (water-hardening)	209,5	1855	2080	81	670	7855	12,45	1
Tool steel, AISI W5 (water-hardening)	209,5	1855	2080	81	670	7805	11,55	1
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	2075	2300	81,5	610	7700	16,05	2
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	210,5	2075	2300	81,5	610	7700	12,05	2
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	2075	2300	81,5	610	7700	15,25	2
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	210	2035	2265	81,5	605	7700	25,2	2

Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	210	2155	2375	81,5	620	7700	28	2
Tool steel, chromium alloy, AISI H10 (hot work)	213	1356,5	1595	82,5	510	7815	16,7	6
Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)	216	1650	1990	84	480	7765	17,1	6
Tool steel, low carbon, AISI P2 (mold)	209	2075	2300	81	610	7860	12,25	1
Tool steel, low carbon, AISI P3 (mold)	208,5	2075	2300	81	610	7800	12,7	1
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	210	2075	2300	81	610	7800	13,05	1
Tool steel, low carbon, AISI P5 (mold)	208,5	1855	2080	81	570	7800	11,85	1
Tool steel, low carbon, AISI P6 (mold)	208,5	1965	2195	81	595	7850	14,6	1
Tool steel, molybdenum alloy, AISI M46 (high speed)	225,5	2630	2815	87,5	960	7820	69,8	5

Tabela 23 Resultados obtidos durante a terceira execução do algoritmo

Nome do material	Módulo de elasticidade (GPa)	Limite de escoamento (MPa)	Limite de resistência à tração (MPa)	Módulo de cisalhamento (GPa)	Dureza Vickers - (HV)	Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	Preço (BRL/kg)	Labels
Tool steel, AISI A10 (air-hardening cold work)	211,5	1910	2140	82	695	7680	14,9	1
Tool steel, AISI A2 (air-hardening cold work)	214	1970	2200	83	715	7865	14,25	1
Tool steel, AISI A6 (air-hardening cold work)	210,5	2100	2380	82	650	7845	12,95	1
Tool steel, AISI A7 (air-hardening cold work)	212,5	2170	2385	82	790	7665	31,35	2
Tool steel, AISI A9 (air-hardening cold work)	211,5	1780	2205	82	490	7785	18,85	0
Tool steel, AISI O2 (oil-hardening cold work)	205	1970	2200	79	715	7665	11,95	1
Tool steel, AISI O6 (oil-hardening cold work)	209	2035	2265	81	745	7695	11,9	1
Tool steel, AISI O7 (oil-hardening cold work)	211,5	2075	2300	82	755	7805	14,35	1

Tool steel, AISI S2 (shock-resisting)	209,5	2000	2150	81	610	7795	12,1	1
Tool steel, AISI S5, tempered at 205°C (shock-resisting)	210	1930	2345	81	771	7765	13,45	1
Tool steel, AISI W5 (water-hardening)	209,5	1855	2080	81	670	7805	11,55	1
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D2 (cold work)	210	2075	2300	81,5	610	7700	16,05	1
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D3 (cold work)	210,5	2075	2300	81,5	610	7700	12,05	1
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D4 (cold work)	210	2075	2300	81,5	610	7700	15,25	1
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D5 (cold work)	210	2035	2265	81,5	605	7700	25,2	2
Tool steel, chromium alloy high carbon, AISI D7 (cold work)	210	2155	2375	81,5	620	7700	28	2
Tool steel, chromium alloy, AISI H13 (hot work)	216	1650	1990	84	480	7765	17,1	0
Tool steel, low carbon, AISI P2 (mold)	209	2075	2300	81	610	7860	12,25	1

Tool steel, low carbon, AISI P3 (mold)	208,5	2075	2300	81	610	7800	12,7	1
Tool steel, low carbon, AISI P4 (mold)	210	2075	2300	81	610	7800	13,05	1
Tool steel, low carbon, AISI P6 (mold)	208,5	1965	2195	81	595	7850	14,6	1