# Metodologia de Pesquisa para Modelagem de Propriedades Mecânicas de Aços

Douglas M. Sgrott<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Computação – Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC)

Joinville – SC – Brazil

doug.sgrott@gmail.com

Resumo. Este artigo visa apresentar alguns dos aspectos metodológicos que servirão para amparar a execução de uma pesquisa científica. O propósito da pesquisa é o estudo e consequente criação de modelos computacionais de predição de propriedades mecânicas de aços. Ao longo do presente artigo, serão detalhados aspectos relacionados ao objetivo geral da pesquisa, seu raciocínio lógico, procedimento de coleta de dados e as variáveis envolvidas em sua execução.

## 1. Introdução

Devido ao aço ser um material amplamente usado nas mais diversas indústrias, existe uma crescente necessidade pelo desenvolvimento de aços com características e propriedades mais especializadas, e que seja factível de ser produzido nas linhas operacionais já existentes.

Entretanto, a complexidade das linhas operacionais metalúrgicas, somadas com as diversas variáveis que participam na elaboração do aço, tornam extremamente trabalhosa a modelagem universal de suas propriedades mecânicas. Além de diversos fatores como lacunas do entendimento científico, simplificações matemáticas e suposições empíricas contribuírem para a redução da assertividade de uma modelagem fenomenológica, devido a contextos específicos estes modelos podem não corresponder com outras linhas de produção, fazendo com que seja necessário replicar todo o trabalho já realizado para cada cenário industrial.

Assim, a área da Inteligência Computacional, através de abordagens que empregam o uso de dados para a modelagem fenomenológica [Shen et al. 2019], têm o potencial de servirem como complementos no desenvolvimento de aços. Entretanto, devido a grande variedade de técnicas de modelagem computacional, se faz necessário uma distinção acerca de uma métrica comum e outros aspectos específicos de cada modelo.

Portanto o presente trabalho visa especificar um método para servir de amparo à pesquisa científica relativa ao desenvolvimento de um modelo fenomenológico das propriedades de aços, focando em abordagens baseada em dados, assim como sua análise.

## 2. Metodologia de Pesquisa

Nesta seção será apresentada a metodologia na qual será realizada a pesquisa, citando também as definições e as justificativas consideradas em sua elaboração.

# 2.1. Objetivo Geral

Como o objetivo geral da pesquisa é o estudo e modelagem computacional de certas propriedades mecânicas de aços utilizando dados coletados, é necessário uma abordagem sistemática para obter métricas de desempenho de diferentes modelos computacionais de modo a descrever e comparar suas devidas performances.

Além disto, além da métrica compartilhada entre os diferentes modelos computacionais, o corpo de conhecimento da área da ciência de dados permite a utilização de métodos que visam interpretar e esclarecer os resultados da modelagem [Lundberg and Lee 2017]. Sendo assim, a presente pesquisa tem como maior potencial de contribuição científica uma análise que visa não apenas comparar mas descrever o peso e influência das variáveis de entrada sob as variáveis de saída.

Portanto, a presente pesquisa se enquadra na classificação de pesquisa descritiva, que segundo [Gil 2010], tem como objetivo primordial a descrição das características de determinada população ou fenômeno ou, então, o estabelecimento de relações entre variáveis. No contexto da pesquisa, os fenômenos são os modelos computacionais e as variáveis os dados de entrada e saída do modelo computacional.

Como auxílio, será definido como hipótese para cada técnica de modelagem se seu emprego é viável dentro do contexto da pesquisa de acordo com uma métrica referente a sua assertividade. Isto é, se a técnica consegue modelar com boa verissimilhança os dados, ela é analisada de maneira quantitativa de acordo com sua métrica e de maneira descritiva utilizando o atual progresso de técnicas de interpretação de dados e/ou modelos. Pretende-se desta forma analisar os pontos fracos e fortes de modelos que apresentam diferentes recursos e níveis de complexidade.

### 2.2. Nível de Maturidade

Devido a utilização de modelos computacionais baseada em dados não ser novidade no tema da presente pesquisa [Dutta et al. 2019, Shen et al. 2019], surge a possibilidade de reconhecer o corpo de trabalho já constituído na área, identificando frentes de trabalho promissoras. Portanto, é possível comparar diferentes técnicas empregadas na modelagem para estabelecer, através de uma métrica compartilhada, sua eficácia. Porém, segundo [Wazlawick 2008], a ausência de banco de dados (benchmark) internacionalmente aceito torna necessária a criação e condução dos testes que demonstram a superioridade de uma nova técnica proposta. Devido a ausência de benchmarks relacionado ao tema da presente pesquisa e ao corpo de trabalho já estabelecido, conclui-se que o nível de maturidade da pesquisa segue o estilo de "Apresentação de algo Presumivelmente Melhor" [Wazlawick 2008].

# 2.3. Raciocínio Lógico

A indução é um raciocínio lógico no qual dados particulares suficientemente constatados, são utilizados para inferir uma verdade geral ou universal, não contida nas partes examinadas. Ou seja, o objetivo dos argumentos é levar a conclusões cujo conteúdo é muito mais amplo do que as premissas nas quais se basearam.

Além disso, segundo [Marconi and Lakatos 1992], o argumento indutivo se fundamenta em premissas que conduzem a conclusões prováveis de serem verdadeiras, e não necessariamente verdadeiras como no caso do argumento dedutivo.

Devido a todos estes fatores, considera-se que a presente pesquisa se enquadra na categoria de raciocínio lógico indutivo devido ao objetivo de estudar técnicas de modelagem computacional distintas umas das outras, cada uma com suas peculiaridades. Da mesma forma, o objetivo de entender o corpo de conhecimento da área e realizar uma análise comparativa destes modelos viabiliza a síntese de um conhecimento mais amplo dentro do contexto da pesquisa.

A indução considera três elementos fundamentais:

- 1. Observação dos fenômenos observação de fatos ou fenômenos e sua análise, com a finalidade de descobrir as causas de sua manifestação.
- 2. Descoberta da relação entre eles por intermédio da comparação, aproximar os fatos ou fenômenos com a finalidade de descobrir a relação constante existente entre eles.
- 3. Generalização da relação generalizar a relação encontrada entre os fenômenos e fatos semelhantes, muitos dos quais ainda não observamos (e inclusive inobserváveis)

No contexto da pesquisa, os fenômenos correspondem aos modelos computacionais, que serão analisados e relacionados entre si por meio da comparação e generalizados acerca da possibilidade de modelar de maneira efetiva as propriedades mecânicas de aços.

#### 2.4. Procedimento de Coleta

O procedimento de coleta de dados seguirá o formato experimental, parte do processo que consiste em determinar um objeto de estudo, selecionar as variáveis que seriam capazes de influenciá-lo, definir as formas de controle e de observação dos efeitos que a variável produz no objeto [Gil 2010].

A coleta ocorrerá na medida em que diferentes modelos computacionais são criados e avaliados, gerando métricas acerca de sua eficácia. Estas métricas, comuns a todos os modelos, serão coletados e comparados. Isto corresponde com a definição proposta em [Gil 2010] onde a coleta de dados na pesquisa experimental é realizada manipulando certas condições e observando os efeitos produzidos.

#### 2.5. Influência das Variáveis

Segundo [Wazlawick 2010], a pesquisa experimental se caracteriza pela manipulação de um aspecto da realidade pelo pesquisador. Isto implica na existência de uma ou mais variáveis que possam ser controladas pelo pesquisador, uma ou mais variáveis observadas. A categorização destas variáveis são fundamentais para a utilização de técnicas de amostragem e testes de hipóteses para que os resultados da pesquisa experimental seja estatisticamente aceito ou generalizável.

Utilizando a nomenclatura de [Marconi and Lakatos 1992] denominaremos como variáveis independentes as causas de efeitos que possam ser controladas, variáveis dependentes como observações consequentes destes efeitos e variáveis intervenientes como causas de efeitos que não são controladas.

Neste contexto, a presente pesquisa assume duas etapas diferentes de classificação das variáveis:

Em uma primeira etapa (podendo ser denominada etapa de treino ou etapa de geração), será verificado se uma técnica é de fato apta a ser empregada para a modelagem computacional do problema (hipótese). Os dados de entradas do modelo computacional (composição química, temperatura, etc) são tidas como intervenientes, por afetarem diretamente modelagem computacional mas serem inicialmente constantes (um mesmo conjunto de dados já definido e pré-processado). As saídas deste modelo computacional são variáveis dependentes. Já as variáveis independentes seriam os parâmetros do algoritmo que influenciam diretamente na modelagem computacional e que são específicos de cada algoritmo.

Caso a hipótese de que a técnica utilizada gera algum modelo cuja eficácia justifica sua empregabilidade, a análise do modelo computacional gerado é detalhado. Nesta segunda etapa (etapa de análise), por simplicidade, os parâmetros do algoritmo são congelados, e as variáveis de entrada do modelo computacional são tidas como independentes. Desta forma, com um modelo que é hipoteticamente válido, se estuda os efeitos das variáveis de entrada sob as variáveis de saída, descrevendo como elas se relacionam.

O motivo da criação destas duas etapas serve para desenvolver um ambiente, que segundo [Gil 2010], deverá proporcionar as condições para que se possa manipular a variável independente (dados de entrada na segunda etapa) e verificar seus efeitos nos sujeitos (dados de saída). Ou seja, para garantir de que um modelo computacional seja válido e comparado com outros modelos, é necessário aceitar a hipótese e garantir que seus parâmetros estejam minimamente ajustados e/ou otimizados para reduzir tendências estocásticas provenientes da geração do modelo.

#### 2.6. Natureza e Forma das Variáveis

As variáveis de entrada-saída que serão utilizadas para a modelagem computacional das propriedades mecânicas dos aços são todas numéricas, contínuas e cardinais. Estas variáveis são provenientes da medição de diferentes aspectos relacionados a produção do aço, podendo ser dividida em quatro grupos: Variáveis de composição química, de laminação a frio, laminação a quente e do forno de galvanização.

Um segundo conjunto de variáveis serão utilizadas para a análise dos resultados obtidos do modelo computacional, sendo elas qualitativas categóricas, provenientes da classificação do aço por um especialista após sua manufatura, assim como quantitativas, contínuas e cardinais, referentes a algum aspecto estatístico dos dados de entrada.

#### 2.7. Grau de Controle

O grau de controle pelo qual as variáveis e suas influências serão estudadas seguirá um plano experimental fatorial, que consiste, basicamente, em utilizar duas, ou três, ou mais variáveis independentes, simultaneamente, para estudar seus efeitos conjuntos ou separados em uma variável dependente [Gil 2010].

Será definido um plano experimental fatorial para a etapa de validação do modelo computacional. O plano testará um conjunto de variáveis independentes (neste caso parâmetros do algoritmo) para verificar se a técnica empregada consegue modelar os dados de entrada (composição química, temperatura, etc) em relação aos dados de saída (propriedade mecânica). Caso a hipótese seja validada, este conjunto de parâmetros do algoritmos se tornam as variáveis intervenientes na segunda etapa, criando um ambiente

conhecido e replicável que permite que a influência dos dados de entrada sejam estudadas e descritas.

#### 2.8. Outros conceitos

Além destes pontos, podemos descrever a pesquisa como fruto de uma ciência dura, pois segundo [Wazlawick 2010], seriam aquelas que usam de rigor científico em suas observações, experimentos e deduções, itens presentes na presente pesquisa.

É também uma pesquisa empírica por estar diretamente fundamentada no estudo de observações, se conciliando com a definição apresentada por [Wazlawick 2010] de ser estudos sobre os fenômenos que ocorrem no mundo real e por obrigatoriamente fazer uso de observações para fundamentar suas descobertas.

Por fim, pode ser considerada uma pesquisa em um contexto de ciências aplicadas, visando a realização de descobertas que possam ser imediatamente aplicadas a algum processo industrial ou situação prática [Wazlawick 2010].

#### References

- Dutta, T., Dey, S., Datta, S., and Das, D. (2019). Designing dual-phase steels with improved performance using ANN and GA in tandem. *Computational Materials Science*, 157(October 2018):6–16.
- Gil, A. C. (2010). *Como Elaborar Projetos de Pesquisa*. Editora: São Paulo Atlas, 5 edition.
- Lundberg, S. M. and Lee, S.-I. (2017). A unified approach to interpreting model predictions. In Guyon, I., Luxburg, U. V., Bengio, S., Wallach, H., Fergus, R., Vishwanathan, S., and Garnett, R., editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 30*, pages 4765–4774. Curran Associates, Inc.
- Marconi, M. d. A. and Lakatos, E. M. (1992). *Metodologia Científica*. Editora: Atlas S.A., 2 edition.
- Shen, C., Wang, C., Wei, X., Li, Y., van der Zwaag, S., and Xu, W. (2019). Physical metallurgy-guided machine learning and artificial intelligent design of ultrahighstrength stainless steel. *Acta Materialia*, 179:201–214.
- Wazlawick, R. (2008). *Metodologia de Pesquisa para Ciência da Computação*. Editora: Elsevier.
- Wazlawick, R. S. (2010). Uma reflexão sobre a pesquisa em ciência da computação à luz da classificação das ciências e do método científico. *Revista de Sistemas de Informação da FSMA*, 6:3–10.