

PAULA ARANTES RIBEIRO

Métodos de aprendizado de máquina para previsão de pontos críticos de equilíbrio em ligas multi-componente

São Paulo
2018

PAULA ARANTES RIBEIRO

Métodos de aprendizado de máquina para previsão de pontos críticos de equilíbrio em ligas multi-componente

Trabalho de formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de
Engenheira

São Paulo
2018

PAULA ARANTES RIBEIRO

Métodos de aprendizado de máquina para previsão de pontos críticos de equilíbrio em ligas multi-componente

Trabalho de formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de
Engenheira

Área de concentração:
Engenharia de Materiais

Orientador:
Prof. Dr. Hélio Goldenstein

Co-orientador:
Dr. Arthur Seiji Nishikawa

São Paulo
2018

Catálogo-na-publicação

Ribeiro, Paula Arantes

Métodos de aprendizado de máquina para previsão de pontos críticos de equilíbrio em ligas multi-componente / Ribeiro, P. A. --São Paulo, 2018.
47 p.

Trabalho de formatura - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Metalúrgica e de Materiais.

1. Aço 2. Termodinâmica 3. Aprendizado de máquina 4. Regressão 5. Redes neurais I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Metalúrgica e de Materiais II. t.

RESUMO

A proposta deste trabalho é avaliar diferentes algoritmos de aprendizado de máquina para prever temperaturas críticas de transformações de fases. O banco de dados utilizado neste estudo foi gerado a partir de cálculos de termodinâmica computacional utilizando o software Thermo-Calc. Até o momento, a etapa de criação de um banco de dados que represente as composições químicas de aços de engenharia foi realizada com sucesso. A comparação dos dados das temperaturas com equações empíricas para predição das temperaturas A1 e A3 mostra que, embora qualitativamente tanto os dados obtidos no presente trabalho quanto as equações da literatura apresentem tendências semelhantes, quantitativamente a correlação não é precisa.

Palavras-chave: Aço. Termodinâmica. Temperaturas críticas. Aprendizado de máquina. Regressão. Redes neurais.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	Diagrama de equilíbrio ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)	13
Figura 2	Diagrama de fases metaestável ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)	14
Figura 3	Diagrama de fases Fe-C para aço 1% Mn, em massa	15
Figura 4	Fração molar de fase versus Temperatura para aço 0,1%C 1% Mn, em massa	16
Figura 5	Fração molar de fase versus Temperatura para aço 0,727%C 1% Mn, em massa	17
Figura 6	Fração molar de fase versus Temperatura para aço 1%C 1% Mn, em massa	18
Figura 7	Classificação dos domínios- γ sob influência dos elementos de liga: a) aberto; b) expandido; c) fechado; d) contraído. (HONEYCOMBE, 1982)	21
Figura 8	Determinação gráfica das temperaturas críticas em aço (a) hipoeutetóide, (b) eutetóide e (c) hipoeutetóide, a partir de dados do dilatômetro (PAWLOWSKI, 2012)	22
Figura 9	Arquitetura da rede neural	24
Figura 10	Operações em um único neurônio (SKALSKI, 2017)	25
Figura 11	Extração de temperaturas críticas para aço hipoeutetóide	31
Figura 12	Extração de temperaturas críticas para aço hipereutetóide	32
Figura 13	Extração de temperaturas críticas para aço hipoeutetóide sem cementita	32
Figura 14	Gráfico de temperatura crítica calculada pela equação empírica de Andrews e temperatura crítica do banco de dados	33
Figura 15	Valores preditos x Valores esperados da regressão linear de A1, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores	35
Figura 16	Valores preditos x Valores esperados da regressão linear de A1', para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores	36
Figura 17	Valores preditos x Valores esperados da regressão linear de A3, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores	36

Figura 18	Erro quadrático médio x Número de neurônios na camada intermediária para (a) Taxa de aprendizado = 0.1, (b) Taxa de aprendizado = 0.01, (c) Taxa de aprendizado = 0.001	38
Figura 19	Perda (erro quadrático médio) x Número de iterações para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária	39
Figura 20	Valores Preditos x Valores Esperados para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária. • : valores de treino, Δ : valores de teste	40
Figura 21	Isopletas de Carbono geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	41
Figura 22	Isopletas de Manganês geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	41
Figura 23	Isopletas de Silício geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	41
Figura 24	Isopletas de Cromo geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	42
Figura 25	Isopletas de Níquel geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	42
Figura 26	Diagrama binário Fe-Mn	47
Figura 27	Diagrama binário Fe-Si	48
Figura 28	Diagrama binário Fe-Cr	49
Figura 29	Diagrama binário Fe-Ni	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Faixas de composição química dos elementos de liga	26
Tabela 2	Níveis e steps para cada elemento de liga	27
Tabela 3	Tamanho dos conjuntos de dados usados para regressão linear	34
Tabela 4	Valores de R^2 para regressão linear	34
Tabela 5	Valores de R^2 para regressão linear de A1 com dados aleatórios	37
Tabela 6	Valores de R^2 para regressão linear de A1' com dados aleatórios	37
Tabela 7	Valores de R^2 para regressão linear de A3 com dados aleatórios	37

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	10
2 OBJETIVOS	11
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	12
3.1 OS COMPONENTES DO AÇO	12
3.2 DECOMPOSIÇÃO DA AUSTENITA	13
3.3 TEMPERATURAS CRÍTICAS DE AÇOS	15
3.4 TRATAMENTO TÉRMICO DE AÇOS	18
3.5 EFEITO DOS ELEMENTOS DE LIGA NAS TEMPERATURAS CRÍTICAS E TRATAMENTO TÉRMICO	20
3.6 DETERMINAÇÃO DAS TEMPERATURAS CRÍTICAS	21
3.7 APRENDIZADO DE MÁQUINA E A DETERMINAÇÃO DE TEMPERATURAS CRÍTICAS	22
3.7.1 Regressão Polinomial	23
3.7.2 Rede Neural Artificial	23
4 METODOLOGIA	26
4.1 O BANCO DE DADOS	26
4.1.1 Escolha das variáveis	26
4.1.2 Extração de temperaturas críticas	27
4.1.3 Avaliação do Banco de Dados	28
4.2 REGRESSÃO LINEAR	28
4.3 REDE NEURAL	29
4.4 COMPARAÇÃO DOS MODELOS	30
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	31
5.1 O BANCO DE DADOS	31
5.2 REGRESSÃO LINEAR	34
5.2.1 Regressão Linear de A1	35
5.2.2 Regressão Linear de A1'	35
5.2.3 Regressão Linear de A3	36
5.2.4 Comparação com banco de dados aleatórios	37
5.2.5 Isopletras das Regressões Lineares	38

5.3 REDE NEURAL	38
5.3.1 Testes para obtenção do modelo	38
5.3.2 Isopletras da Rede Neural	39
5.3.3 Métricas da Rede Neural	42
6 CONCLUSÕES PARCIAIS	43
7 PRÓXIMAS ETAPAS	44
REFERÊNCIAS	45
ANEXO A – Diagramas binários	47

1 INTRODUÇÃO

Aços têm diversas aplicações industriais e sua versatilidade está relacionada à variedade de propriedades que ele pode assumir. Além de sua composição química, processos de tratamento térmico controlam essas propriedades, que, por sua vez, estão relacionadas às temperaturas em que ocorrem as transformações de fases. Essas temperaturas também são chamadas de temperaturas críticas e ao longo do tempo foram desenvolvidos diversos métodos para determiná-las. Pode-se utilizar métodos experimentais, como a dilatométrica, ou softwares de cálculos termodinâmicos, como o Thermo-Calc®, ou ainda equações empíricas.

Novos modelos estão em desenvolvimento e entre eles estão os algoritmos de aprendizado de máquina, cujo desempenho aumenta quanto maior for sua experiência em realizar alguma atividade. Apesar de os métodos atuais serem razoavelmente precisos e eficientes, eles demandam certo custo de equipamento, software ou capacitação humana. Assim, uma ferramenta de cálculo de fácil acesso e utilização permitiria melhor compreensão das temperaturas críticas para o tratamento térmico de aços.

2 OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo a criação de um algoritmo de aprendizado de máquina para determinar as temperaturas críticas de transformação em aços de engenharia, utilizando a base de dados do software Thermo-Calc®, a fim de disponibilizar uma ferramenta de cálculo simples de se utilizar e aberta à comunidade científica.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 OS COMPONENTES DO AÇO

Aços podem ser vistos como uma liga ferrosa com adições de carbono e outros elementos de liga, dentre os quais destacam-se o manganês, silício, cromo, níquel, entre outros (DOSSETT; BOYER, 2006). São conhecidas inúmeras combinações de ligas de ferro e carbono que fornecem diferentes combinações de propriedades mecânicas, podendo apresentar altíssimas dureza e resistência (e.g., as novas gerações de aços avançados de alta resistência), ou serem maleáveis, como em aços de baixa liga. Tal mudança de propriedades está relacionada com as diferentes estruturas do ferro (fases) e combinações de morfologias que o aço pode assumir.

O ferro em estado sólido tem duas formas alotrópicas, ou seja, diferentes estruturas cristalinas que dependem da temperatura e pressão. A baixas temperaturas, o ferro assume a estrutura cúbica de corpo centrado (CCC) e é denominado α -Fe, ou ferrita. Acima de 910°C, os cristais transformam sua estrutura para cúbica de faces centradas (CFC), também chamada de γ -Fe, ou austenita, de caráter paramagnético. A estabilidade da austenita permanece até 1400°C, quando volta a assumir uma estrutura CCC de caráter paramagnético. Esta ferrita de alta temperatura é comumente chamada de δ -Fe para diferenciar a faixa de temperatura de ocorrência. Alguns autores também diferenciam a fase β -Fe da fase α -Fe, ambas de estrutura CCC, pelo fato de que para temperaturas superiores a 770°C (temperatura de Curie) o α -Fe perde suas propriedades ferromagnéticas e passa a ser paramagnético (TOTTEN, 2006).

A partir da combinação dessas possíveis estruturas do ferro com outros elementos formam-se as ligas. Como o ferro é a base do aço e tem estruturas cristalinas limitadas, é a sua combinação com outros átomos que resulta em diferentes propriedades. O carbono possui baixa solubilidade na fase α (0,02% em massa a 738°C), mas é bastante solúvel na fase γ , pois a estrutura CFC permite a alocação dos átomos de carbono em seus interstícios.

A porção de uma liga com estrutura e propriedades homogêneas é denominada fase. Em equilíbrio termodinâmico, as combinações entre o carbono e o ferro podem resultar em ferrita, austenita ou grafita, cujas relações com a temperatura e composição são mostradas no diagrama de equilíbrio da Figura 1. Nessas condições, os constituintes do sistema Fe-C à temperatura ambiente seriam ferrita α e grafita.

Entretanto a condição de equilíbrio não é verificada para a maioria dos processos e, em vez de grafita, forma-se o carboneto de ferro Fe_3C , também chamado de

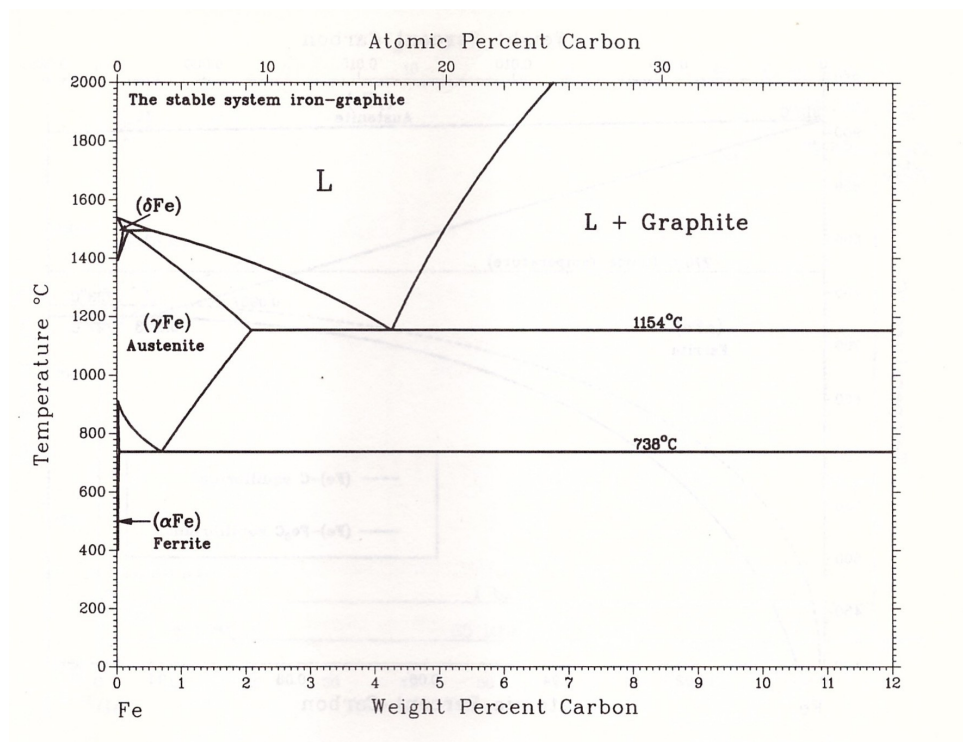


Figura 1 - Diagrama de equilíbrio ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)

cementita. A cementita é uma fase metaestável, mas sua formação é favorecida cineticamente em relação à grafita devido às elevadas taxas de resfriamento aplicadas ao aço durante seu processamento. Para essas condições, o diagrama de fase, que é então chamado de diagrama de equilíbrio metaestável, é dado pela Figura 2.

Um ponto importante do diagrama é o ponto eutetóide, no qual as três fases coexistem. Para um sistema apenas ferro e carbono, ele corresponde a aproximadamente 0,8% C em massa. Assim, aços de composição abaixo desse ponto são denominados hipoeutetóides e, acima, hipereutetóides.

3.2 DECOMPOSIÇÃO DA AUSTENITA

Para um aço resfriado lentamente à temperatura ambiente, o teor de carbono controla as fases formadas. Entretanto, a taxa de resfriamento controla a formação de constituintes metaestáveis. Essa formação de constituintes a partir da austenita pode ocorrer por difusão, cisalhamento ou uma mistura dos dois mecanismos (HONEYCOMBE, 1982).

No caso da ferrita, o resfriamento lento resulta em grãos equiaxiais preferencialmente no contorno de grão austenítico, enquanto um resfriamento rápido gera grãos em forma de agulhas, também conhecidos como ferrita acicular, nucleados no con-

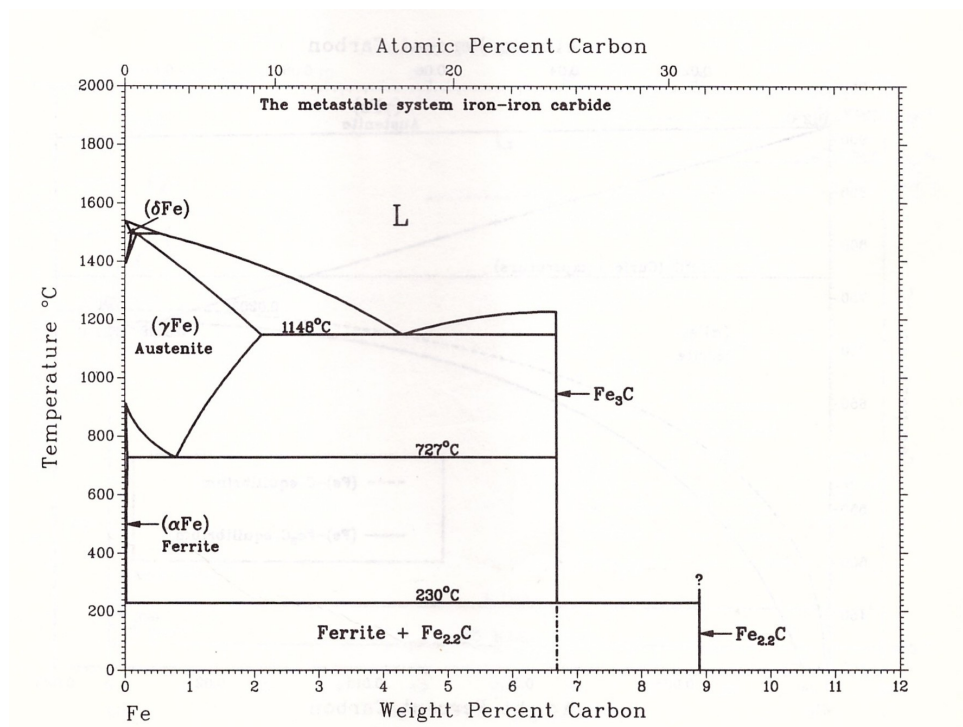


Figura 2 - Diagrama de fases metaestável ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)

torno e no interior do grão austenítico (SILVA; MEI, 2010). A cementita segue o mesmo comportamento morfológico e ambas ocorrem sob mecanismo exclusivo de difusão (HONEYCOMBE, 1982).

Para um aço de composição eutetóide, o resfriamento lento produz perlita, uma microestrutura característica que na realidade é uma mistura de austenita e cementita, na forma de lamelas. A ferrita é menos compacta por ter estrutura CCC e, consequentemente, apresenta interstícios tetraédricos menores. Assim, à medida que o resfriamento ocorre, o carbono da austenita é rejeitado pela ferrita em formação, dando origem à cementita, fase rica em carbono (SILVA; MEI, 2010).

Já um aço carbono resfriado bruscamente produz a martensita, uma estrutura que mantém o carbono em solução sólida da austenita. Diferente da formação de ferrita e perlita, esse processo não é controlado pela difusão devido à sua condição de resfriamento, mas sim por uma distorção na rede. Dessa forma, é um constituinte de mesma composição da austenita. Ela é característica pela sua microestrutura em ripas e alta dureza (HONEYCOMBE, 1982).

Já a bainita é um constituinte intermediário, pois reúne o rearranjo de rede da martensita à redistribuição de carbono e precipitação de carboneto da perlita (TOTTEN, 2006). Sua natureza se modifica com a diminuição da temperatura de transformação, sendo classificada em bainita superior e inferior. A morfologia da bainita superior con-

tem ferrita na forma de ripas, de concentração de carbono muito inferior à da austenita mãe; já a cementita depende do teor de carbono, podendo assumir a forma de partículas isoladas ou mesmo não precipitar, permanecendo na forma de austenita retida. Já a bainita inferior é mais acicular e tem lamelas mais individualizadas (HONEYCOMBE, 1982).

3.3 TEMPERATURAS CRÍTICAS DE AÇOS

O francês Le Chatelier foi o primeiro a atribuir a letra “A” para as temperaturas críticas de transformação, devido à palavra *Arrêt*, que representa a parada na temperatura durante a transformação de fase (SILVA; MEI, 2010).

Para exemplificar essas temperaturas críticas em aços, utilizou-se dados de chamadas do software Thermo-Calc® para traçar o diagrama Fe-C metaestável para um aço 1% Mn, em massa, da Figura 3, bem como os gráficos de fração molar de fase em função da temperatura para aços hipo, hiper e eutetóide, das Figuras 4, 5 e 6 a seguir.

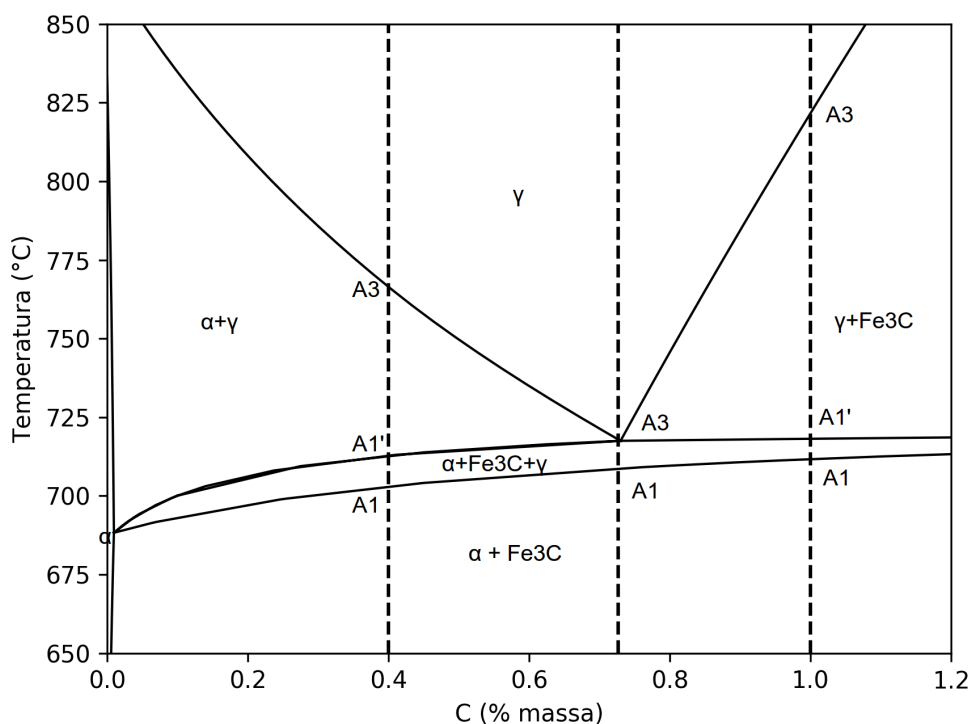


Figura 3 - Diagrama de fases Fe-C para aço 1% Mn, em massa

A primeira linha vertical tracejada da Figura 3 representa um aço hipoeutetóide e

sua fração molar de fases pode ser vista na Figura 4.

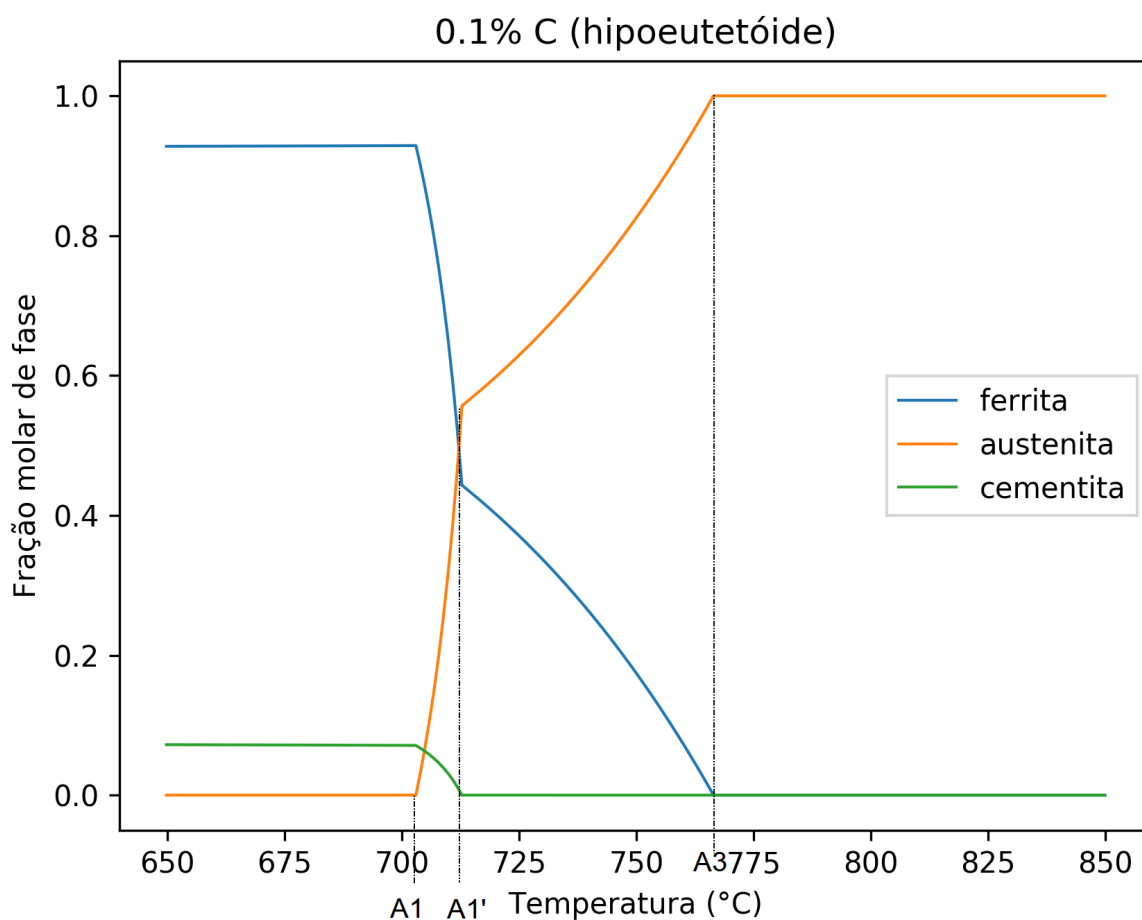


Figura 4 - Fração molar de fase versus Temperatura para aço 0,1%C 1% Mn, em massa

Um aço nessa composição, mediante aquecimento, mantém as fases α e Fe_3C até chegar ao ponto A1, no qual a fase α começa a se decompor em γ . No gráfico da Figura 4, esse ponto pode ser notado pela primeira mudança de inclinação da curva da austenita. O aço permanece no campo trifásico até encontrar o ponto A1', quando toda a fase Fe_3C se transforma em γ , a segunda mudança de inclinação na curva da austenita. Caso o aquecimento permaneça, a fase α começa a se transformar em γ , até atingir o ponto A3, onde tem-se 100% de fase γ , a última mudança de inclinação na curva da austenita.

Um aço eutetóide, correspondente à segunda linha vertical tracejada da Figura 3 e ao gráfico da Figura 5, segue o mesmo raciocínio. A diferença é que não há um campo trifásico, por isso a temperatura A1' equivale à temperatura A3.

Já para um aço hipereutetóide, terceira linha vertical tracejada da Figura 3 e grá-

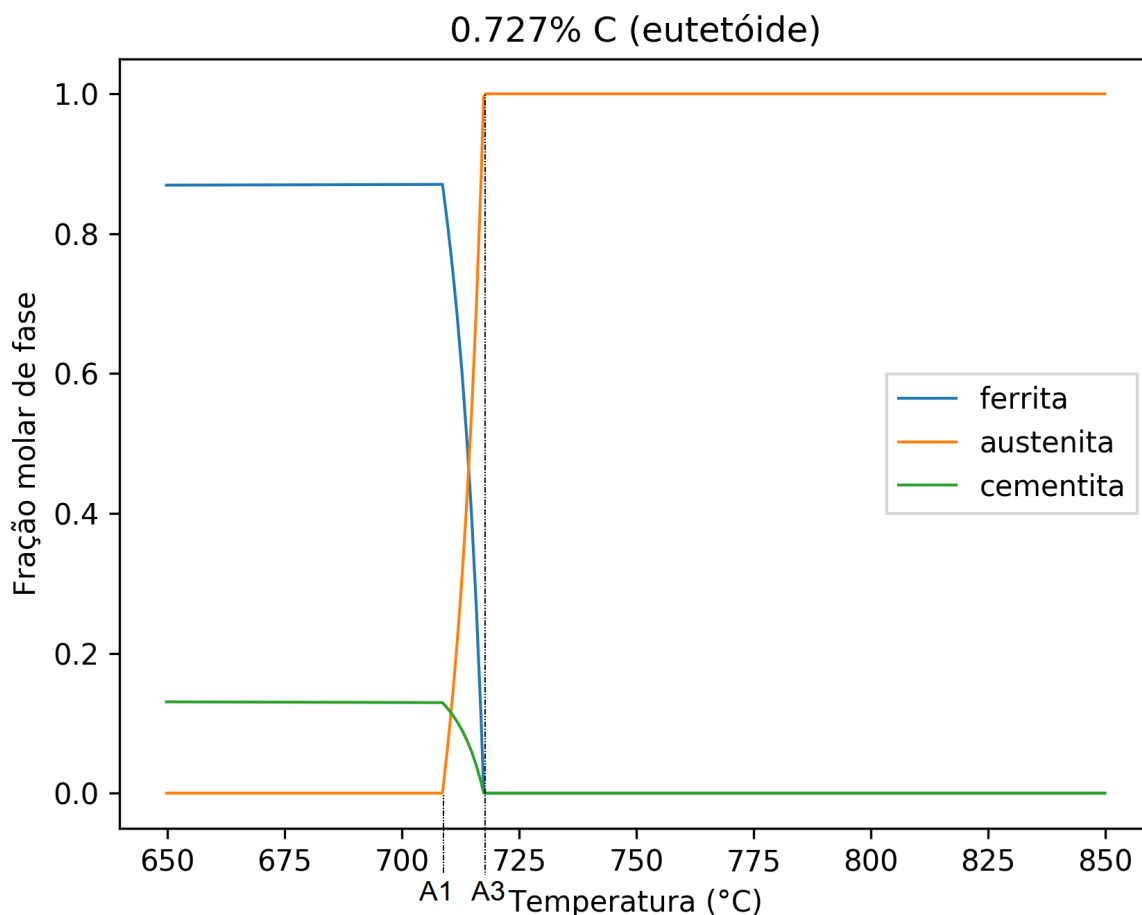


Figura 5 - Fração molar de fase versus Temperatura para aço 0,727%C 1% Mn, em massa

fico da Figura 6, a diferença é que o segundo campo bifásico é constituído por γ e Fe_3C , até atingir o ponto em que toda a Fe_3C se transforma em γ . Certas literaturas, como Digges, Rosenberg e Geil (1960), fazem distinção para a temperatura A3 de aços hipereutetóides, chamando-a de A_{cm} , devido à diferença de campos bifásicos. No presente trabalho, ambas serão chamadas de A3, por corresponderem à mínima temperatura em que a fração de austenita é igual a 1.

Em resumo, pode-se dizer que a temperatura A1 corresponde à máxima temperatura em que a fração de austenita é zero, enquanto a A3 é a mínima temperatura cuja fração de austenita é um e A1' é o limite superior do campo intercrítico de três fases (HONEYCOMBE, 1982).

É possível ainda diferenciar a temperatura crítica no resfriamento da de aquecimento, utilizando respectivamente as letras “r” e “e”. Em teoria, elas deveriam ser iguais, mas na prática a taxa de resfriamento ou aquecimento diferencia Ae1 de Ar1 e

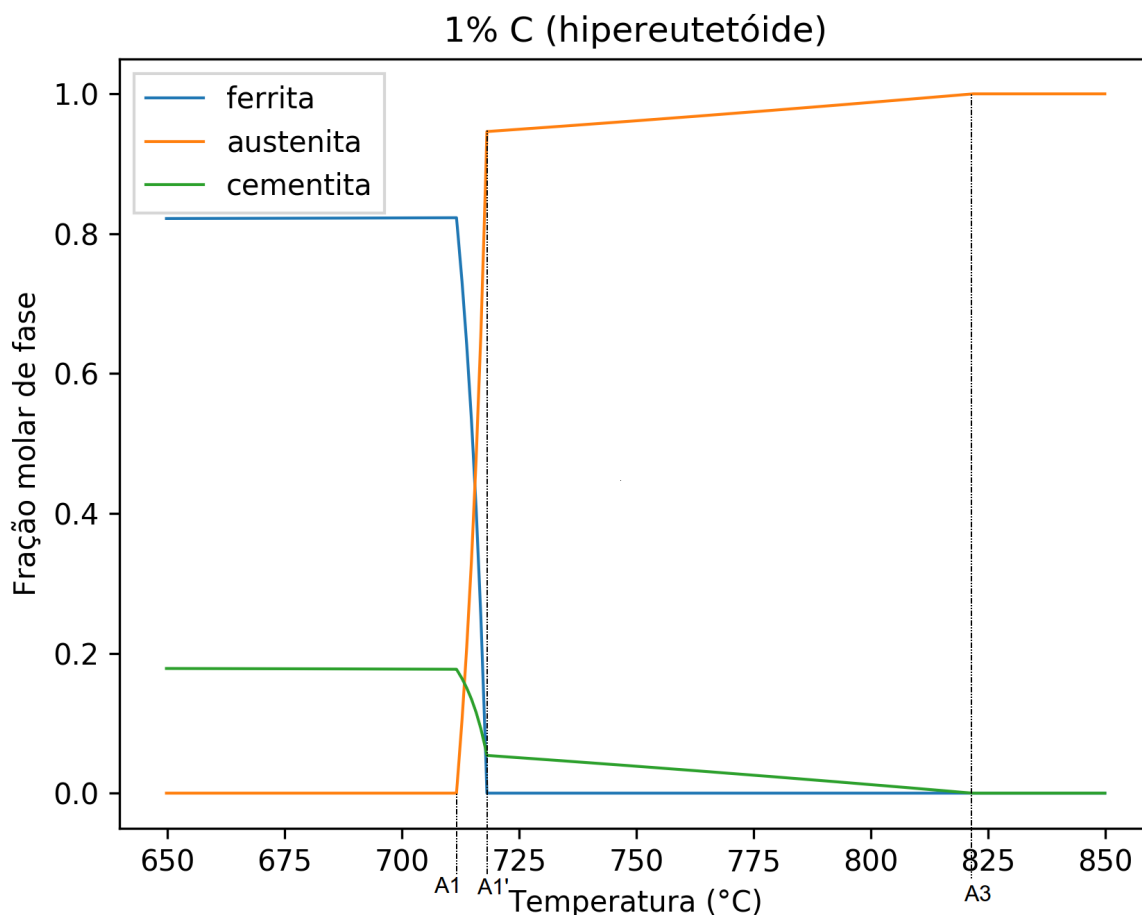


Figura 6 - Fração molar de fase versus Temperatura para aço 1%C 1% Mn, em massa

Ae3 de Ar3. A faixa de temperatura entre A1 e A3 é chamada de intervalo crítico ou de transformação (DIGGES; ROSENBERG; GEIL, 1960).

3.4 TRATAMENTO TÉRMICO DE AÇOS

A obtenção das propriedades ideais de um aço está relacionada tanto com sua composição química quanto com os processos de tratamento térmico aos quais ele é submetido (TOTTEN, 2006). Tratamentos térmicos podem ser utilizados para aumentar ou diminuir a ductilidade, dureza, tensão de escoamento ou tenacidade, otimizando essas propriedades para a finalidade do material (SILVA; MEI, 2010).

A austenitização é a etapa que precede um tratamento térmico e consiste em aquecer o aço a uma temperatura em que haja formação da austenita. Esta pode ser parcial, quando se encontra na faixa de transformação, ou total, quando está acima do

intervalo de transformação (ASM International, 1991).

A partir do aço na forma de austenita, é possível fazer o recozimento, ou seja, o resfriamento lento para reduzir tensões, diminuir dureza, melhorar a usinabilidade ou ajustar o tamanho do grão, reduzindo assim influências de tratamentos térmicos ou mecânicos anteriores. Para aços hipoeutetóides a temperatura é de aproximadamente 50 °C acima de A3, enquanto para hipereutetóides é de 50 °C acima de A1, não podendo ultrapassar A3 pois em um resfriamento posterior formaria cementita nos contornos de grão da austenita, fragilizando a peça tratada. Quando se deseja uma estrutura perlítica, prefere-se temperaturas de austenitização mais altas, e mais baixas para estrutura esferoidizada. Para ambos os casos, quanto mais próxima de A1 for a temperatura de transformação da austenita, mais grosseira será a estrutura.

Outro tipo de tratamento térmico é a normalização, que após austenitização resfria lentamente o aço ao ar parado ou agitado, sendo recomendada para homogeneizar a estrutura após forjamento ou antes de outros processos, como têmpera ou revenimento. Em aços hipoeutetóides, causa um espaçamento entre as lamelas da perlita, tornando-a mais fina. A dureza e a resistência mecânica ficam mais elevadas e a ductilidade mais baixa. Para hipereutetóides, distribui-se melhor os carbonetos, pois a temperatura de austenitização ocorre acima de A3.

Um terceiro tipo de processo muito importante é a têmpera, que consiste em resfriar o aço austenitizado rapidamente a fim de obter a estrutura metaestável martensítica. O teor de carbono aumenta a dureza da martensita e diminui a temperatura necessária para que o processo ocorra. Essa temperatura depende não só da composição do aço, mas também da taxa de resfriamento, e é chamada de Ms. Por depender de fatores cinéticos, essa temperatura crítica não será o foco do presente trabalho.

A formação de martensita aumenta a dureza do aço, entretanto o torna mais frágil. Para melhorar a resistência mecânica e tenacidade do material temperado, realiza-se o revenimento da martensita, aquecendo o aço até temperatura inferior à de austenitização, mantendo-a até que as propriedades desejadas sejam alcançadas (SILVA; MEI, 2010). Como a martensita é uma solução supersaturada de carbono, durante o revenimento o ferro o rejeita na forma de carbonetos em uma matriz de ferro α (HONEYCOMBE, 1982).

3.5 EFEITO DOS ELEMENTOS DE LIGA NAS TEMPERATURAS CRÍTICAS E TRATAMENTO TÉRMICO

Os elementos de liga são adicionados ao aço para modificar as fases ou constituintes em equilíbrio, bem como alterar a maneira como essas fases se formam (SILVA; MEI, 2010).

Quanto maior o teor de carbono, maior a temperabilidade do aço. Entretanto, esse também fica mais suscetível a trincas durante a têmpera. Assim, a adição de elementos de liga tem como um de seus objetivos manter a alta temperabilidade do aço com baixa suscetibilidade a trincas, através da transformação da austenita em menor velocidade (SOUZA, 1989).

Os elementos de liga podem ser classificados de acordo com sua influência no campo austenítico, que por sua vez está relacionada à estrutura eletrônica dos elementos. São eles:

- Classe 1: elementos de domínio- γ aberto, podendo até mesmo eliminar completamente a fase α em concentrações suficientemente altas. Assim, as transformações $\gamma \rightarrow \alpha$ ocorrem a temperaturas menores, ou seja, A3 diminui e pode haver casos em que não há a temperatura A1. Fazem parte desse grupo: Níquel, Manganês, Cobalto, Rutênio, Ródio, Paládio, Ósmio, Irídio e Platina.
- Classe 2: domínio- γ é expandido até a formação de um composto de ferro. Essa expansão é responsável por formar solução sólida homogênea, sendo muito importante para o tratamento térmico dos aços. Pertencem a esse grupo o Carbono e o Nitrogênio, que diminuem o valor de A3.
- Classe 3: domínio- γ fechado, elementos que favorecem a expansão do domínio- α , que circunda o campo austenítico, formando uma região chamada de ilha gama ou γ -loop. Estes aumentam A1 e pode haver casos em que A3 não existe. Essas ligas não podem passar por tratamento térmico de arrefecimento através da transformação $\gamma \rightarrow \alpha$. Fazem parte desse grupo: Silício, Alumínio, Berílio, Fósforo e elementos fortemente formadores de carboneto, como Titânio, Vanádio, Molibdênio e Cromo.
- Classe 4: domínio- γ contraído mas há formação de compostos de ferro. Os elementos Boro, Enxofre, Tântalo, Nióbio, Zircônio estão nessa categoria (HONEY-COMBE, 1982) (SILVA; MEI, 2010).

A Figura 7 mostra a influência dos elementos de liga no campo austenítico em diagramas binários de ferro.

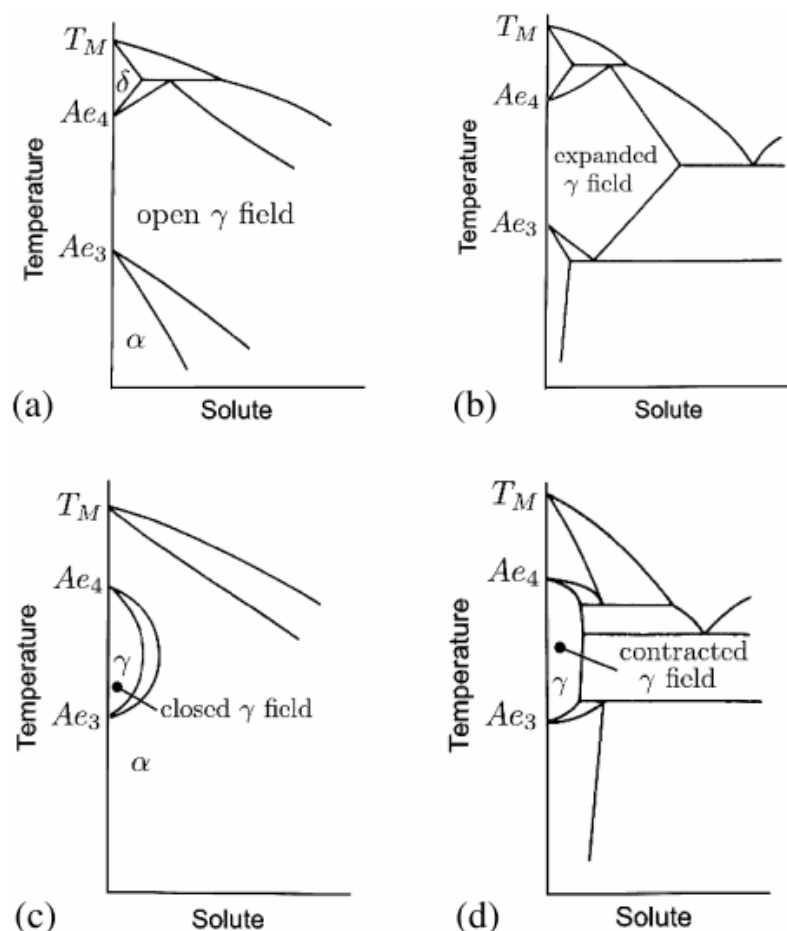


Figura 7 - Classificação dos domínios- γ sob influência dos elementos de liga: a) aberto; b) expandido; c) fechado; d) contraído. (HONEYCOMBE, 1982)

3.6 DETERMINAÇÃO DAS TEMPERATURAS CRÍTICAS

Dada a importância de conhecer as temperaturas críticas de aços para obtenção das propriedades desejadas, foram desenvolvidas diversas formas para determiná-las.

Como as transformações de fase do aço também causam contração ou expansão, um método de determinação experimental é através da dilatometria sob aquecimento contínuo. O dilatômetro coleta sinais de mudança nas dimensões do corpo de prova bem como sua temperatura, para traçar a curva de derivada da dimensão relativa em função da temperatura, como as do exemplo na Figura 8. Na literatura utilizada por Pawlowski (2012), A1 equivale a A_{c1p} , A1' a A_{c1k} , e A3 a A_{c3} ou A_{cm} . Apesar de

muito preciso, o equipamento tem custo elevado e necessita de pessoas capacitadas para operá-lo.

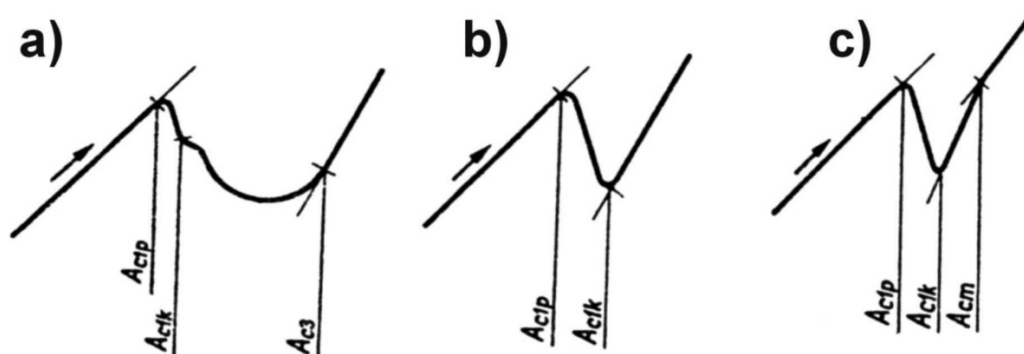


Figura 8 - Determinação gráfica das temperaturas críticas em aço (a) hipoeutetóide, (b) eutetóide e (c) hipoeutetóide, a partir de dados do dilatômetro (PAWLOWSKI, 2012)

Outro método de determinar as temperaturas críticas de transformação é através do Thermo-Calc®, software utilizado para diversos cálculos termodinâmicos baseado na minimização da energia de Gibbs. Ele tem acesso a diversos bancos de dados termodinâmicos, em especial os desenvolvidos pelo *Scientific Group Thermodata Europe* (SGTE). Sendo um resultado de mais de 30 anos de coleta de dados, sua precisão é inquestionável (Thermo-Calc Software AB, 2003). Entretanto, trata-se de um software pago e requer certo aprendizado para sua manipulação.

Uma terceira maneira é a utilização de equações empíricas que se baseiam na concentração em massa dos elementos presentes no aço. A elaboração dessas equações envolve um método numérico de regressão múltipla. Andrews (1965) *apud* Gorni (2012) publicou fórmulas para o cálculo das temperaturas de transformação para austenita A1 e A3, descritas nas equações 1 e 2 a seguir.

$$A1 = 723 - 16.9\text{Ni} + 29.1\text{Si} + 6.38\text{W} - 10.7\text{Mn} + 16.9\text{Cr} + 290\text{As} \quad (1)$$

$$A3 = 910 - 203\sqrt{C} + 44.7\text{Si} - 15.2\text{Ni} + 31.5\text{Mo} + 104\text{V} + 13.1\text{W} - 30.0\text{Mn} + 11.0\text{Cr} + 20.0\text{Cu} - 700\text{P} - 400\text{Al} - 120\text{As} - 400\text{Ti} \quad (2)$$

3.7 APRENDIZADO DE MÁQUINA E A DETERMINAÇÃO DE TEMPERATURAS CRÍTICAS

Dada a complexidade e o custo de desenvolvimento de um novo material, estudos recentes têm se voltado para a tecnologia como primeira forma de avaliar hipóteses

(BÉLISLE et al., 2015). Uma vez que muitas variáveis estão envolvidas na determinação de uma propriedade, tornaram-se populares algoritmos capazes de aprender com alguma experiência vinda de um conjunto de tarefas, cujo desempenho melhora quanto maior sua experiência, também chamados de *machine learning* ou aprendizado de máquina.

Esses algoritmos podem ser classificados entre supervisionados e não supervisionados. Ele é dito supervisionado quando recebe um banco de dados com as respostas certas e a partir delas prevê um valor para dada situação (regressão) ou faz uma classificação binária. Já o algoritmo não supervisionado não sabe quais são as respostas certas; ele é alimentado com dados para que se encontre um padrão (clusterização) ¹.

No campo da engenharia de materiais, os algoritmos mais utilizados são os supervisionados, uma vez que pode-se reunir dados teóricos ou experimentais e a partir deles fazer a predição de propriedades. Diversas funções podem ser utilizadas para esse fim, cada uma com certa eficiência, e segundo o teorema “No Free Lunch” de Wolpert e Macready *apud* Bélisle et al. (2015), não existe um algoritmo perfeito.

Dentre os métodos supervisionados, destacam-se os algoritmos que foram explorados nesse trabalho.

3.7.1 Regressão Polinomial

O primeiro e mais simples é a interpolação polinomial. Este pode se comportar de forma linear, como descrito na equação 3, ou quadrática, como na equação 4.

$$f(x) = bx + c \quad (3)$$

$$f(x) = \frac{1}{2}ax^T + bx + c \quad (4)$$

Ambos são métodos muito utilizados devido ao baixo custo computacional. Entretanto, têm a necessidade de estabelecer alguma relação (linear ou quadrática) entre os termos estudados, utilizando termos fixos (BHADESHIA, 1999).

3.7.2 Rede Neural Artificial

Um segundo método é a rede neural. Inspirada no cérebro humano, baseia-se em associações para fazer previsões, sendo muito utilizada para reconhecimento de

¹Informações extraídas das vídeo aulas do curso de Machine Learning ministrado por Andrew Ng, disponível em <<https://pt.coursera.org/learn/machine-learning>>

padrões. É indicada para funções não lineares e pode identificar relações complexas entre variáveis independentes. A desvantagem é o maior tempo computacional necessário (BÉLISLE et al., 2015).

A rede neural artificial é um conjunto de neurônios de software organizados em camadas, conectados de forma que possibilita a comunicação entre eles. Como mostra a Figura 9, ela tem uma camada de entrada, uma ou mais camadas intermediárias e outra de saída.

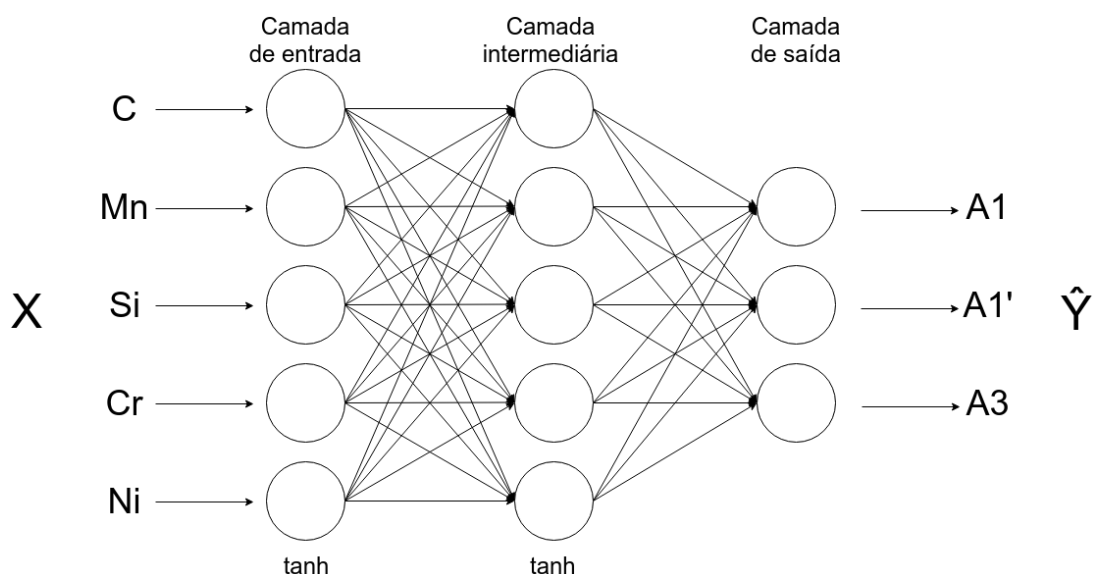


Figura 9 - Arquitetura da rede neural

Para o exemplo da Figura 9, a primeira camada recebe uma entrada X de cinco dados n vezes, sendo n o tamanho do banco de dados utilizado no treinamento. Os neurônios da camada intermediária recebem o vetor X com as 5 entradas para calcular o valor predito \hat{Y} . Para cada neurônio existem os vetores de peso e os vieses (ou *bias*), que a princípio são randômicos. O vetor X é multiplicado pelo vetor de peso e depois adicionado ao viés, como mostra a Equação 5. Como os valores dos pesos e vieses são aleatórios, o valor da saída inicialmente é bem diferente do esperado. A cada iteração, os pesos são alterados até atingir um resultado satisfatório, etapa chamada de treinamento da rede neural (BHADESHIA, 1999).

$$Z = w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + \dots + w_nx_n \quad (5)$$

Como mostra a Figura 10, o resultado desse cálculo passa por uma função de ativação para que se defina a próxima conexão (SKALSKI, 2017).

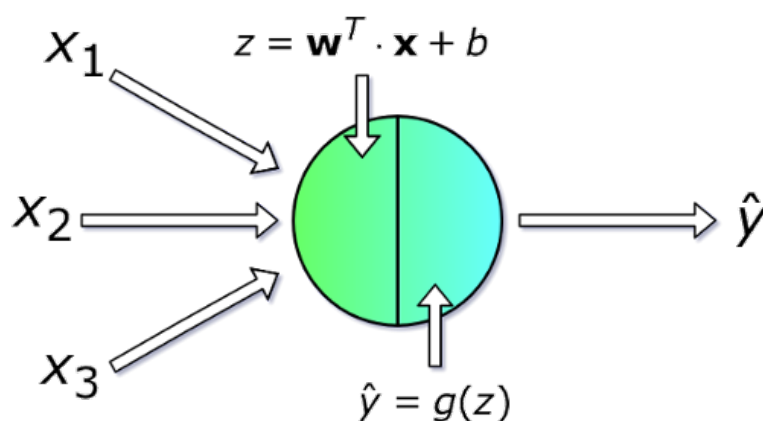


Figura 10 - Operações em um único neurônio (SKALSKI, 2017)

Gavard et al. (1996) elaborou uma rede neural para prever A1 e A3 a partir de dados experimentais de composição química, temperatura e taxa de aquecimento. O modelo foi capaz de estimar temperaturas críticas com precisão de $\pm 40\text{K}$ ou 95% de confiança.

4 METODOLOGIA

4.1 O BANCO DE DADOS

4.1.1 Escolha das variáveis

A primeira etapa para elaboração de um algoritmo de machine learning é a construção do banco de dados utilizado em seu treinamento. Para este trabalho, utilizou-se dados extraídos do software Thermo-Calc®.

Inicialmente, discutiu-se os elementos de liga e suas respectivas faixas de composição química nos aços estudados. Foram considerados apenas os mais comuns aços de engenharia, cujas composições foram consultados em um handbook SAE (SAE Society of Automotive Engineers, 1983). Não foram consideradas as composições relativas aos aços inoxidáveis. A Tabela 1 mostra as faixas de composições escolhidas para criação do banco de dados de temperaturas críticas.

Tabela 1 - Faixas de composição química dos elementos de liga

Elemento de liga	% mínima	% máxima
Carbono	0	1,5
Manganês	1×10^{-6}	3,0
Silício	1×10^{-6}	3,0
Cromo	1×10^{-6}	3,0
Níquel	1×10^{-6}	3,0

Também discutiu-se a faixa de temperatura a ser estudada. Para isso, analisou-se os diagramas binários para cada elemento de liga, que podem ser encontrados no Anexo A e observou-se suas temperaturas críticas. Considerando a temperatura em que pode ser observada austenita, utilizou-se o intervalo de 673 a 1473K.

Definidas as faixas de composição química e temperatura, foram definidos os níveis para cada elemento, ou seja, quantas variações (ou steps) cada elemento tem. O valor do step é dado pela equação a seguir:

$$\text{step} = \frac{\Delta c}{n - 1} \quad (6)$$

Assim, os níveis e steps utilizados para cada elemento são dados na Tabela 2.

Já para a temperatura, estabeleceu-se um step de 10K. A partir da combinação desses valores de composição, um script faz a chamada do Thermo-Calc®. Dessa

Tabela 2 - Níveis e steps para cada elemento de liga

Elemento de liga	Níveis	Valor do step
Carbono	11	0,15
Manganês	5	0,75
Silício	5	0,75
Cromo	5	0,75
Níquel	5	0,75

forma, para dada composição química, são retornadas as porcentagens de cada fase (ferrita, austenita e cementita) para cada temperatura dentro da faixa estabelecida.

O resultado da chamada do Thermo-Calc® é salvo em um arquivo de texto de extensão .DAT. No total, foram gerados 6874 arquivos.

4.1.2 Extração de temperaturas críticas

Para cada arquivo gerado pela chamada do Thermo-Calc®, calculou-se as temperaturas críticas através de outro script. Este faz a leitura do arquivo .DAT, que contém as porcentagens de cada fase para cada temperatura entre 673 e 1473K, variando em 10K.

Para determinar a A1, identifica-se a maior temperatura em que a porcentagem de austenita é zero, enquanto para o A3, identifica-se a menor temperatura em que a porcentagem de austenita é um.

Também identificou-se a temperatura crítica intermediária, A1', e consequentemente se o aço do respectivo arquivo é hipo ou hipereutetóide. Para isso, comparou-se a temperatura em que a porcentagem de ferrita é zero (T_{ferr}) com a que a porcentagem de cementita é zero (T_{cem}). Caso T_{ferr} seja maior que T_{cem} , A1' é igual a T_{cem} e o aço é hipoeutetóide; caso contrário, A1' é igual a T_{ferr} e o aço é hipereutetóide. A terceira hipótese é que não houvesse cementita para a composição dada, assim não haveria campo trifásico e A1' seria igual a A1.

Os dados do nome do arquivo, o número da macro que fez sua chamada, composição química, temperaturas críticas e classificação em hipo ou hiper eutetóide foram salvos em um arquivo CSV.

4.1.3 Avaliação do Banco de Dados

Foram realizados testes para averiguar a qualidade dos dados extraídos do Thermo-Calc®.

Para avaliar a coerência, foi elaborado um script que plota simultaneamente o gráfico da porcentagem de austenita em função da temperatura, comparando dados da tabela de resultado com dados de uma única chamada do Thermo-Calc®. Dessa forma, foi possível testar resultados pontuais considerados inconsistentes.

Outro teste realizado foi a verificação da existência das fases ferrita, austenita e cementita, para averiguar quais composições poderiam ser problemáticas para determinar as temperaturas críticas.

Uma importante verificação da base de dados como um todo foi a comparação com os resultados das equações empíricas de Andrews. Para cada composição química do banco de dados, calculou-se as temperaturas críticas A1 e A3 pelas equações empíricas. A partir disso, gerou-se um gráfico de temperatura crítica calculada versus temperatura crítica gerada pelo Thermo-Calc®.

A fim de avaliar o efeito de cada elemento na temperatura crítica A3, foram traçadas isopletras com a composição de carbono como variável livre e diferentes composições de cada elemento.

4.2 REGRESSÃO LINEAR

Analizou-se a predição das temperaturas A1, A1' e A3 através de algoritmos de regressão linear multivariável.

Primeiramente, o banco de dados gerado conforme a seção 4.1 foi manipulado, transformando as composições para porcentagem em peso e as temperaturas para graus Celsius, além de remover os dados cujas temperaturas críticas não existissem. A fim de avaliar o efeito dos termos ao quadrado e da interdependência entre elementos químicos no valor das temperaturas críticas, foram criadas novas colunas, totalizando os seguintes parâmetros: C, C², CMn, CSi, CCr, CNi, Mn, Mn², MnSi, MnCr, MnNi, Si, Si², SiCr, SiNi, Cr, Cr², CrNi, Ni, Ni².

Em seguida, o banco de dados foi separado entre dados de treino e dados de teste para o algoritmo. Utilizou-se a proporção 80% treino e 20% teste, selecionando dados com um algoritmo pseudoaleatório, ou seja, para uma mesma semente são selecionados os mesmos dados.

A seguir, os dados de treino foram utilizados para gerar modelos de regressão li-

near multivariável, utilizando o *Scikit-learn*. Essa biblioteca do *Python* contém funções eficientes de aprendizado de máquina, incluindo o módulo *linear_model*, no qual se espera que o valor alvo seja uma combinação linear dos dados de entrada.

Para cada temperatura crítica, foi gerado um modelo para composições hipoeutetóides, um para hipereutetóides e um para todas as composições, totalizando nove modelos. Para cada modelo obteve-se os coeficientes de regressão de cada variável independente e calculou-se o coeficiente de determinação (R^2) da predição do modelo.

Para cada modelo, foram plotados gráficos de valores preditos versus valores esperados para o conjunto de dados de teste, além de isopletras comparando os dados de treino com os de teste.

Uma vez que os valores de R^2 foram muito satisfatórios, realizou-se um novo teste, a fim de verificar a possibilidade de *overfit*. Para isso, gerou-se um novo banco de dados de teste, de tamanho equivalente a 20% ao do banco original, utilizando o algoritmo *rand* do *Numpy*, que retorna números aleatórios distribuídos uniformemente de 0 a 1. Em seguida esses números foram multiplicados pelas composições máximas do elemento químico correspondente, a fim de se obter ligas dentro das faixas de composição estudadas. Por fim, foram rodados os scripts para determinar a temperatura dada pelo Thermo-Calc®, descritos na secção 4.1. Novos cálculos de R^2 foram feitos e comparados com os originais.

4.3 REDE NEURAL

Uma vez que a temperatura A3 é a mais complexa de se determinar, devido à inversão da curva no ponto eutetóide, para essa temperatura crítica foi elaborada uma rede neural, de arquitetura semelhante à mostrada na Figura 9.

Para isso, houve o mesmo tratamento de dados descrito na secção 4.2, transformando as composições para porcentagem em peso, as temperaturas para graus Celsius, e removendo os dados cujas temperaturas críticas não existissem. Também foi feita a mesma separação entre dados de treino e teste, utilizando a mesma proporção de 80/20%, respectivamente.

Além desses procedimentos, a rede neural exige que os dados sejam normalizados para que haja melhor convergência, uma vez que a função de ativação escolhida para o modelo foi a de tangente hiperbólica. Foi utilizado o *MinMax Scaler*, função do módulo *Scikit-learn* do *Python*, que reduz o intervalo dos dados para que estejam entre 0 e 1.

Para construção da rede neural, foi utilizado o Keras, uma API de alto nível escrita em *Python* e cujo *backend* pode ser rodado em *TensorFlow*, *CNTK* ou *Theano*. Para esse caso, foi utilizado o *TensorFlow*. Essa biblioteca tem como maior vantagem a agilidade para criar modelos complexos, facilitando a elaboração de testes (SKALSKI, 2017).

Como valor de saída foi estabelecido A3, enquanto as porcentagens em peso de C, Mn, Si, Cr, Ni foram definidas como valores de entrada. Foram variados o número de neurônios na camada intermediária, de 1 a 12, bem como a taxa de aprendizado (ou *learning rate*) de 0.1, 0.01 e 0.001. Foram plotados gráficos de Erro quadrático médio versus número de neurônios na camada intermediária, a fim de estipular um ponto ótimo desses parâmetros, como realizado no trabalho de Capdevila et al. (2004). Para um mesmo número de neurônios, foram testados 5 modelos, uma vez que os pesos e vieses iniciais são aleatórios e podem influenciar no resultado final.

Definida a taxa de aprendizado que apresentava melhor estabilidade do erro quadrático médio, avaliou-se o efeito do número de neurônios na camada interna na função perda e nos valores preditos. Foram plotados gráficos de função perda versus número de iterações, bem como de valores preditos versus valores esperados, para número de neurônios na camada intermediária de 1 a 12.

Estabelecendo o ponto ótimo de número de neurônios, foram plotadas isopletras comparando os dados de treino com de teste, foram calculados o coeficiente de determinação (R^2) e o erro quadrático médio (MSE) da predição do modelo.

4.4 COMPARAÇÃO DOS MODELOS

A fim de se comparar a assertividade dos modelos, foram comparadas as métricas de regressão linear e rede neural para predição da temperatura A3. Primeiramente, foi necessário utilizar os dados normalizados pelo *MinMax Scaler* para treinar novamente o algoritmo de regressão linear, para que o valor de erro quadrático médio fosse comparável ao da rede neural.

Também foram plotados gráficos de valores preditos pela regressão linear e pela rede neural versus valores calculados pela equação empírica, uma vez que os dados normalizados não podem ser usados para essas equações e a comparação das métricas não teria sentido. Para isso, as predições da rede neural foram desnormalizadas utilizando o método *inverse_transform* do *Scikit-learn*.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 O BANCO DE DADOS

O resultado da variação de composição química para aços carbono gerou um total de 6874 combinações e, para cada, fez-se a chamada do Thermo-Calc® que retorna a porcentagem de cada fase para temperaturas de 673 a 1473K, variando de 10K. Para cada composição, os dados são salvos em um arquivo .DAT.

Inicialmente, sete macros faziam a chamada do Thermo-Calc® com 1000 composições cada. Isso trouxe resultados muito inconsistentes, como valores em branco ou incoerentes com a literatura, e podem estar relacionados à sobrecarga de memória do computador. Notou-se que, quanto menos chamadas cada macro fazia, menor o número de erros nos resultados e, assim, chegou-se ao número de 69 macros com 100 chamadas cada.

Em seguida, para cada arquivo, extraiu-se as temperaturas críticas A1, A1' e A3. As imagens a seguir ilustram a lógica dessa extração.

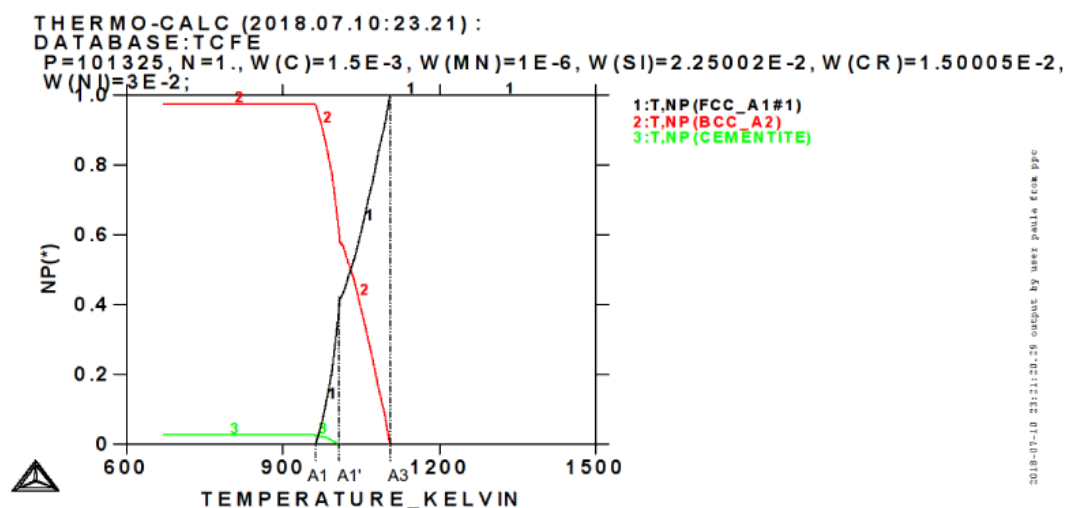


Figura 11 - Extração de temperaturas críticas para aço hipoeutetóide

A temperatura A1' é representada pela mudança de inclinação na curva da porcentagem de austenita. Para aços hipoeutetóides, essa temperatura corresponde ao ponto em que a porcentagem de cementita é zero, como mostra a Figura 11. Já para hipereutetóides, ao ponto em que a porcentagem de ferrita é zero, como na Figura 12. Enquanto isso, para aços em que a porcentagem de cementita é sempre zero,

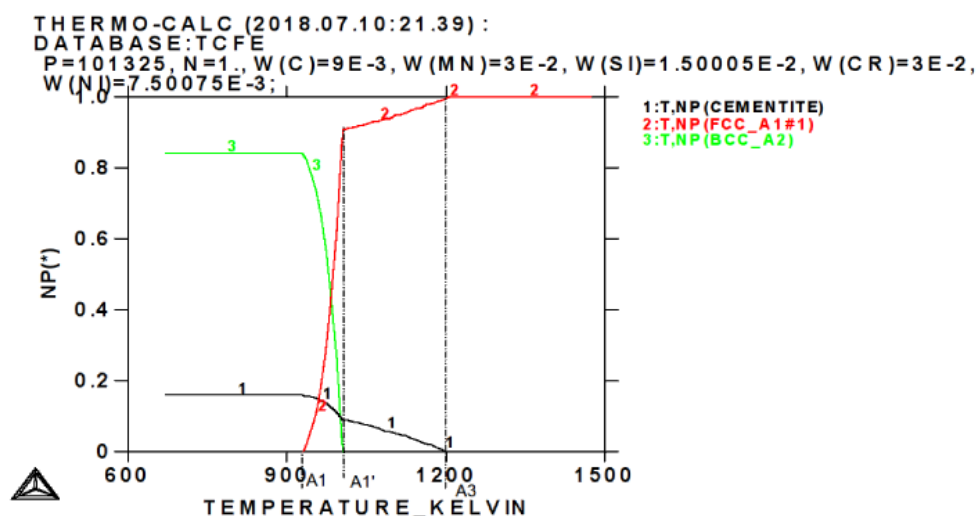


Figura 12 - Extração de temperaturas críticas para aço hipereutetóide

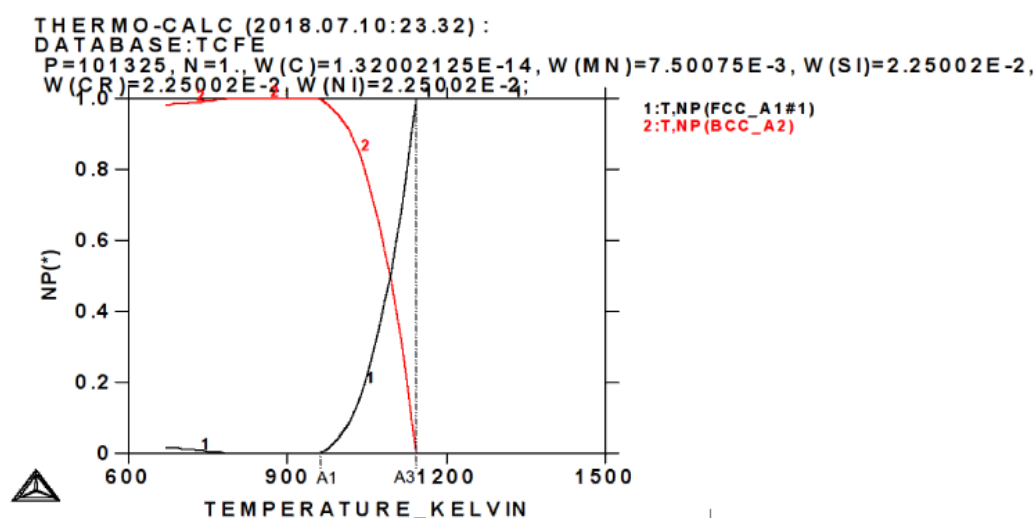


Figura 13 - Extração de temperaturas críticas para aço hipoeutetóide sem cementita

considera-se que a temperatura $A1'$ é igual à $A1$ (vide Figura 13).

É importante destacar que nem sempre um aço terá as três temperaturas críticas. Elementos muito alfacênicos podem não ter $A3$, como no caso de um γ loop, e gamagênicos podem não ter $A1$, por terem austenita estável à temperatura ambiente.

Mesmo considerando que algumas temperaturas críticas podem não existir para certas composições, ainda não se sabe as causas dos erros que ocorreram nessa extração. Por exemplo, algumas composições com baixo carbono ficaram com valores em branco, enquanto outras tiveram valores de temperatura crítica muito acima do

esperado, embora os gráficos plotados para sua respectiva composição estivessem dentro do esperado. Assim, foi feito um script que faz essa correção, fazendo apenas uma chamada do Thermo-Calc® por vez.

Também foi realizada uma comparação dos valores de temperatura crítica com a equação empírica de Andrews, plotando o gráfico da Figura 14. A linha em azul representa os valores esperados ($T_{\text{empirical}} = T_{\text{database}}$).

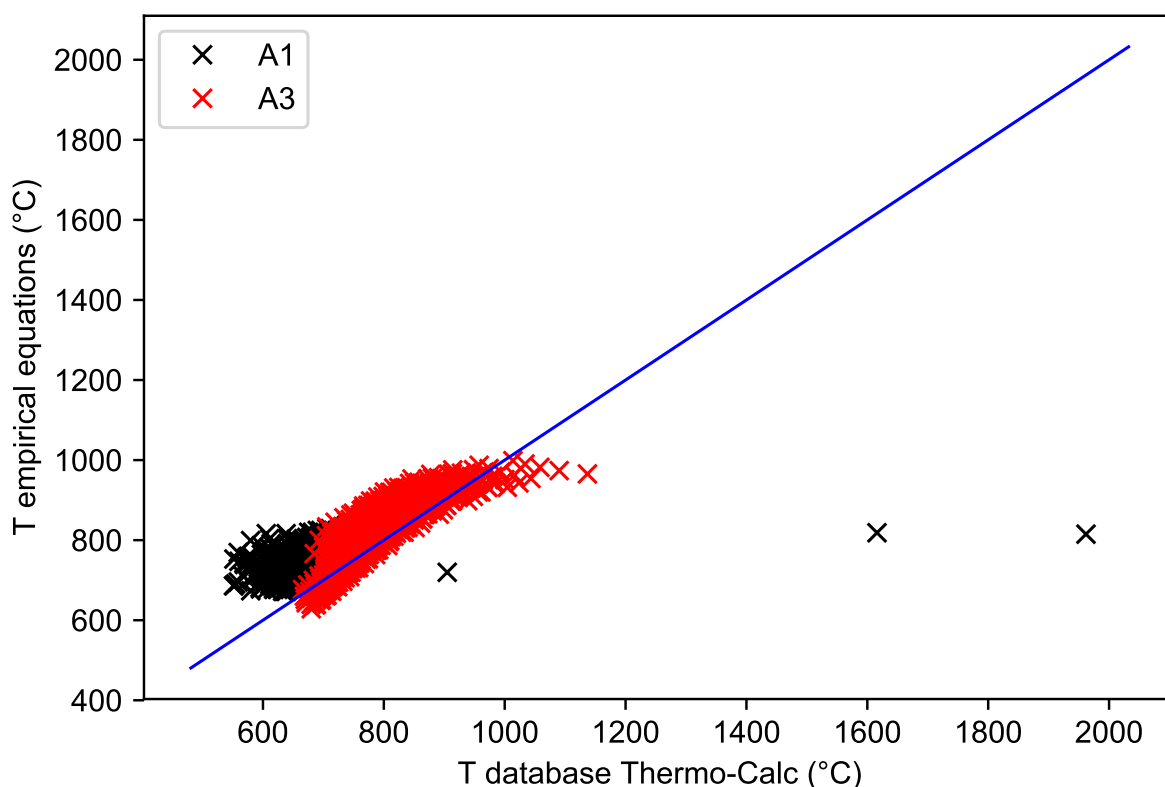


Figura 14 - Gráfico de temperatura crítica calculada pela equação empírica de Andrews e temperatura crítica do banco de dados

Nota-se que, para as temperaturas A3, existe uma correlação maior com os valores calculados pela equação empírica, enquanto para A1 existe uma divergência maior. Isso pode estar relacionado a erros no script que extrai a temperatura A1, que ainda está em revisão. Outro fator que influencia na divergência é o fato de a equação de Andrews não ter membros interdependentes entre os elementos químicos, o que na prática não se aplica.

Para averiguar essa interdependência, plotou-se as isopletras de temperatura para cada elemento, variando a composição de carbono. Para cada elemento de liga, plotou-se cinco curvas, correspondentes aos cinco níveis de composição escolhidos.

Para o manganês e níquel, nota-se que a baixas concentrações de carbono a concentração do elemento de liga tem muita interferência no valor das temperaturas de transformação. A partir de 0,8% C, as temperaturas são mais próximas para todos os níveis. Uma possível explicação é que os três elementos são gamagênicos.

Já para elementos alfa gênicos, como o cromo, a relação se inverte. Para baixas concentrações de carbono, os valores de temperatura ficam próximos, e a partir de 0,4% de carbono a concentração do cromo já contribui para sua divergência.

Um caso intermediário é o do silício, que apesar de alfa gênico, tem influência na temperatura tanto a baixas quanto a mais altas concentrações de carbono, embora a influência a baixas concentrações seja maior.

5.2 REGRESSÃO LINEAR

Após o tratamento dos dados, pontos cuja temperatura crítica correspondente não existisse foram eliminados e os dados foram separados entre hipo e hipereutetóide. A Tabela 3 mostra o tamanho do banco de dados para cada condição.

Tabela 3 - Tamanho dos conjuntos de dados usados para regressão linear

	A1	A1'	A3
Hipoeutetóide	1151	1643	2303
Hipereutetóide	3308	4339	4542
Total	4459	5982	6845

Os valores de R^2 para os nove modelos são mostrados na Tabela 4 a seguir.

Tabela 4 - Valores de R^2 para regressão linear

	A1	A1'	A3
Hipoeutetóide	0.8663	0.9743	0.9607
Hipereutetóide	0.9817	0.9934	0.9971
Todos os dados	0.9425	0.9748	0.8774

Nota-se que o conjunto de dados para determinar a temperatura A1 é o menor. Isso ocorre pois três dos cinco elementos estudados são gamagênicos, reduzindo a probabilidade de existir A1. A quantidade reduzida de dados teve efeito no valor de R^2 , o menos satisfatório dos modelos, principalmente para os pontos hipoeutetóides.

Os valores de R^2 obtidos foram satisfatórios porém muito altos, por isso houve o cuidado em se verificar a possibilidade de *overfit*, como será mostrado a seguir.

5.2.1 Regressão Linear de A1

A Figura 15 a seguir mostra os gráficos de valores preditos versus esperados para a temperatura A1.

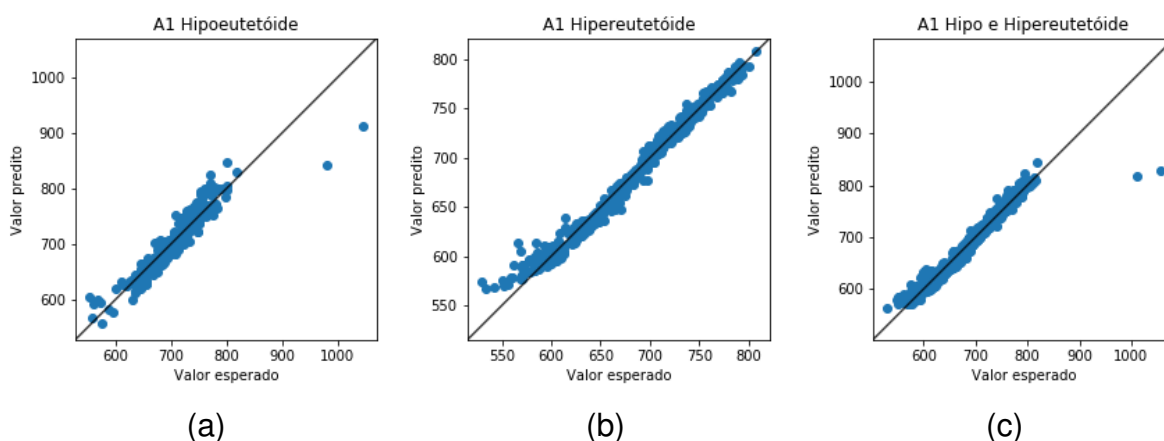


Figura 15 - Valores preditos x Valores esperados da regressão linear de A1, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores

Nota-se que, mesmo com a quantidade de dados reduzida, os dados tiveram um bom *fit* com a reta $y = x$. Os problemas estão localizados no extremo inferior, onde a curva de A1 no diagrama binário Fe-C não se assemelha a uma reta. Essa faixa corresponde às temperaturas mais baixas dos hipoeutetóides, onde há poucos pontos devido à proximidade do campo α , no qual A1 não existe.

5.2.2 Regressão Linear de A1'

A Figura 16 a seguir mostra os gráficos de valores preditos versus esperados para a temperatura A1'.

A temperatura A1', assim como A1, é mais difícil de ser determinada na proximidade do campo α , como é possível notar nas temperaturas mais baixas dos hipoeutetóides. O maior número de dados utilizados para o treino resultou em um melhor ajuste das curvas.

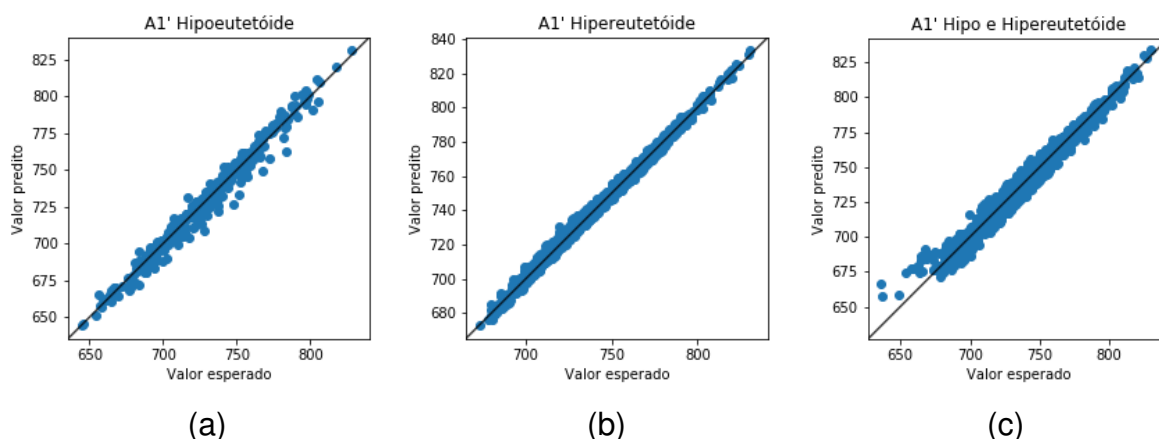


Figura 16 - Valores preditos x Valores esperados da regressão linear de A1', para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores

5.2.3 Regressão Linear de A3

A Figura 17 a seguir mostra os gráficos de valores preditos versus esperados para a temperatura A3.

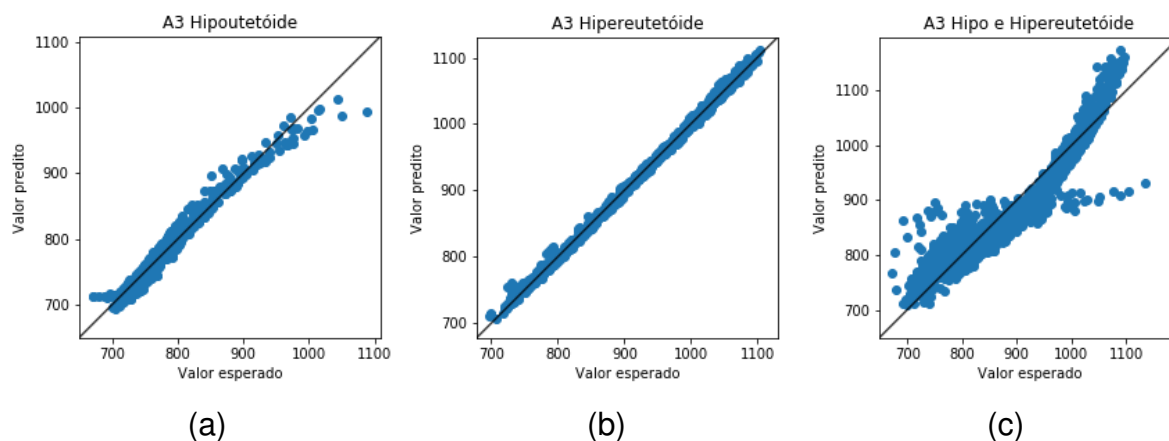


Figura 17 - Valores preditos x Valores esperados da regressão linear de A3, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores

Para essa temperatura crítica, os pontos que menos se ajustaram foram os hipoeutetóides. Isso possivelmente ocorre pois a curva correspondente no diagrama binário Fe-C tem uma inclinação mais variável do que a hipereutetóide. Além disso, nota-se menor quantidade de pontos a temperaturas altas, ou seja, a baixas concentrações de carbono. As predições para composições hipereutetóides tiveram melhor ajuste, não apenas pelo maior conjunto de dados mas também pela curva correspon-

dente no diagrama binário Fe-C ter inclinação mais constante.

O modelo que utilizou todo o conjunto de dados não teve um bom ajuste, como era esperado, devido à inversão da curva no ponto eutetóide do diagrama binário Fe-C

5.2.4 Comparação com banco de dados aleatórios

Ao todo foram gerados 1375 dados de teste, que passaram novamente pela predição para se avaliar os ajustes. As Tabelas 5, 6 e 7 a seguir mostram os novos valores de R^2 recalculados para cada modelo.

Tabela 5 - Valores de R^2 para regressão linear de A1 com dados aleatórios

	Original	Aleatório
Hipoeutetóide	0.8663	0.7304
Hipereutetóide	0.9817	0.9806
Todos os dados	0.9425	0.9752

Tabela 6 - Valores de R^2 para regressão linear de A1' com dados aleatórios

	Original	Aleatório
Hipoeutetóide	0.9743	0.8137
Hipereutetóide	0.9934	0.9941
Todos os dados	0.9748	0.8754

Tabela 7 - Valores de R^2 para regressão linear de A3 com dados aleatórios

	Original	Aleatório
Hipoeutetóide	0.9607	0.9603
Hipereutetóide	0.9971	0.9981
Todos os dados	0.8774	0.9207

Os resultados obtidos dos dados aleatórios possibilitou uma comparação de métricas, uma vez que não foi encontrado na literatura o que seria um valor satisfatório de R^2 para a predição dessas temperaturas em específico. Nota-se que não houve muita variação dos valores originais para os aleatórios, entretanto, a hipótese de *overfit* não pode ser completamente descartada. É possível que a alta complexidade do modelo, devido ao grande número de dados de entrada, esteja elevando as métricas.

5.2.5 Isopletas das Regressões Lineares

5.3 REDE NEURAL

Após o tratamento do banco, foram obtidos 6845 dados normalizados, que foram separados entre 5476 para treino e 1369 de teste. Os parâmetros da rede neural foram variados para se definir o melhor modelo.

5.3.1 Testes para obtenção do modelo

Avaliando-se o efeito da taxa de aprendizado e do número de neurônios da camada intermediária no erro quadrático médio, obteve-se os gráficos da Figura 18 a seguir.

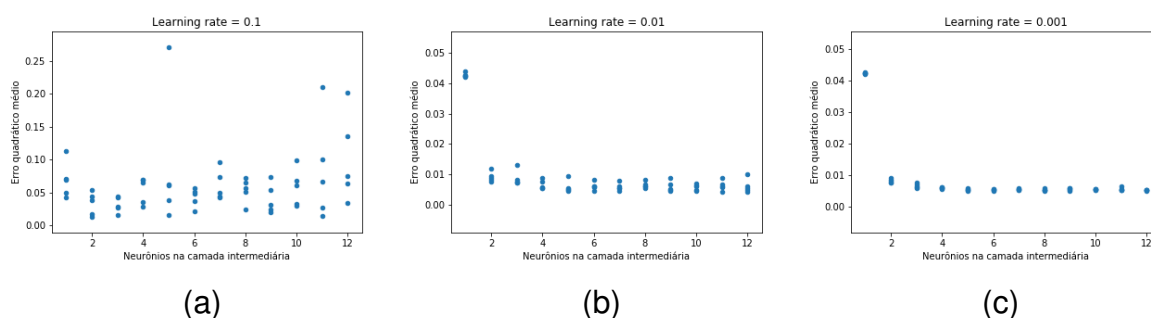


Figura 18 - Erro quadrático médio x Número de neurônios na camada intermediária para (a) Taxa de aprendizado = 0.1, (b) Taxa de aprendizado = 0.01, (c) Taxa de aprendizado = 0.001

Nota-se que, à medida em que a taxa de aprendizado diminui, a variação do erro quadrático médio diminui para um mesmo número de neurônios. Dessa forma, determinou-se o valor ideal para a taxa de aprendizado, 0.001. Em seguida, foi avaliado o efeito do número de iterações e do número de neurônios na função perda. A Figura 19 a seguir mostra o comportamento da função perda com o número de iterações para um, seis e doze neurônios.

Pode-se constatar que para poucos neurônios a função perda se estabiliza com menos iterações, porém a um valor maior. Aumentando-se número de neurônios, as 100 iterações se tornam cada vez mais necessárias para se obter um valor adequado de perda.

Considerando a taxa de aprendizado escolhida, nota-se que o erro quadrático médio estabiliza a partir de cinco neurônios e que 100 iterações são o suficiente para

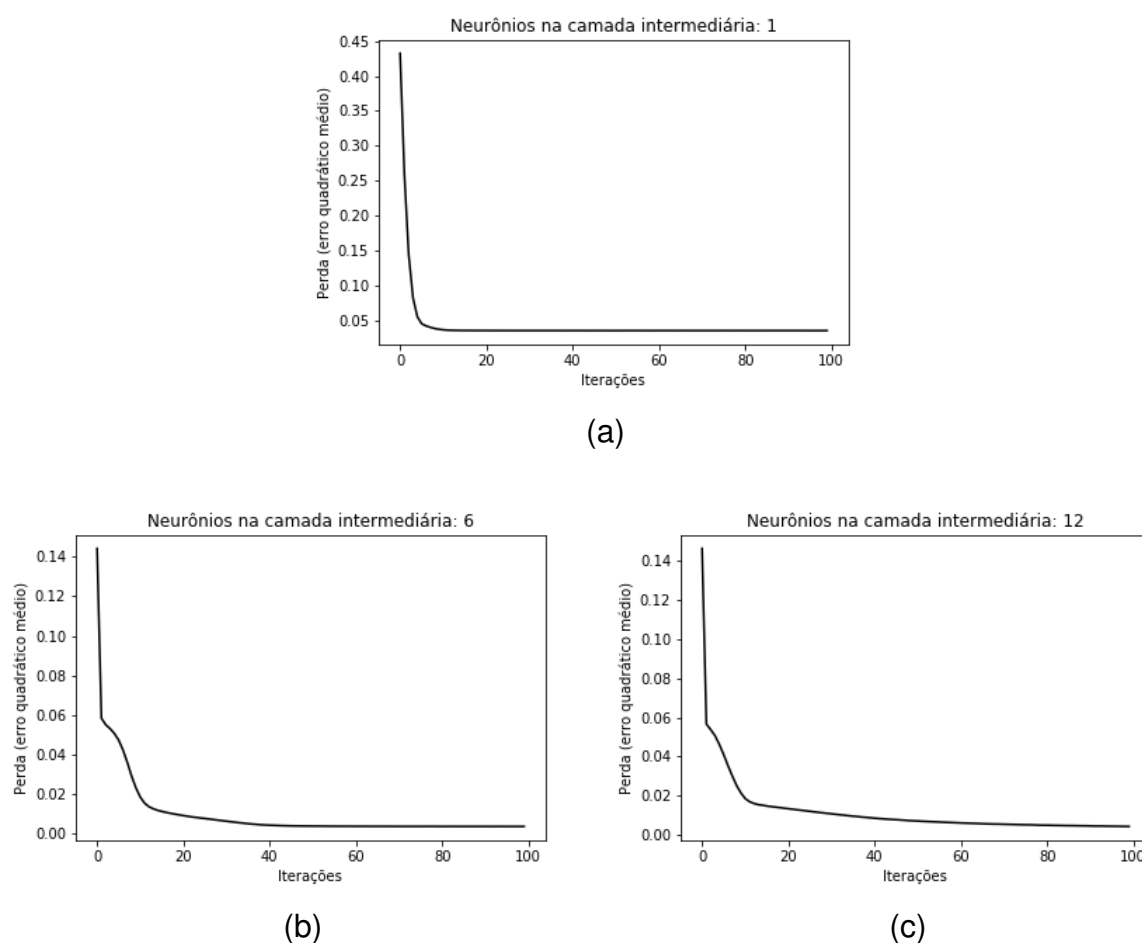


Figura 19 - Perda (erro quadrático médio) x Número de iterações para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária

se obter uma perda adequada. Dessa forma, foi estabelecido que o ponto ótimo seria de seis neurônios e 100 iterações, considerando também o tempo computacional.

Para confirmar se esses parâmetros eram adequados, foram analisados os valores preditos versus esperados variando o número de neurônios. A Figura 20 a seguir mostra esse comportamento para um, seis e doze neurônios, onde os círculos preenchidos mostram os dados de treino e os triângulos, os de teste.

Nota-se que as previsões para seis e doze neurônios são próximas e, considerando o tempo computacional, a primeira opção é, de fato, o ponto ótimo.

5.3.2 Isopletas da Rede Neural

Definindo todos os parâmetros, as previsões do modelo escolhido foram usadas para plotar isopletas variando um dos elementos e fixando os demais, com o intuito de se comparar os valores obtidos pelo Thermo-Calc® com essas previsões. Como

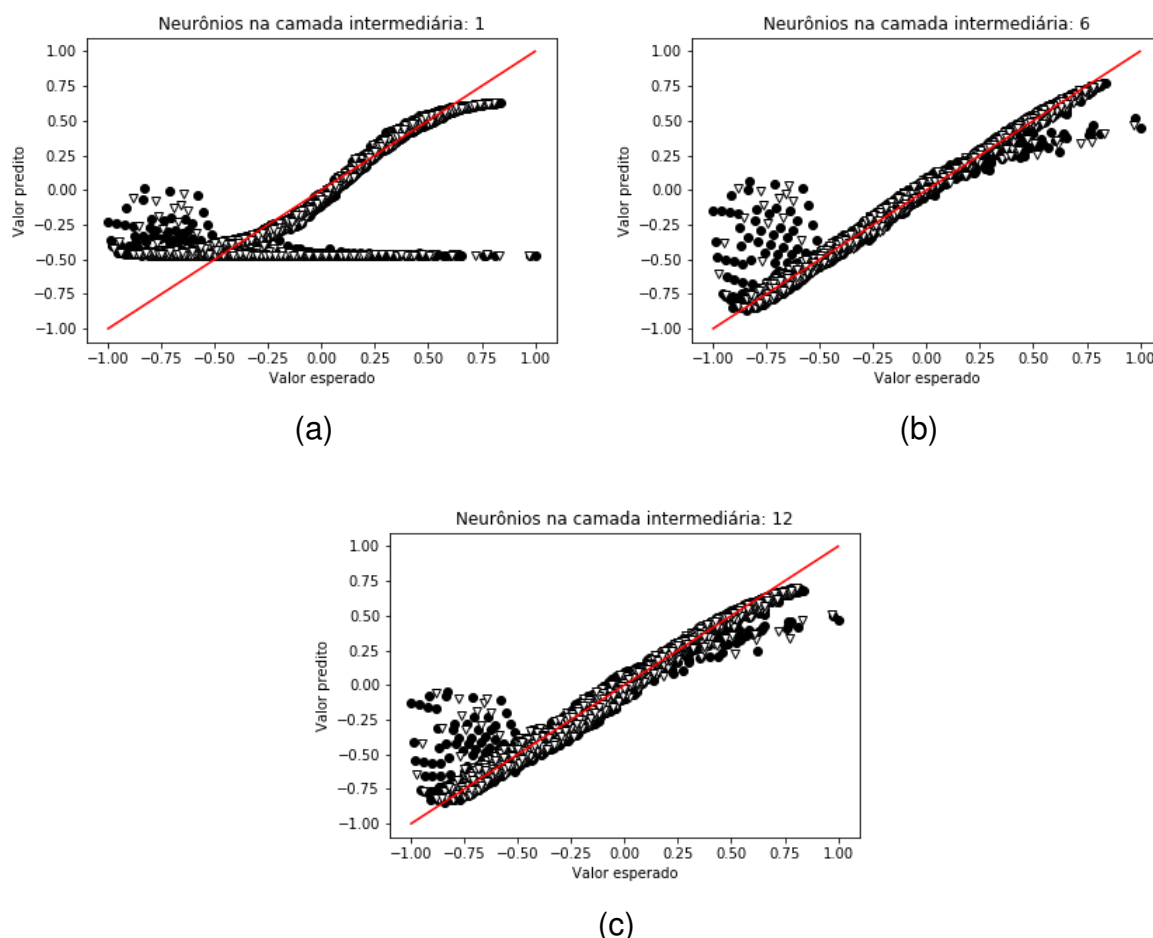


Figura 20 - Valores Preditos x Valores Esperados para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária. ● : valores de treino, △ : valores de teste

mostram as Figuras 21, 22, 23, 24 e 25 os elementos variáveis foram plotados nas composições de nível zero e nível dois, que correspondem às composições mínimas e intermediárias, respectivamente.

Nota-se que, para a maioria dos casos, os valores preditos (linha cheia) são satisfatórios em relação ao esperado (pontos em forma de "x") .

Para o Carbono, a dificuldade está no ajuste do ponto de inversão da curva, ponto mais suscetível a erros, como foi observado na Figura 17 da regressão linear e na Figura 20b da predição da rede neural, na qual possivelmente os dados que destoam da reta estão próximos a esse ponto. Um conjunto de dados de treino com mais pontos corretos dessa região poderia contribuir para uma melhor predição.

Para baixas concentrações dos elementos, o modelo para o silício foi destoante, como mostra a Figura 23a. Uma possível explicação está no diagrama binário Fe-Si, da Figura 27, que mostra o campo γ fechado a baixas concentrações de Si. O mesmo

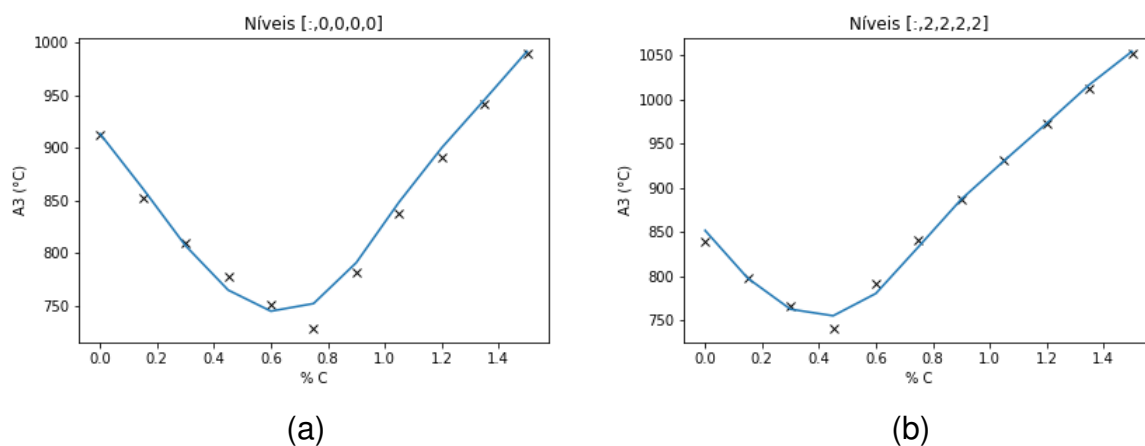


Figura 21 - Isopletas de Carbono geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

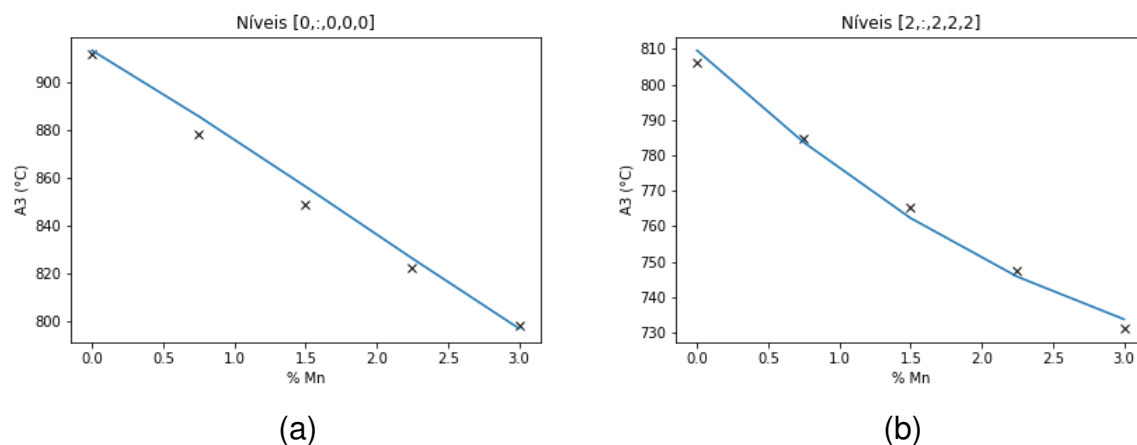


Figura 22 - Isopletas de Manganês geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

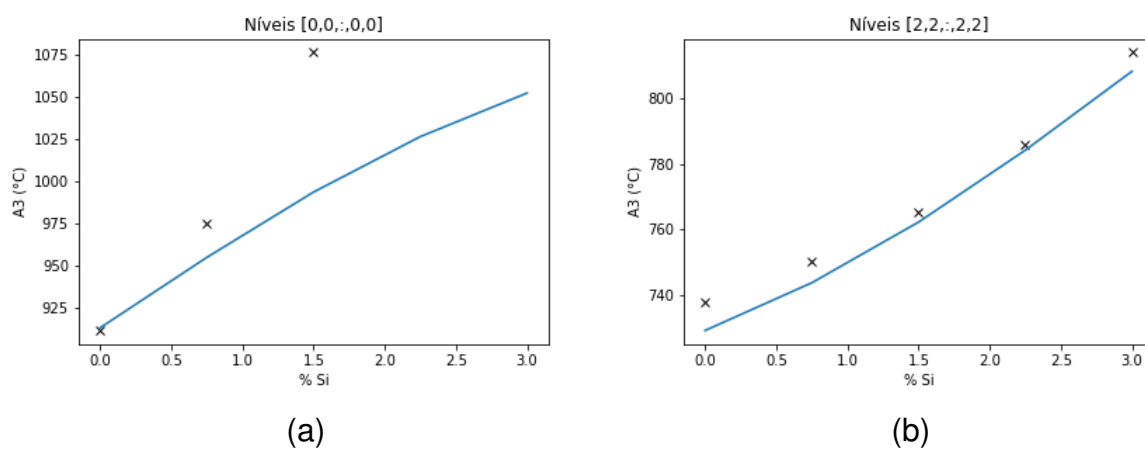


Figura 23 - Isopletas de Silício geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

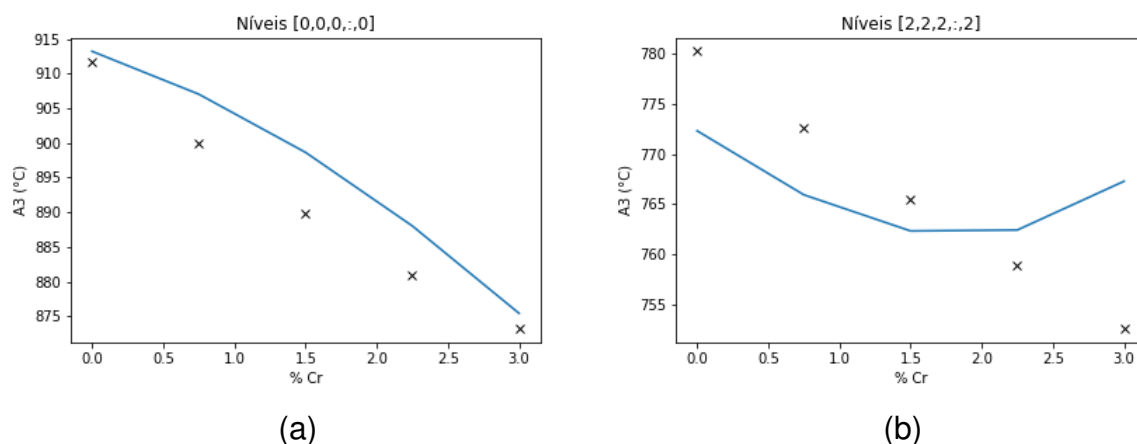


Figura 24 - Isopletas de Cromo geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

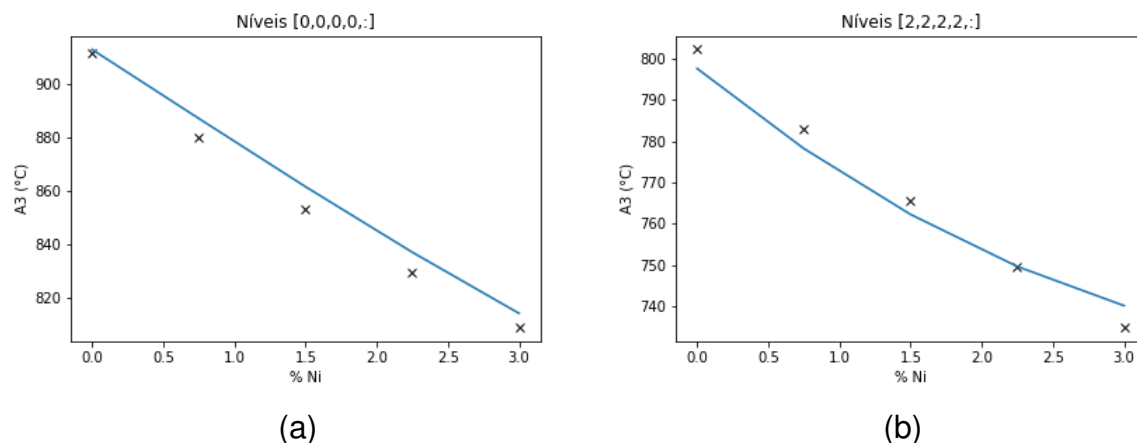


Figura 25 - Isopletas de Níquel geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

vale para o cromo, que além de ser do grupo de domínio- γ fechado, tem um γ -loop. Isso pode ter contribuído para uma má previsão do modelo nesses casos.

5.3.3 Métricas da Rede Neural

Apesar de o modelo não ter predito tão bem a influência de alguns elementos em A3, suas métricas foram consideradas satisfatórias. Para o ponto ótimo discutido anteriormente, de taxa de aprendizado 0.001, seis neurônios na camada intermediária e 100 iterações, o erro quadrático médio final foi de 0.0051 e o coeficiente de determinação (R^2), 0.9734. Esses valores tornam menos provável a hipótese de a regressão linear estar com overfit devido a parâmetros em excesso.

6 CONCLUSÕES PARCIAIS

Até o momento foram realizadas as etapas de simulações termodinâmicas e as rotinas para extração das temperaturas críticas foram implementadas com sucesso, de modo que o banco de dados que alimentará os algoritmos de aprendizado de máquina já foi construído. A comparação dos dados das temperaturas com equações empíricas para predição das temperaturas $A1$ e $A3$ mostra que, embora qualitativamente tanto os dados obtidos no presente trabalho quanto as equações da literatura apresentem tendências semelhantes, quantitativamente a correlação não é precisa.

7 PRÓXIMAS ETAPAS

Nas próximas etapas do trabalho serão implementados os algoritmos de aprendizado de máquina para predição das temperaturas críticas, a citar, redes neurais e regressão multivariável. O efeito dos elementos de liga nas temperaturas críticas serão avaliados com base nos parâmetros de ajuste dos algoritmos, como, por exemplo, os coeficientes de regressão.

REFERÊNCIAS

ANDREWS, K. W. Empirical formulas for the calculation of some transformation temperatures. **Journal of the Iron and Steel Institute**, v. 203, p. 721–727, 1965.

ASM International. **ASM Metals Handbook, Vol 4 - Heat Treating**. [S.l.: s.n.], 1991. 2173 p.

BÉLISLE, E. et al. Evaluation of machine learning interpolation techniques for prediction of physical properties. **Computational Materials Science**, v. 98, p. 170–177, 2015. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.032.

BHADESHIA, H. K. D. H. Neural Networks in Materials Science. **ISIJ International**, v. 39, n. 10, p. 966–979, 1999. DOI: 10.2355/isijinternational.39.966.

CAPDEVILA, C. et al. Proposal of an empirical formula for the austenitising temperature. **Materials Science and Engineering A**, v. 386, n. 1-2, p. 354–361, 2004. DOI: 10.1016/j.msea.2004.07.027.

DIGGES, T. G.; ROSENBERG, S. J.; GEIL, G. W. **NB Monograph 18: Heat Treatment and Properties of Iron and Steel**. [S.l.: s.n.], 1960.

DOSSETT, J. L.; BOYER, H. E. **Practical Heat Treating: Second Edition**. [S.l.: s.n.], 2006. 296 p. DOI: 10.1361/pht2006.

GAVARD, L. et al. Bayesian neural network model for austenite formation in steels. **Materials Science and Technology**, v. 12, n. 6, p. 453–463, jun 1996. DOI: 10.1179/mst.1996.12.6.453.

GORNI, A. A. **Steel Forming and Heat Treating Handbook**. [S.l.: s.n.], 2012. 140 p. January. DOI: 10.1016/S0026-0576(03)90166-8.

HONEYCOMBE, R. W. K. **Aços. Microestrutura e Propriedades**. [S.l.: s.n.], 1982. 91–96 p.

MASSALSKI, T. B. **Binary alloy phase diagrams**. 1ed. ed. [S.l.: s.n.], 1996. 1293 p. v. 1.

PAWLOWSKI, B. Determination of critical points of hypoeutectoid steels. **Archives of Metallurgy and Materials**, v. 57, n. 4, p. 957–962, 2012. DOI: 10.2478/v10172-012-0106-4.

SAE Society of Automotive Engineers. **SAE Handbook vol. 1**. [S.l.: s.n.], 1983.

SILVA, A. L. C.; MEI, P. R. **Aços e Ligas Especiais**. 3a. ed. [S.l.: s.n.], 2010. 646 p.

SOUZA, S. A. de. **Composição Química dos Aços**. 1. ed. [S.l.]: Edgar Blücher Ltda., 1989.

Thermo-Calc Software AB. **Thermo-Calc User's Guide**. [S.l.: s.n.], 2003. DOI: 10.1038/ng980.

TOTTEN, G. **Steel Heat Treatment Handbook**. 2nd. ed. [S.l.]: CRC Press, 2006. 4. DOI: 10.1017/CBO9781107415324.004.

ANEXO A – Diagramas binários

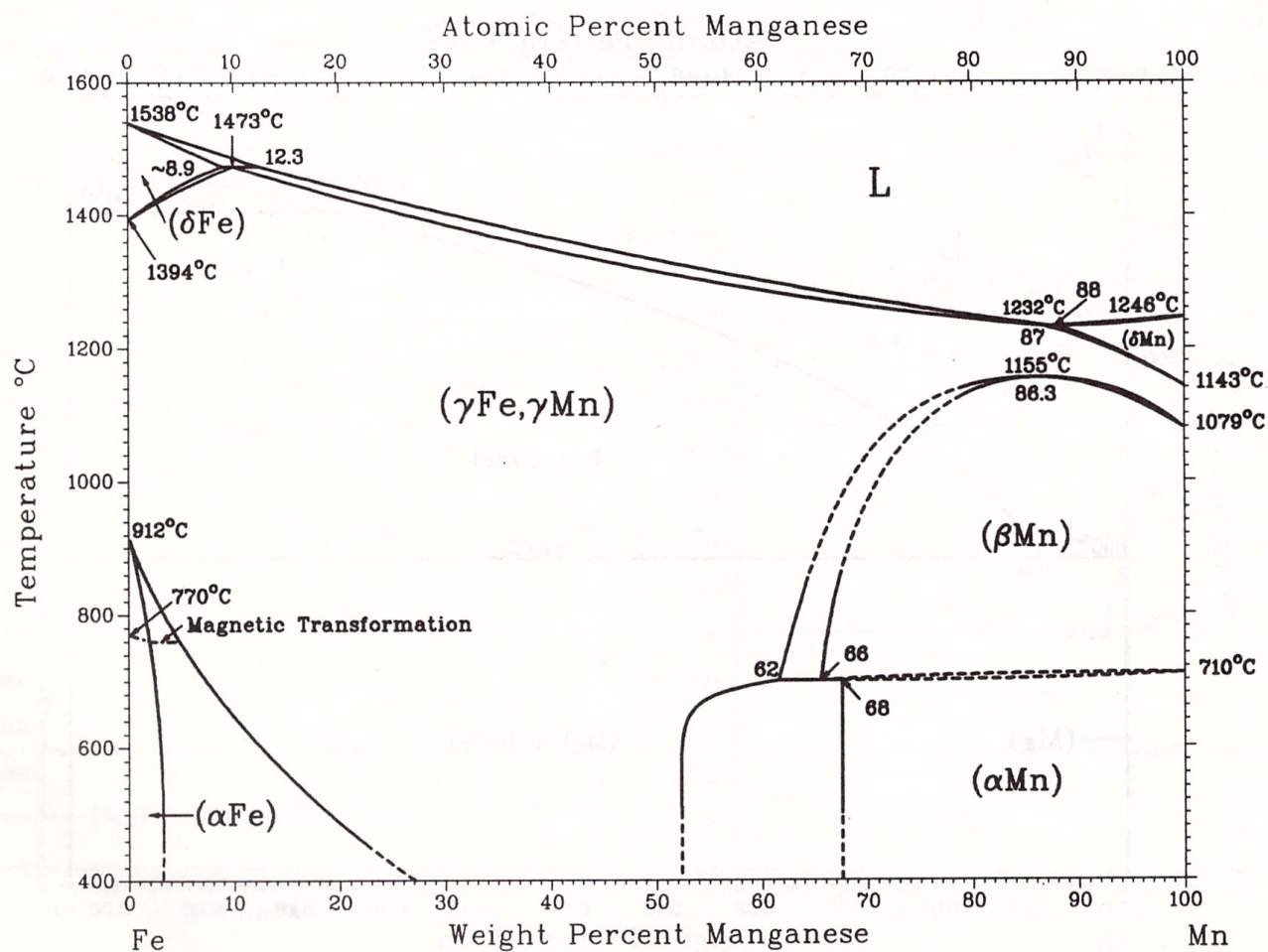


Figura 26 - Diagrama binário Fe-Mn

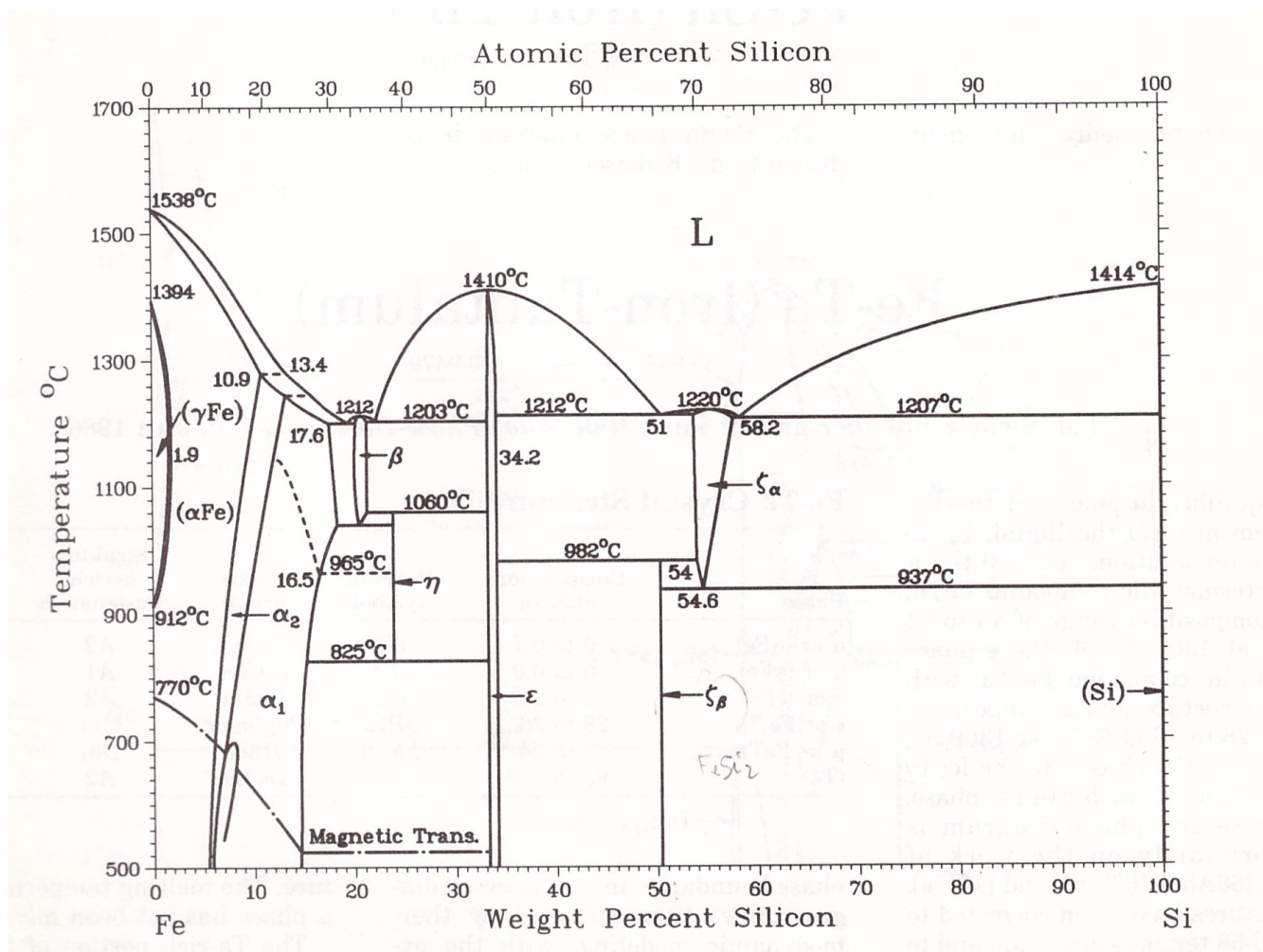


Figura 27 - Diagrama binário Fe-Si

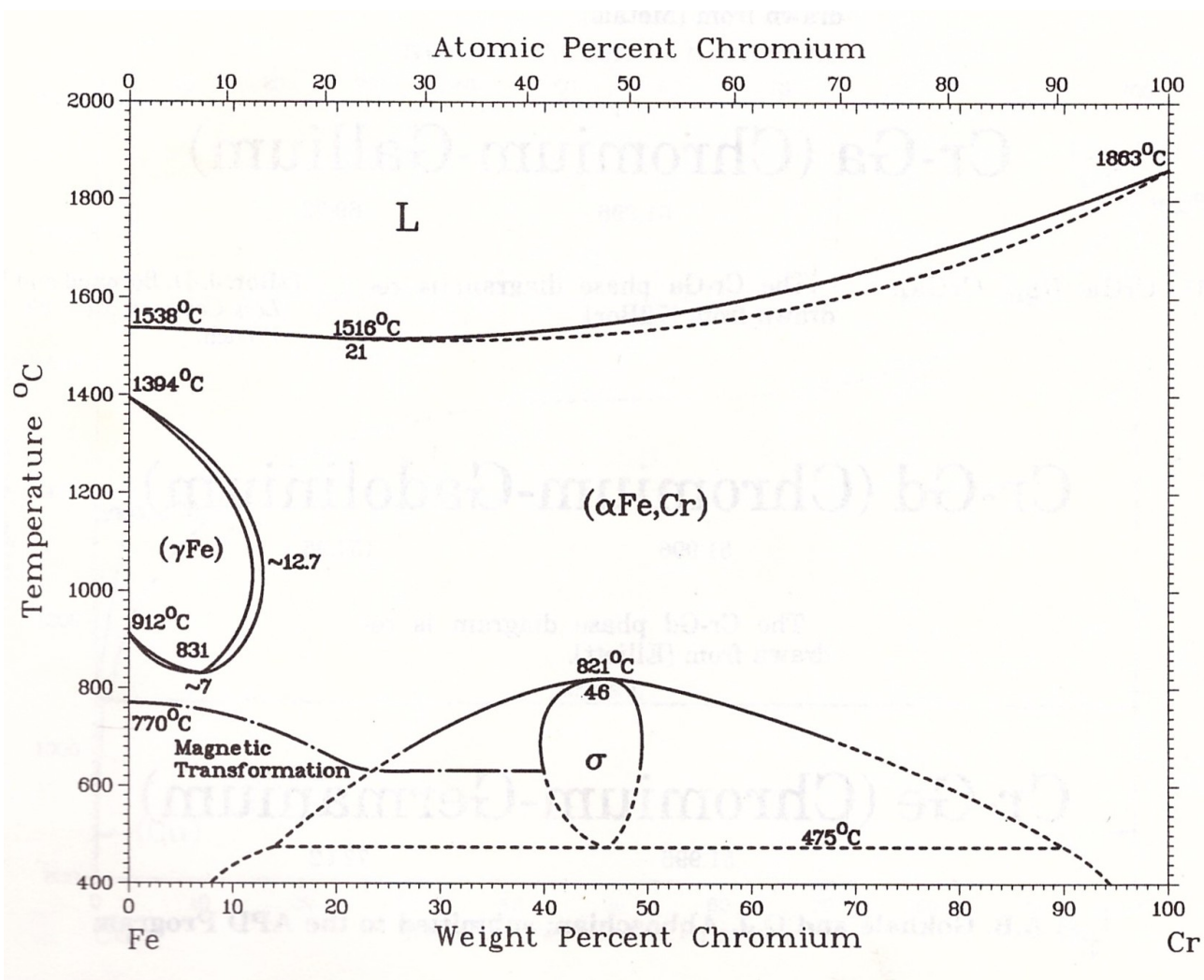


Figura 28 - Diagrama binário Fe-Cr

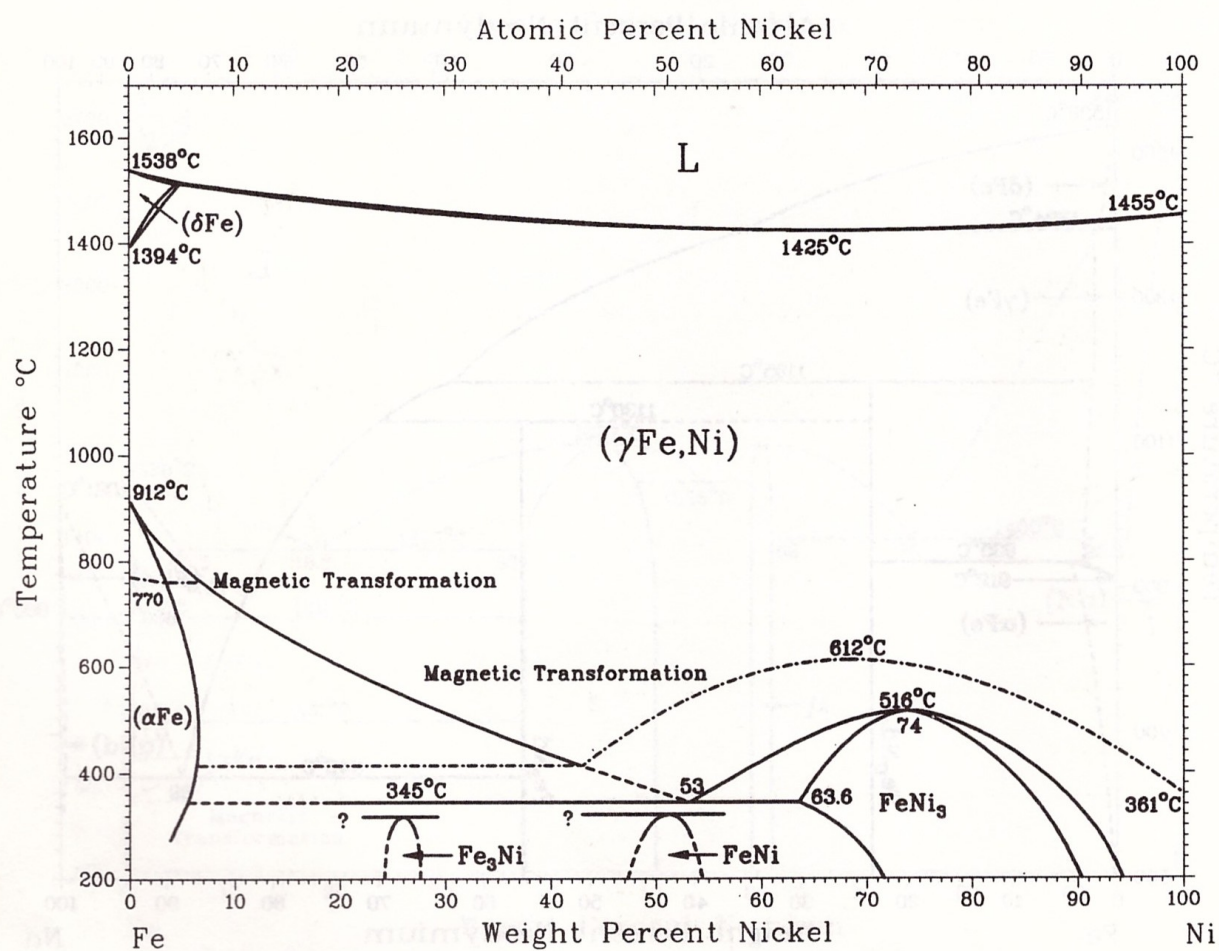


Figura 29 - Diagrama binário Fe-Ni