

PAULA ARANTES RIBEIRO

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

Departamento de Engenharia
Metalúrgica e de Materiais da
Escola Politécnica da USP

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

Departamento de Engenharia
Metalúrgica e de Materiais da
Escola Politécnica da USP

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

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

TF - 2018
R 352,00
2905803
H - 2018 T

DEDALUS - Acervo - EPMT



31800009346

Catalogação-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.

56 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.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à minha família por ter apoiado, entre tantas decisões, a minha vida de estudante. Em especial meu pai, minha primeira inspiração para seguir a carreira em tecnologia. Aos meus professores, desde os do ensino fundamental, por terem instigado em mim o apreço pelos estudos, os do ensino médio, por motivarem a escolha da minha carreira, aos do ensino superior, pelos aprendizados que levarei para toda a vida.

A todos os amigos que fiz ao longo dessa jornada, pelo apoio nos piores momentos e pelas boas memórias. Ao Acappolli, que, por meio da música, trouxe mais alegria à nossa Escola e aos meus dias. Às mulheres incríveis do USP Red Pandas e aos amigos do Politécnica Rats, por terem me passado, com o esporte, a garra para seguir em frente, por serem a minha força dentro e fora de campo. A todos do Centro Moraes Rêgo, por criarem um espaço seguro e acolhedor, por todas as lembranças emocionantes. Ao Artur Vilas Boas, por ter me incentivado a seguir a carreira em tecnologia, por todos os conselhos de vida e pelo amparo quando mais precisei.

Às empresas que depositaram em mim sua confiança e me ajudaram a crescer pessoal e profissionalmente. Aos amigos da Cognitivo.AI, por acreditarem no meu potencial como desenvolvedora e despertarem em mim o amor pela ciência de dados. Ao pessoal da Iguanafix, por não terem medo de me dar responsabilidades e assim possibilitar tamanho crescimento. À Creditas pela oportunidade, em especial ao Bruno Belluomini por todo o apoio e por me passar seus conhecimentos em ciência de dados.

Por fim, agradeço aos meus professores orientadores, Prof. Dr. Hélio Goldenstein, pelos ensinamentos, e Dr. Arthur Seiji Nishikawa, sua companhia tornou menos complicada a tarefa de se escrever um trabalho de tamanha importância.

Now is better than never

(Tim Peters)

RESUMO

A proposta deste trabalho é avaliar diferentes algoritmos de aprendizado de máquina para prever temperaturas críticas de transformações de fases. Cálculos de termodinâmica computacional utilizando o software Thermo-Calc foram usados para gerar um banco de dados que representasse as composições químicas de aços de engenharia. A partir dele, foram elaborados modelos de regressão linear multivariável e uma rede neural, cujas métricas e predições foram analisadas e comparadas entre si.

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

ABSTRACT

The purpose of this work is to evaluate distinct machine learning algorithms to predict critical phase transformations temperatures. Computational thermodynamics calculations using Thermo-Calc software were used to generate a database representing the chemical compositions of engineering steels. This database was used to elaborate multivariate linear regression models and a neural network, whose metrics and predictions were analyzed and compared.

Keywords: Steel. Thermodynamics. Critical temperatures. Machine learning. Regression. Neural Networks

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	Diagrama de equilíbrio ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)	15
Figura 2	Diagrama de fases metaestável ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)	16
Figura 3	Diagrama de fases Fe-C para aço 1% Mn, em massa	17
Figura 4	Fração molar de fase versus Temperatura para aço 1%C 1% Mn, em massa	18
Figura 5	Classificação dos domínios γ sob influência dos elementos de liga: a) aberto; b) expandido; c) fechado; d) contraído. (HONEYCOMBE, 1982)	21
Figura 6	Determinação gráfica das temperaturas críticas em aço (a) hipoeutetóide, (b) eutetóide e (c) hipoeutetóide, a partir de dados do dilatômetro (PAWLOWSKI, 2012)	22
Figura 7	Arquitetura da rede neural	26
Figura 8	Operações em um único neurônio (SKALSKI, 2017)	27
Figura 9	Exemplos de extração de temperaturas críticas para a) liga hipoeutetóide, b) liga hipereutetóide e c) liga hipoeutetóide sem cementita	35
Figura 10	Gráfico de temperatura crítica calculada pela equação empírica de Andrews e temperatura crítica do banco de dados	36
Figura 11	Isopletas de temperatura variando Carbono para composições do banco de dados de: (a) Manganês, (b) Silício, (c) Cromo, (d) Níquel	37
Figura 12	Valores preditos vs. Valores esperados da regressão linear de A1, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores	39
Figura 13	Valores preditos vs. Valores esperados da regressão linear de A1', para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores	40
Figura 14	Valores preditos vs. Valores esperados da regressão linear de A3, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores	41
Figura 15	Isopletas de A3 geradas pelas previsões da regressão linear para (a) Carbono; (b) Manganês; (c) Silício; (d) Cromo; (e) Níquel, a nível zero dos demais elementos	43

Figura 16	Erro quadrático médio vs. 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	45
Figura 17	Perda (erro quadrático médio) vs. Número de iterações para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária	46
Figura 18	Valores Preditos vs. Valores Esperados para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária. • : valores de treino, ▽ : valores de teste	47
Figura 19	Isopletas de Carbono geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	47
Figura 20	Isopletas de Manganês geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	48
Figura 21	Isopletas de Silício geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	48
Figura 22	Isopletas de Cromo geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	48
Figura 23	Isopletas de Níquel geradas pelas predições da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2	49
Figura 24	Diagrama binário Fe-Mn (MASSALSKI, 1996)	56
Figura 25	Diagrama binário Fe-Si (MASSALSKI, 1996)	57
Figura 26	Diagrama binário Fe-Cr (MASSALSKI, 1996)	58
Figura 27	Diagrama binário Fe-Ni (MASSALSKI, 1996)	59

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Faixas de composição química dos elementos de liga	29
Tabela 2	Níveis e passos para cada elemento de liga	30
Tabela 3	Tamanho dos conjuntos de dados usados para regressão linear	37
Tabela 4	Valores de R^2 para regressão linear	38
Tabela 5	Valores de R^2 para regressão linear de A1 com dados aleatórios	42
Tabela 6	Valores de R^2 para regressão linear de A1' com dados aleatórios	42
Tabela 7	Valores de R^2 para regressão linear de A3 com dados aleatórios	42
Tabela 8	Valores de R^2 para regressão linear e rede neural de A3 . . .	49

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	12
2 OBJETIVOS	13
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
3.1 OS COMPONENTES DO AÇO	14
3.2 O THERMO-CALC®	15
3.3 TEMPERATURAS CRÍTICAS DE AÇOS	16
3.4 TRATAMENTO TÉRMICO DE AÇOS	19
3.5 EFEITO DOS ELEMENTOS DE LIGA NAS TEMPERATURAS CRÍTICAS E TRATAMENTO TÉRMICO	20
3.6 DETERMINAÇÃO DAS TEMPERATURAS CRÍTICAS	22
3.7 APRENDIZADO DE MÁQUINA E A DETERMINAÇÃO DE TEMPERATURAS CRÍTICAS	23
3.7.1 Modelos de regressão	24
3.7.2 Rede Neural Artificial	26
3.7.3 Preparação dos Dados	28
4 METODOLOGIA	29
4.1 O BANCO DE DADOS	29
4.1.1 Escolha das variáveis	29
4.1.2 Extração de temperaturas críticas	30
4.1.3 Avaliação do banco de dados	31
4.2 REGRESSÃO LINEAR	31
4.3 REDE NEURAL	32
4.4 COMPARAÇÃO DOS MODELOS	33
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	34
5.1 O BANCO DE DADOS	34
5.2 REGRESSÃO LINEAR	37
5.2.1 Regressão Linear de A1	38
5.2.2 Regressão Linear de A1'	38
5.2.3 Regressão Linear de A3	38
5.2.4 Comparação com banco de dados aleatórios	41

5.2.5 Isopletas das Regressões Lineares	42
5.3 REDE NEURAL	44
5.3.1 Testes para obtenção do modelo	44
5.3.2 Isopletas da Rede Neural	45
5.4 COMPARAÇÃO DOS MODELOS	49
6 CONCLUSÕES	50
7 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	51
REFERÊNCIAS	54
ANEXO A – Diagramas binários	56

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 dilatometria, 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 determinação das temperaturas críticas de transformação de fases em aços de engenharia através de algoritmos de aprendizado de máquina, utilizando a base de dados do software Thermo-Calc®, a fim de futuramente disponibilizar uma ferramenta de cálculo simples de se utilizar e aberta à comunidade científica. Além disso, o trabalho compara a acurácia dos métodos para a predição das temperaturas desejadas.

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 puro 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, a disposição atômica do ferro muda de CCC para cúbica de faces centradas (CFC), também chamada de γ -Fe, ou austenita. A estabilidade da austenita permanece até 1400 °C, quando volta a assumir uma estrutura CCC. Esta ferrita de alta temperatura é comumente chamada de δ -Fe devido à diferente faixa de temperatura de ocorrência da fase α – Fe. 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 de uma maior fração de 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

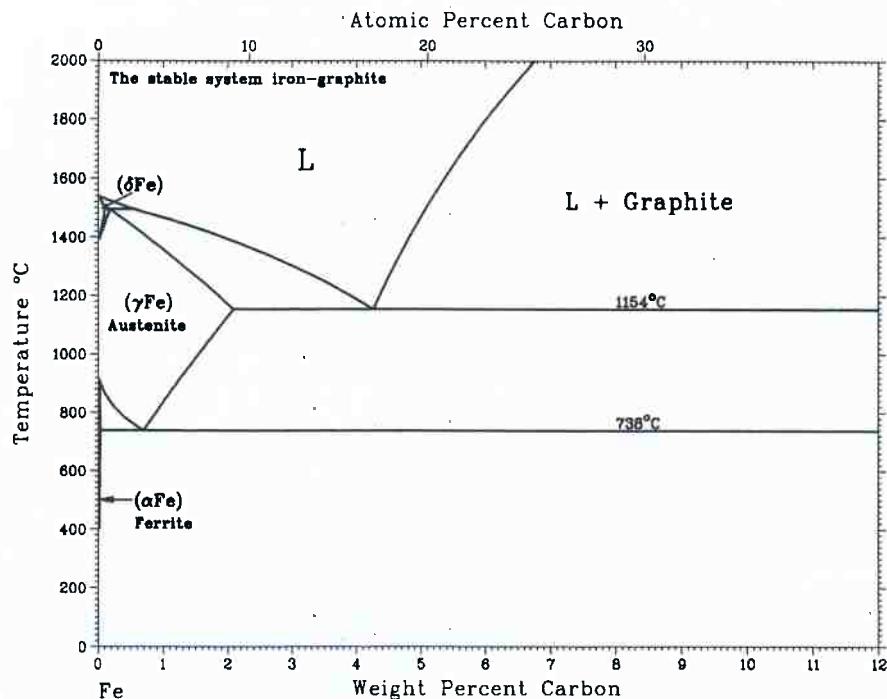


Figura 1 - Diagrama de equilíbrio ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)

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 mostrado na Figura 2 é o ponto eutetóide, no qual coexistem em equilíbrio as fases α , γ e Fe_3C . Para um sistema apenas ferro e carbono, o teor de carbono correspondente a esta fase é aproximadamente 0,8% C em massa. Ligas com teores de carbono inferiores a esta composição são denominadas hipoeutetóides e, ligas com teores de carbono superiores à do ponto eutetóide são chamadas de hipereutetóides (HONEYCOMBE, 1982).

3.2 O THERMO-CALC®

O Thermo-Calc® é um software vinculado a diversos bancos de dados, com o objetivo de tornar os cálculos termodinâmicos mais rápidos e eficientes, ajudando no planejamento e redução de experimentos. Isso é possível devido ao método CALPHAD, que inicialmente era a abreviação de “*Calculation of Phase Diagrams*” e depois foi expandido para “*Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*”. Este método utiliza todas as informações experimentais e teóricas sobre um sistema, aplicando so-

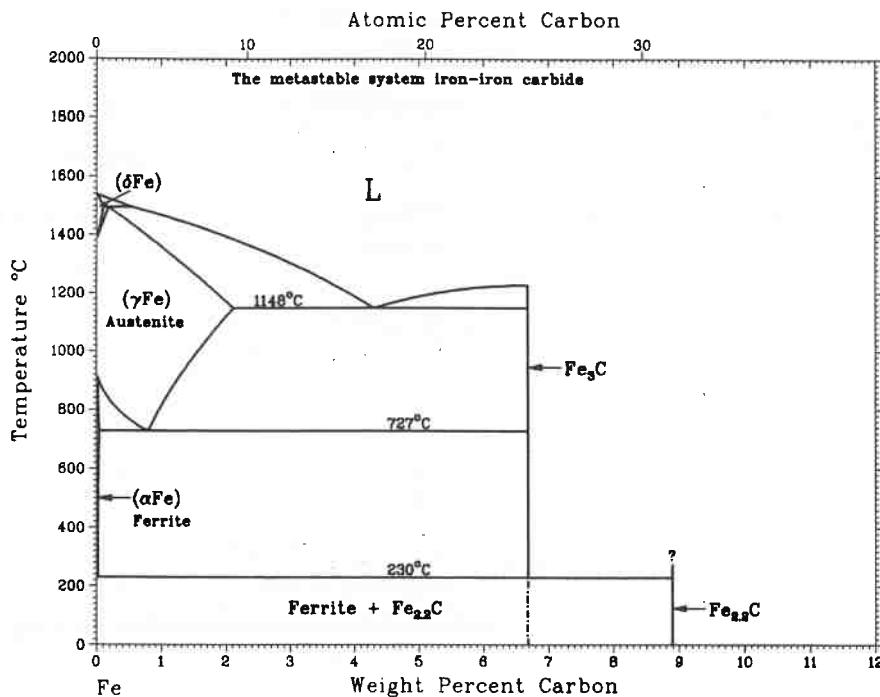


Figura 2 - Diagrama de fases metaestável ferro-carbono (MASSALSKI, 1996)

bre elas um modelo matemático, cujos parâmetros são otimizados de acordo com a minimização da energia livre de Gibbs. Os modelos matemáticos são desenvolvidos considerando as propriedades químicas e físicas do sistema, como a cristalografia, tipo de ligação e propriedades magnéticas.

O software trabalha com módulos, que realizam cálculos diferentes e mostram os resultados de diversas formas, sendo o principal deles o *System-Utilities* ou SYS. Para este trabalho, foi utilizado o módulo POLY, que mediante dados de temperatura-pressão-composição realiza cálculos de diagramas de equilíbrio e de fases, em particular os multicomponentes (Thermo-Calc Software AB, 2003).

3.3 TEMPERATURAS CRÍTICAS DE AÇOS

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, são mostrados a seguir gráficos obtidos por simulações de termodinâmica computacional utilizando o software Thermo-Calc®, correspondentes a uma liga Fe-1%Mn-C.

A Figura 3 corresponde à isopleta do carbono para o teor de 1% em massa de Mn..

As linhas tracejadas na vertical representam três ligas com teores de carbono também fixos. A primeira linha vertical tracejada da Figura 3 representa um aço hipoeutetóide e o gráfico da fração molar das fases em função da temperatura é apresentado na Figura 4a. Um aço com essa composição, mediante aquecimento, mantém as fases α e Fe_3C estáveis até a temperatura A_1 ser atingida, na qual a fase α começa a se decompor em γ . No gráfico da Figura 4a, essa temperatura pode ser notada pela primeira mudança de inclinação da curva da austenita. O aço permanece no campo trifásico ($\alpha + \gamma + \text{Fe}_3\text{C}$) até a temperatura A_1' ser atingida, quando toda a fase Fe_3C é consumida. Para temperaturas crescentes, a fase α se transforma em γ até a temperatura A_3 ser atingida, na qual tem-se 100% de fase γ .

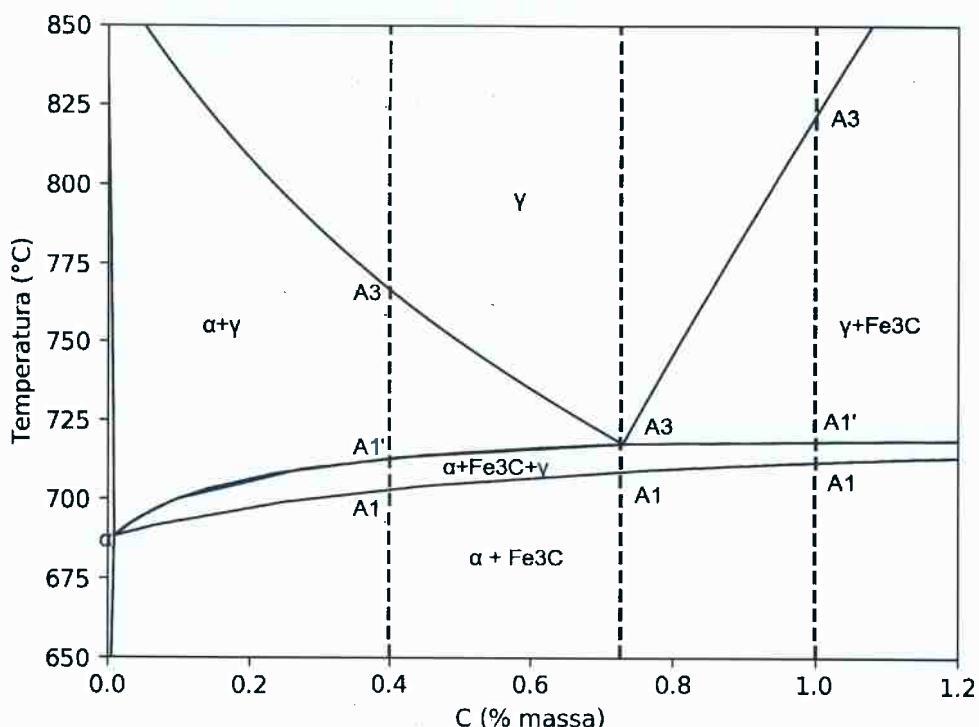


Figura 3 - Diagrama de fases Fe-C para aço 1% Mn, em massa

Um aço eutetóide, correspondente à segunda linha vertical da Figura 3 e ao gráfico da Figura 4b, segue o mesmo raciocínio. A diferença é que não há um campo trifásico e, portanto, não há mais uma temperatura A_1' definida.

Já para um aço hipereutetóide, terceira linha vertical na Figura 3 e gráfico da Figura 4c, a diferença é que o segundo campo bifásico é constituído por γ e Fe_3C , até atingir o ponto em que toda a fase Fe_3C se transforma em γ . Algumas referências, como Digges, Rosenberg e Geil (1960), fazem distinção para a temperatura A_3 de

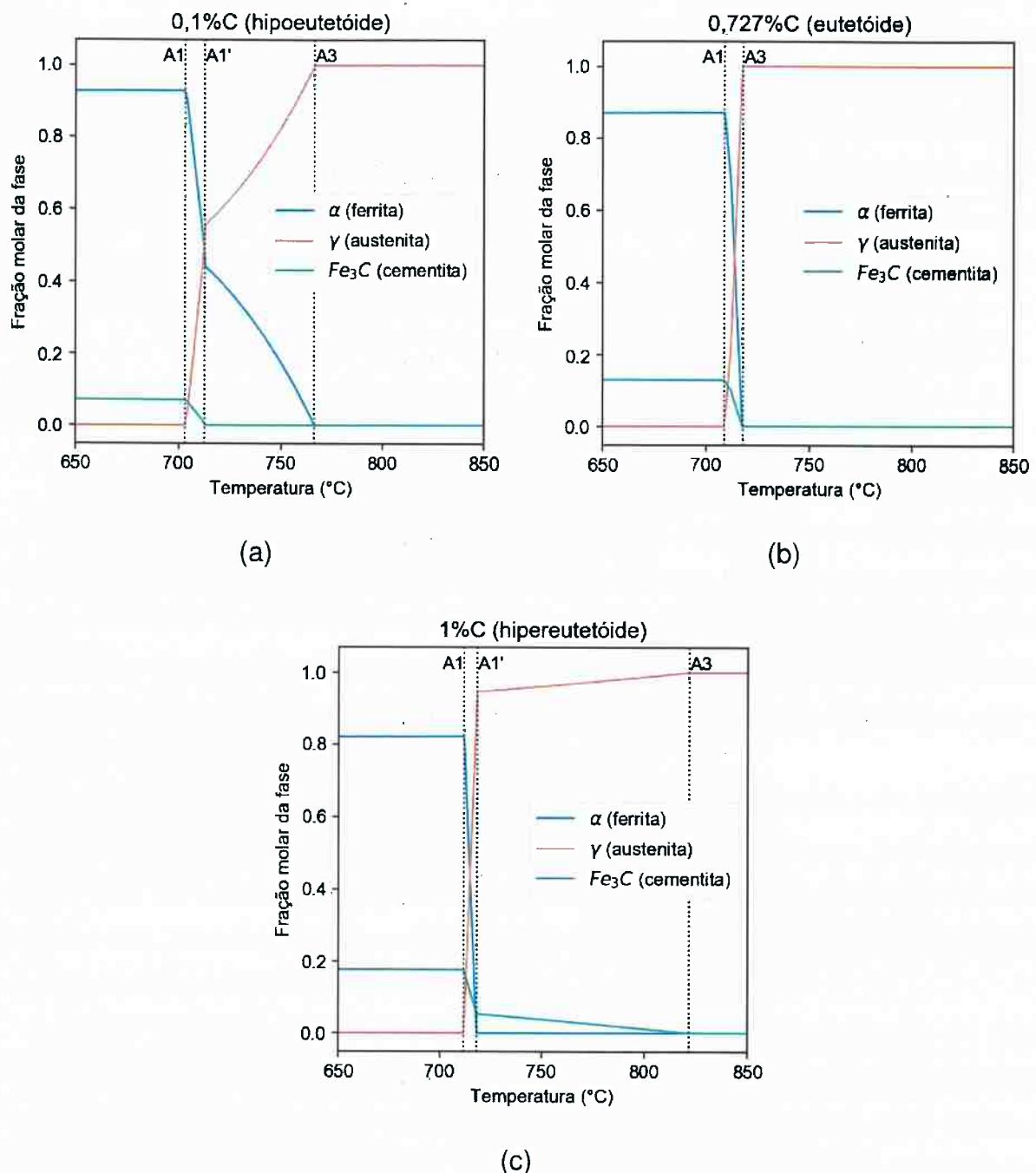


Figura 4 - Fração molar de fase versus Temperatura para aço 1% C 1% Mn, em massa

aços hipereutetóides, chamando-a de A_{cm} , devido à diferença de campos bifásicos. No presente trabalho, ambas serão chamadas de A_3 , por corresponderem à menor temperatura em que a fração de austenita é 100%.

Em resumo, pode-se dizer que a temperatura A_1 corresponde à máxima temperatura em que a fração de austenita é zero, enquanto a A_3 é a mínima temperatura cuja fração de austenita é 100% e A_1' é o limite superior do campo intercrítico de três

fases (HONEYCOMBE, 1982).

É possível ainda diferenciar a temperatura crítica no resfriamento da aquecimento, utilizando respectivamente as letras “r” e “e”. Sob aquecimento e resfriamento lentos (ou seja, sob condições de equilíbrio) elas devem ser iguais. Na prática, as taxas de resfriamento ou aquecimento aplicadas deslocam as temperaturas Ae1 de Ar1 e Ae3 de Ar3 do equilíbrio, devido às cinéticas de formação e dissolução das fases. 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 importância da determinação das temperaturas críticas está diretamente relacionada à aplicação de tratamentos térmicos a 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 seja, entre as temperaturas A1 e A3), ou total, quando está acima do intervalo de transformação (acima da temperatura A3) (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 dutilidade 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).

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 (Figura 5a), 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: elementos de domínio γ expandido (Figura 5b) 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 (Figura 5c), 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 (Figura 5d). Os elementos Boro, Enxofre, Tântalo, Nióbio, Zircônio estão nessa categoria (HONEYCOMBE, 1982) (SILVA; MEI, 2010).

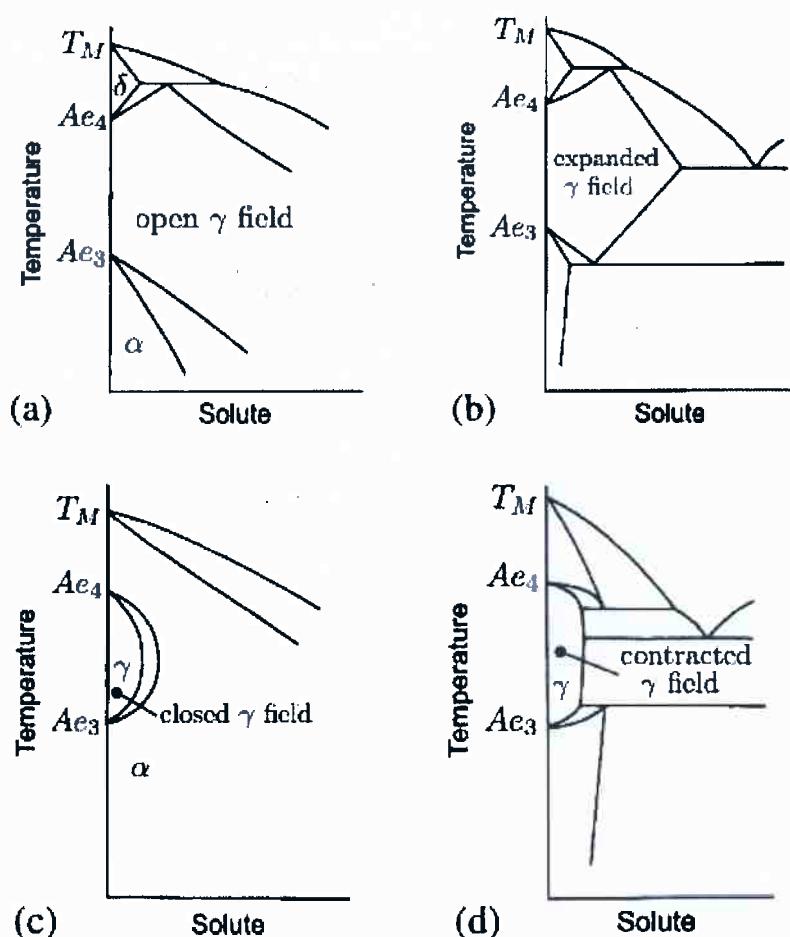


Figura 5 - Classificação dos domínios γ sob influência dos elementos de liga: a) aberto; b) expandido; c) fechado; d) contraído. (HONEYCOMBE, 1982)

3.6 DETERMINAÇÃO DAS TEMPERATURAS CRÍTICAS

São reportadas na literatura diversas formas de determinação de temperaturas críticas de aços, sejam de forma experimental ou computacional.

Transformações de fase do aço causam contração ou expansão do material, devido às diferentes densidades das fases que se formam ou dissolvem. A dilatometria é um método de determinação experimental de detecção de transformações de fases através da coleta de sinais de mudança nas dimensões do corpo de prova bem como sua temperatura. As temperaturas críticas de transformação podem então ser determinadas graficamente pelas inflexões nas curvas da dilatação em função da temperatura, como as mostradas na Figura 6. Na Figura 6, na nomenclatura utilizada pelo autor, a temperatura A_1 equivale a A_{c1p} , A'_1 corresponde a A_{c1k} , e a temperatura A_3 é a temperatura Ac_3 ou Ac_m . Apesar de preciso, o equipamento tem custo elevado e necessita de pessoas capacitadas para operá-lo.

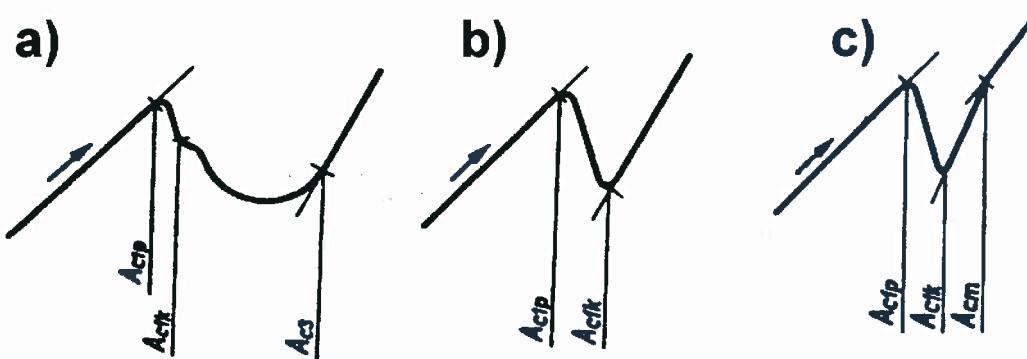


Figura 6 - Determinação gráfica das temperaturas críticas em aço (a) hipoeutetóide, (b) eutetóide e (c) hipoeutetóide, a partir de dados do dilatômetro (PAWLOWSKI, 2012)

Outro método de determinar as temperaturas críticas de transformação é através de softwares de termodinâmica computacional, como o Thermo-Calc®, que calculam as variáveis de estado (e.g., fração de fases, composição das fases) baseados nos princípios termodinâmicos (minimização da energia livre de Gibbs). Estes softwares acessam bases de dados termodinâmicos que fornecem informações dos parâmetros de interação dos elementos químicos para determinadas fases, que então são utilizados para o cálculo da energia livre de Gibbs. A precisão dos cálculos computacionais é precisa e tem sido constantemente avaliada na literatura. Entretanto, tanto software quanto o acesso aos bancos de dados é normalmente pago, e requer-se 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 de regressão múltipla. Gorni (2012) compilou diversas fórmulas para o cálculo das temperaturas de transformação para austenita A1 e A3. Abaixo são mostradas duas equações para o cálculo das temperaturas A1 e A3, conforme propostas por Andrews (1965):

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

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

É importante ressaltar que essas equações são válidas apenas para teores de carbono abaixo de 0.6% (ANDREWS, 1965).

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.

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

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

3.7.1 Modelos de regressão

Uma das formas mais simples de aprendizado de máquina são modelos de regressão. Uma análise de regressão procura descrever as relações entre uma variável dependente (também chamada de variável de resposta) e variáveis independentes.

Em particular, modelos de regressão linear são aqueles em que a relação entre as variáveis dependente e independentes pode ser descrita por uma relação linear do tipo:

$$\begin{aligned} y &= \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \varepsilon \\ &= \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon \end{aligned} \quad (3)$$

em que y representa a variável dependente e x_j e β_j correspondem às variáveis dependentes e aos coeficientes de regressão.

O modelo de regressão também pode ser descrito por uma equação polinomial. A equação 4 abaixo representa um modelo de regressão em que a relação entre as variáveis é descrita por um polinômio de segunda ordem. Esse tipo de modelo de regressão é também chamado de modelo de superfície de resposta de segunda ordem.

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (4)$$

Note-se que o modelo descrito pela equação 4 também se trata de um modelo de regressão linear, uma vez que os termos de segunda ordem podem ser redefinidos como novas variáveis independentes de primeira ordem. De forma a ilustrar melhor esta situação, tome-se como exemplo o seguinte modelo de segunda ordem com duas variáveis x_1 e x_2 :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon \quad (5)$$

Definindo $x_3 = x_1^2$, $x_4 = x_2^2$, $x_5 = x_1 x_2$, $\beta_3 = \beta_{11}$, $\beta_4 = \beta_{22}$ e $\beta_5 = \beta_{12}$, então a equação 5 se torna:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5 + \varepsilon \quad (6)$$

que possui a mesma forma que a equação 3 do modelo de regressão linear.

Os coeficientes de regressões multivariáveis geralmente são estimados pelo método dos mínimos quadrados, que consiste em minimizar a soma dos quadrados dos desvios, representada pela equação 7 a seguir. Os mínimos são encontrados nos pontos em que a derivada em relação a cada β é zero (MONTGOMERY, 2018).

$$L = \sum_{i=1}^k (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij})^2 \quad (7)$$

Uma vez determinado o modelo de regressão, certas métricas podem ser aplicadas a fim de se averiguar sua qualidade de predição. A primeira e mais simples de todas é o Erro Quadrático Médio (MSE, sigla em inglês), que calcula a média das diferenças entre o valor esperado (y) e o valor predito (y_p) elevadas ao quadrado, como mostra a equação 8. Quanto maior seu valor, menos preciso é o modelo.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^k (y_i - y_{pi})^2 \quad (8)$$

A vantagem de utilizar essa métrica é identificar com facilidade valores preditos inesperados. Por outro lado, o fato de o erro estar ao quadrado pode subestimar ou superestimar a previsibilidade do modelo, principalmente se o banco de dados contiver ruídos.

A segunda métrica é o Coeficiente de Determinação, ou R^2 . Está relacionado com o MSE, porém seus valores variam de $-\infty$ a 1, o que simplifica sua comparação. Um valor negativo significa que o modelo é pior do que a previsão da média, enquanto um valor próximo de um significa que o erro está próximo de zero. O cálculo é feito a partir do MSE do modelo, descrito na equação 8, e do MSE da previsão da média, mostrado na equação 9 abaixo, onde μ é a média dos valores esperados. Em resumo, o R^2 mede o quão bom o modelo é em relação ao modelo da média (DRAKOS, 2018).

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^k (y_i - \mu)^2 \quad (9)$$

Existem outras métricas para avaliação das previsões, mas no presente trabalho serão utilizadas apenas as citadas acima.

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 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 7, ela tem uma camada de entrada, uma ou mais camadas intermediárias e outra de saída.

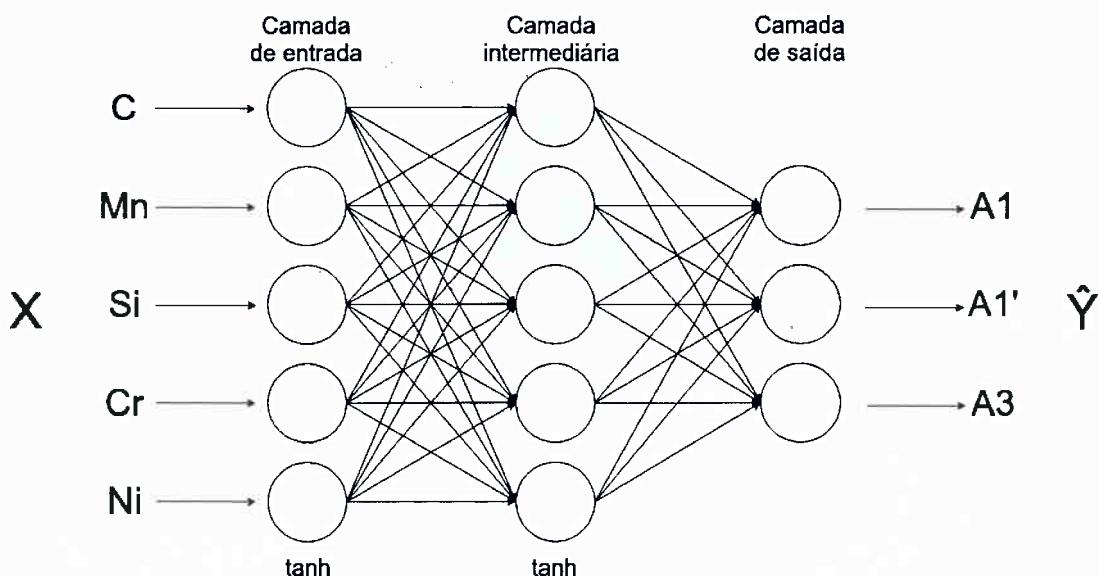


Figura 7 - Arquitetura da rede neural

Para o exemplo da Figura 7, 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 10. 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). Uma função de perda calcula o quão longe o modelo está da solução ideal e seu valor diminui conforme a precisão aumenta.

$$z = b + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + \dots + w_nx_n \quad (10)$$

Como mostra a Figura 8, o resultado de cada iteração passa por uma função de ativação e, de acordo com o resultado, se define a próxima conexão. Entre as funções mais utilizadas, estão a sigmóide, que por gerar valores entre 0 e 1 é utilizada em algoritmos de classificação, a ReLU, sigla para “Rectified Linear Unit”, e a tangente hiperbólica, descrita na equação 11 (SKALSKI, 2017). Essa última foi a escolhida no presente trabalho por ser usada anteriormente por Capdevila et al. (2004) e Gavard et al. (1996).

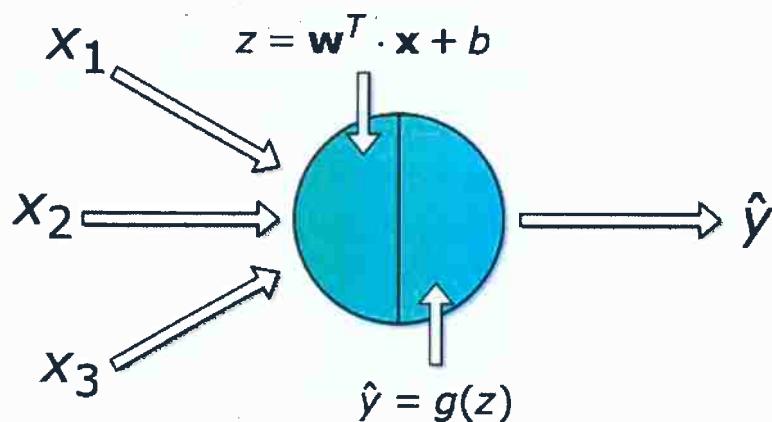


Figura 8 - Operações em um único neurônio (SKALSKI, 2017)

$$\tanh(x) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1 \quad (11)$$

O processo de aprendizado da rede neural envolve a otimização dos pesos e vieses para minimizar o valor da função perda, o que é calculado a partir do método de gradiente descendente, ou seja, a minimização das derivadas da função perda em relação a cada parâmetro da rede. O algoritmo de retropropagação compara os valores obtidos com os esperados e reajusta os parâmetros da rede.

Esse ajuste é controlado pela taxa de aprendizado, uma variável de extrema importância, posto que um valor muito baixo torna a convergência muito lenta e um valor muito alto pode não convergir (SKALSKI, 2017).

As métricas de avaliação da predição são as mesmas utilizadas na regressão linear, somadas à avaliação do valor final da função perda.

3.7.3 Preparação dos Dados

Sabendo como funcionam os modelos de aprendizado de máquina, é importante realizar um bom preparo dos dados, dada sua influência na previsibilidade do modelo.

Uma das maiores preocupações em relação aos algoritmos de aprendizado de máquina é o *overfit*. Esse termo é utilizado quando um modelo é muito bem treinado para um certo conjunto de dados, porém tem uma previsibilidade ruim para dados novos. Esse problema é mais provável de ocorrer quando se elabora um modelo mais complexo do que o necessário. Por outro lado, o termo *underfit* é usado quando o modelo não se ajusta aos dados de treinamento e também não pode ser usado para prever novos dados.

Assim sendo, é importante dividir o banco de dados disponível entre dados de treino, com o qual o modelo aprende, e dados de teste, para avaliar a predição do modelo para novos dados. A proporção do tamanho dos conjuntos de dados depende do tamanho do banco original. A proporção 80% treino e 20% teste é considerada segura por estudos mais recentes (BRONSSTEIN, 2017), embora o trabalho de Gavard et al. (1996) utilize 50%.

Outra forma de preparação é a padronização dos dados, que consiste em deixá-los entre -1 e 1. Isso pode ser feito pela normalização, que utiliza a média (μ) e o desvio padrão (σ), como mostra a equação 12, ou pela padronização *MinMax*, utilizando os valores máximos e mínimos, como mostra a equação 13.

$$z = \frac{X - \mu}{\sigma} \quad (12)$$

$$z = \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)} \quad (13)$$

A padronização é importante para tornar o treinamento menos sensível à magnitude dos dados, o que pode influenciar na convergência do modelo (RASCHKA, 2014).

4 METODOLOGIA

4.1 O BANCO DE DADOS

4.1.1 Escolha das variáveis

A primeira etapa para elaboração de um algoritmo de aprendizado de máquina é a construção do banco de dados utilizado em seu treinamento. Para este trabalho, utilizou-se dados extraídos do software Thermo-Calc®, devido à sua acessibilidade.

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 passos) cada elemento tem. O valor do passo é dado pela equação a seguir:

$$\text{passo} = \frac{\Delta c}{n - 1} \quad (14)$$

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

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

Tabela 2 - Níveis e passos para cada elemento de liga

Elemento de liga	Níveis	Valor do passo
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 6875 arquivos.

4.1.2 Extração de temperaturas críticas

Para cada arquivo gerado pela chamada do Thermo-Calc®, as temperaturas críticas foram calculadas por meio 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 que para a temperatura A3, identifica-se a menor temperatura em que a porcentagem de austenita é 100%. Também identificou-se a temperatura crítica intermediária, A1', e se o aço da respectiva simulação 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. Uma terceira situação é a aquela em que não há cementita para a composição dada e assim não há 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 isopletas com a composição de carbono como variável livre e diferentes composições de cada elemento.

4.2 REGRESSÃO LINEAR

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

Primeiramente, o banco de dados gerado conforme a secção 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 criados novos parâmetros, totalizando os seguintes: 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.

Na sequência, os dados de treino foram utilizados para gerar modelos de regres-

são linear 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 hipoeutétóides, um para hipereutétóides 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 isopletas de A3 com os dados de treino e de teste, para posterior comparação com as isopletas da rede neural. Para a isopleta do carbono, utilizou-se tanto o modelo hipoeutétóide quanto hipereutétóide para prever o valor de A3 para os demais elementos no nível zero. Já para as demais isopletas, utilizou-se apenas o modelo hipoeutétóide, pois para nível zero de carbono não há aços hipereutétóides.

Visto 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

Dado que a temperatura A3 é a mais complexa de se determinar, devido à inversão da curva no ponto eutétóide, para essa temperatura crítica foi elaborada uma rede neural, de arquitetura semelhante à mostrada na Figura 7.

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 normaliza-

dos 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, com o intuito 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 isopletas 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

Para se comparar a assertividade dos modelos, foram comparados os coeficientes de determinação de regressão linear, rede neural e Equação Empírica de Andrews para predição da temperatura A3.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 O BANCO DE DADOS

O resultado da variação de composição química para aços carbono gerou um total de 6875 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. A Figura 9 ilustra a lógica dessa extração. 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 9a. Já para hipereutetóides, ao ponto em que a porcentagem de ferrita é zero, como na Figura 9b. Enquanto isso, para aços em que a porcentagem de cementita é sempre zero, considera-se que a temperatura A1' é igual à A1 (vide Figura 9c).

É importante destacar que nem sempre um aço terá as três temperaturas críticas. Elementos muito alfagênicos 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.

Foi realizada uma comparação dos valores de temperatura crítica com a equação empírica de Andrews, plotando o gráfico da Figura 10. A linha em azul representa os valores esperados ($T_{\text{empirical}} = T_{\text{database}}$).

Nota-se que, para as temperaturas A3, existe uma correlação maior com os va-

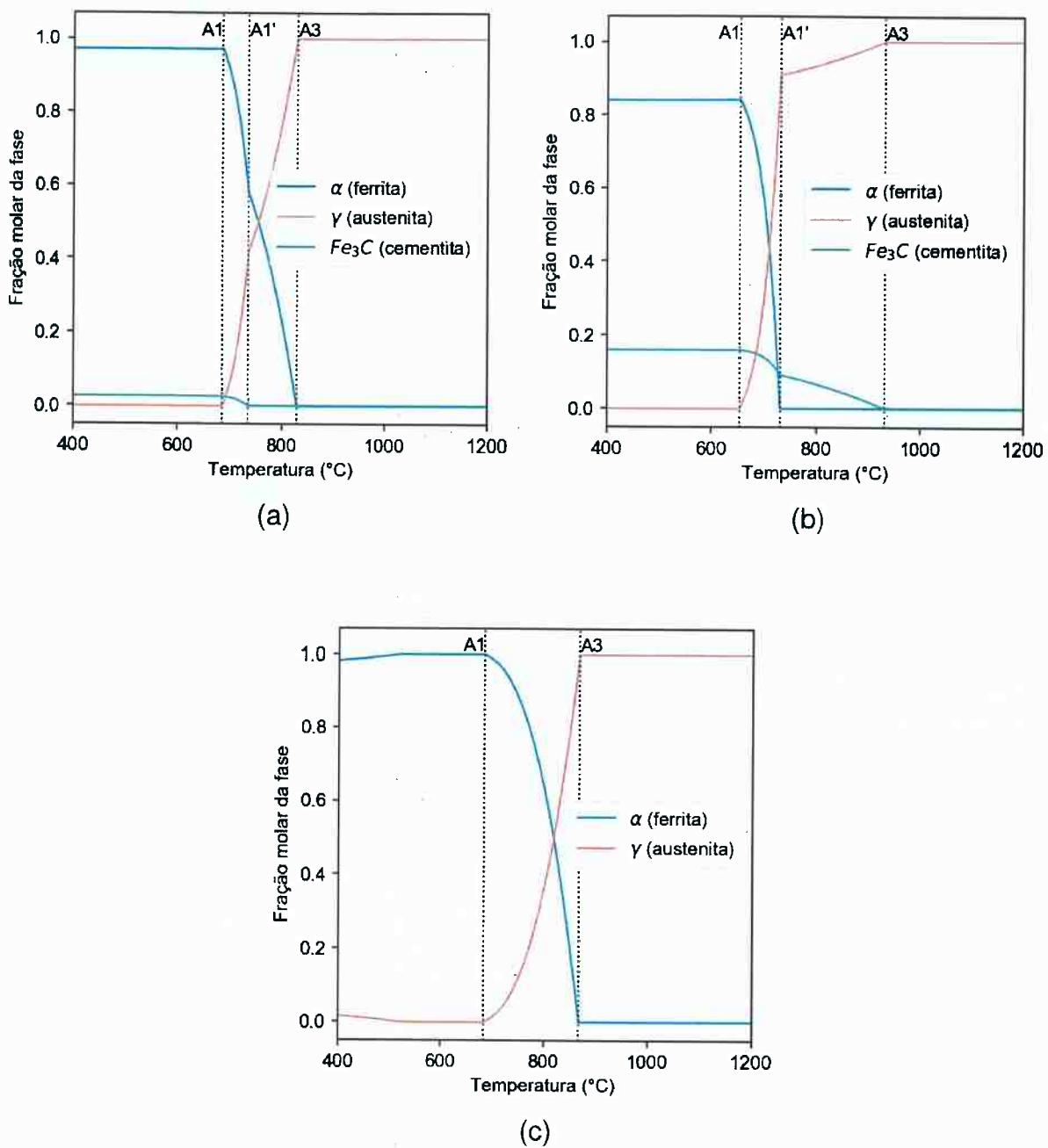


Figura 9 - Exemplos de extração de temperaturas críticas para a) liga hipoeutetóide, b) liga hipereutetóide e c) liga hipoeutetóide sem cementita

iores calculados pela equação empírica, enquanto para A1 existe uma divergência maior. Isso pode estar relacionado com 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 isopletas 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,

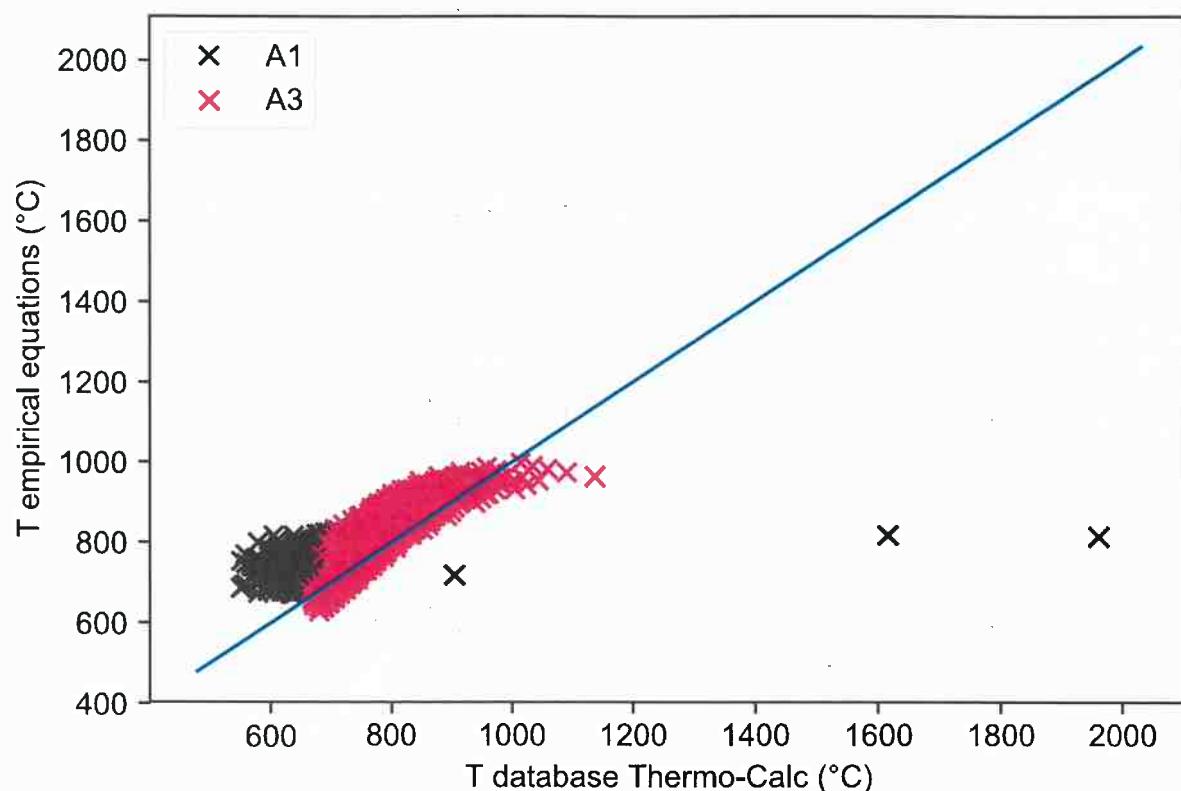


Figura 10 - Gráfico de temperatura crítica calculada pela equação empírica de Andrews e temperatura crítica do banco de dados

mostradas na Figura 11.

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 alfabênicos, 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 alfabêlico, tem influência na temperatura tanto a baixas quanto a mais altas concentrações de carbono, embora a influência a baixas concentrações seja maior.

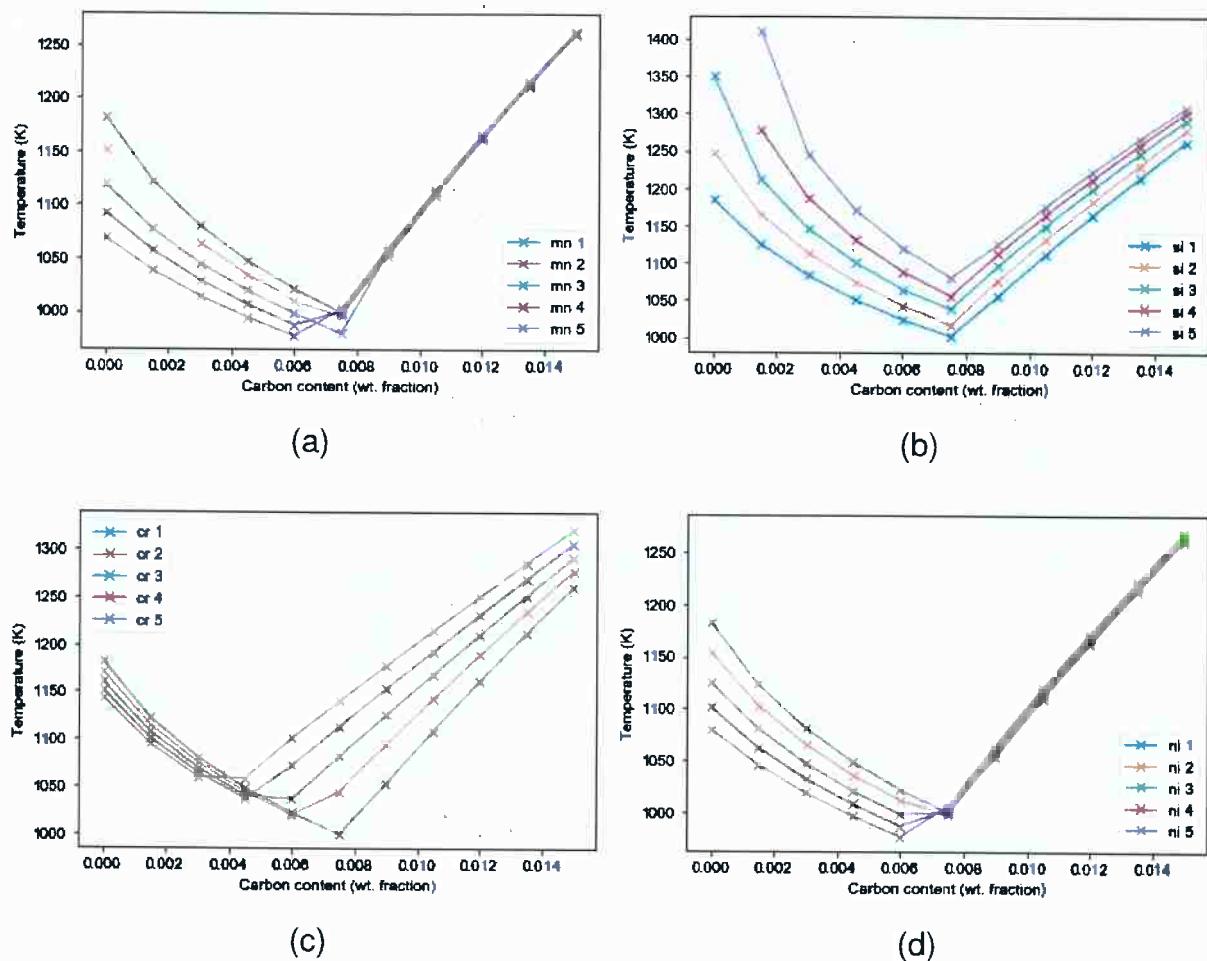


Figura 11 - Isopletas de temperatura variando Carbono para composições do banco de dados de: (a) Manganês, (b) Silício, (c) Cromo, (d) Níquel

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.

Nota-se que o conjunto de dados para determinar a temperatura A1 é o menor.

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

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 12 a seguir mostra os gráficos de valores preditos versus esperados para a temperatura A1.

Nota-se que, mesmo com a quantidade de dados reduzida, esses tiveram um bom ajuste 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 13 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.

5.2.3 Regressão Linear de A3

A Figura 14 a seguir mostra os gráficos de valores preditos versus esperados para a temperatura A3.

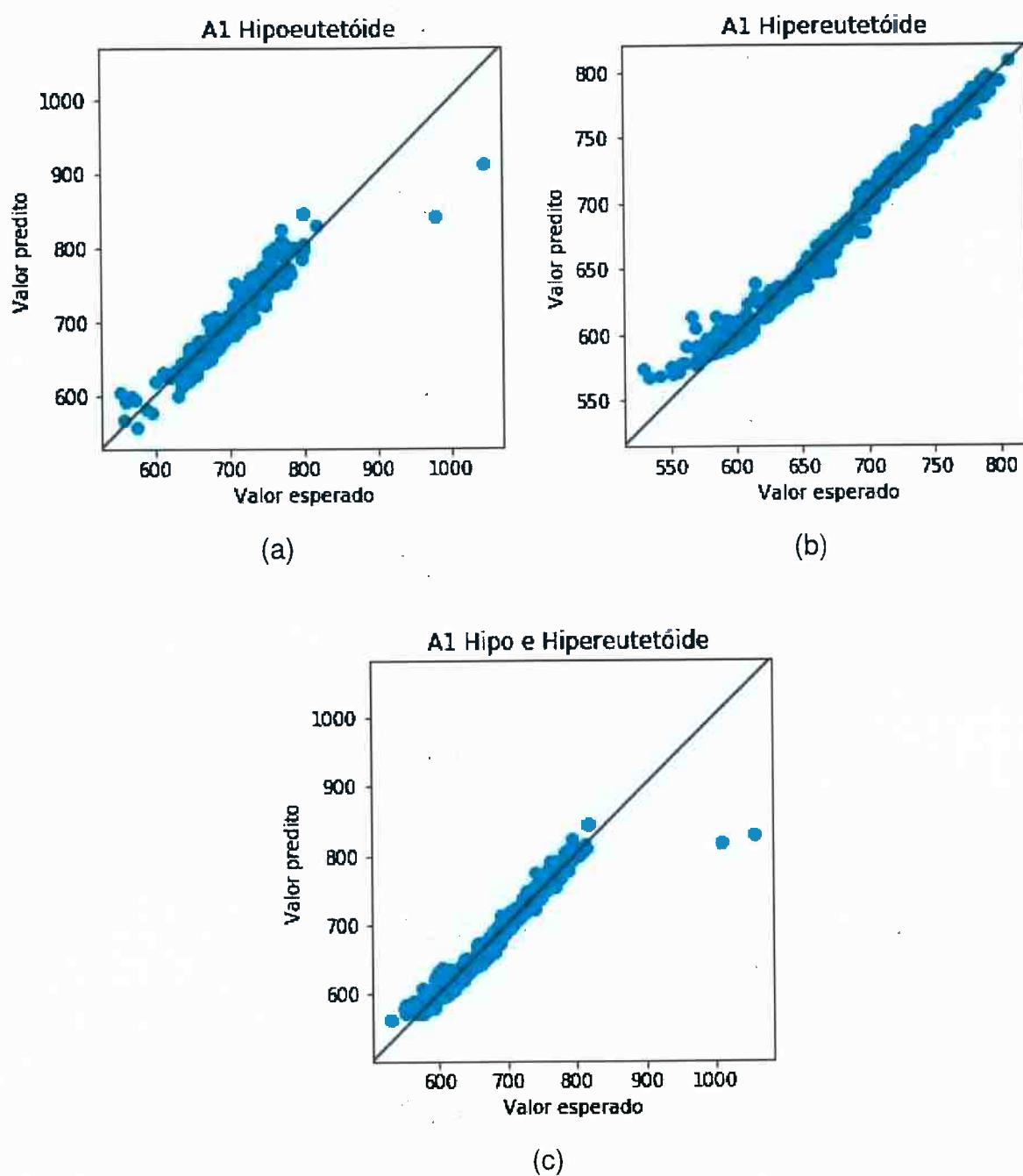


Figura 12 - Valores preditos vs. Valores esperados da regressão linear de A1, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores

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 previsões para composições hipereutetóides tiveram melhor ajuste, não apenas pelo maior conjunto de dados mas também pela curva correspon-

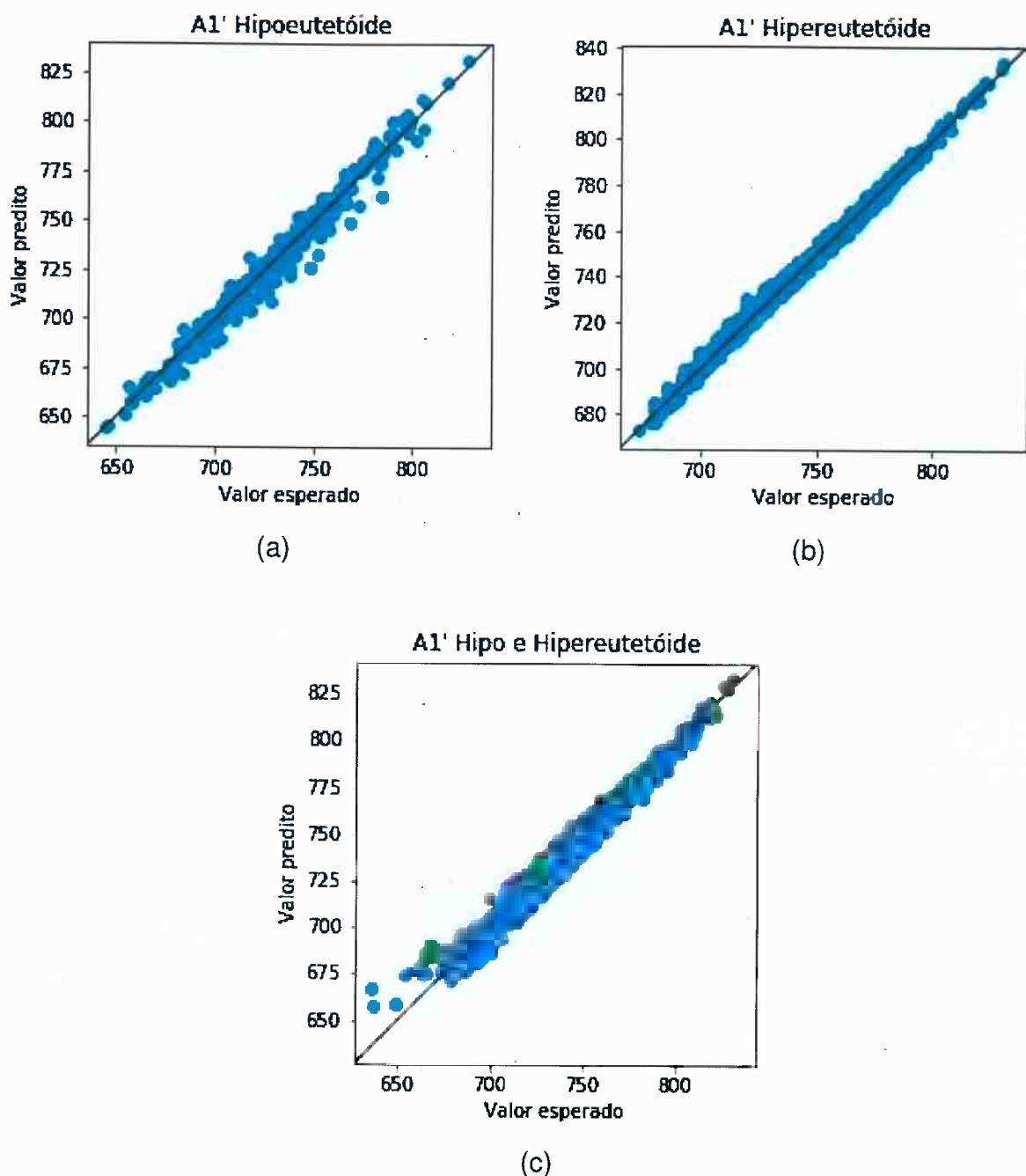


Figura 13 - Valores preditos vs. Valores esperados da regressão linear de A1', para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores

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

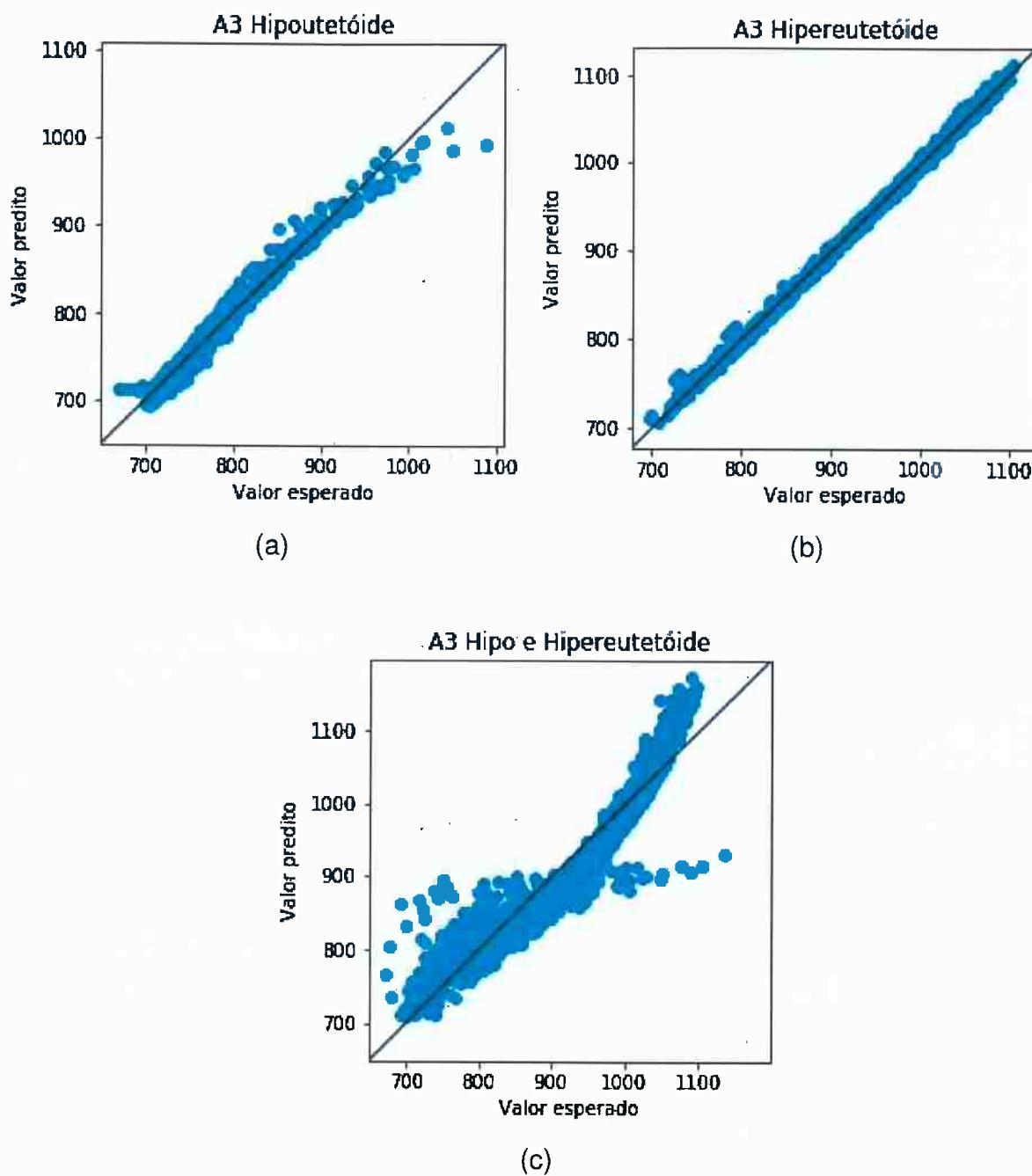


Figura 14 - Valores preditos vs. Valores esperados da regressão linear de A3, para (a) Hipoeutetóides, (b) Hipereutetóides, (c) Todos os valores

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.

Os resultados obtidos dos dados aleatórios possibilitou uma comparação de mé-

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

tricas, 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

As predições dos modelos de A3 foram utilizadas para gerar isopletas variando-se um dos elementos e fixando os demais a nível zero. Na Figura 15 a seguir, a linha azul corresponde às predições do modelo hipoeutetóide e a vermelha ao hipereutetóide, enquanto os pontos em "x" são os valores obtidos pelo Thermo-Calc®.

Para o Carbono, a predição é próxima do esperado, principalmente para hipereutetóides. Já para hipoeutetóides, quanto menor a composição de carbono, maior a diferença entre o predito e o esperado, chegando a 50 °C. Como discutido anteriormente, há uma mudança de inclinação na curva do diagrama binário Fe-C que

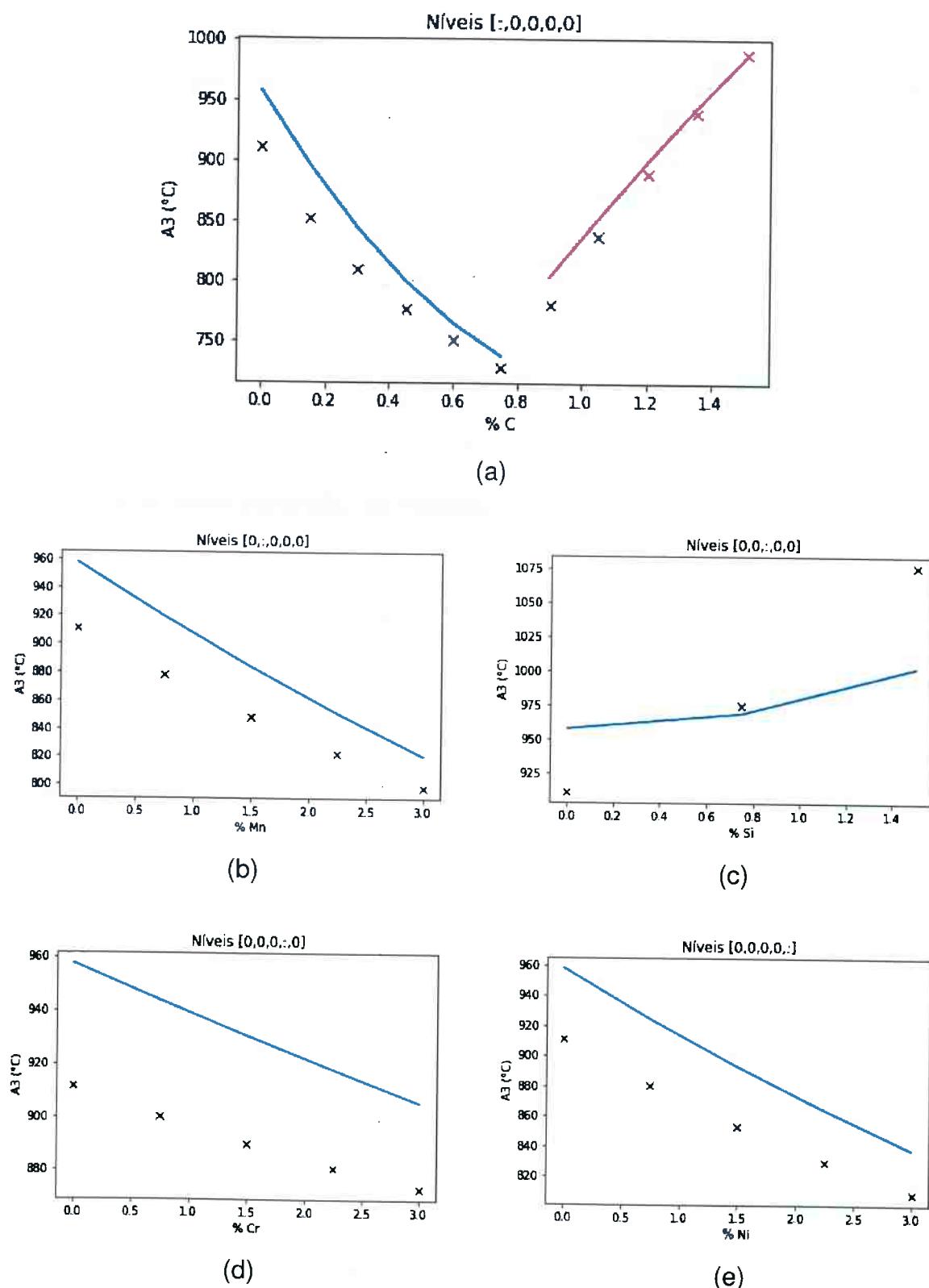


Figura 15 - Isopletas de A3 geradas pelas previsões da regressão linear para (a) Carbono; (b) Manga-nês; (c) Silício; (d) Cromo; (e) Níquel, a nível zero dos demais elementos

contribui para uma má predição do modelo.

Já para o Manganês, Cromo e Níquel, as predições mantém a mesma inclinação do esperado, porém com uma diferença que chega a 50 °C. O Silício, por sua vez, não teve uma boa predição, possivelmente devido ao seu domínio γ fechado que gera um γ -loop.

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 16 abaixo.

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 17 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 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 18 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 predições para seis e doze neurônios são próximas e, conside-

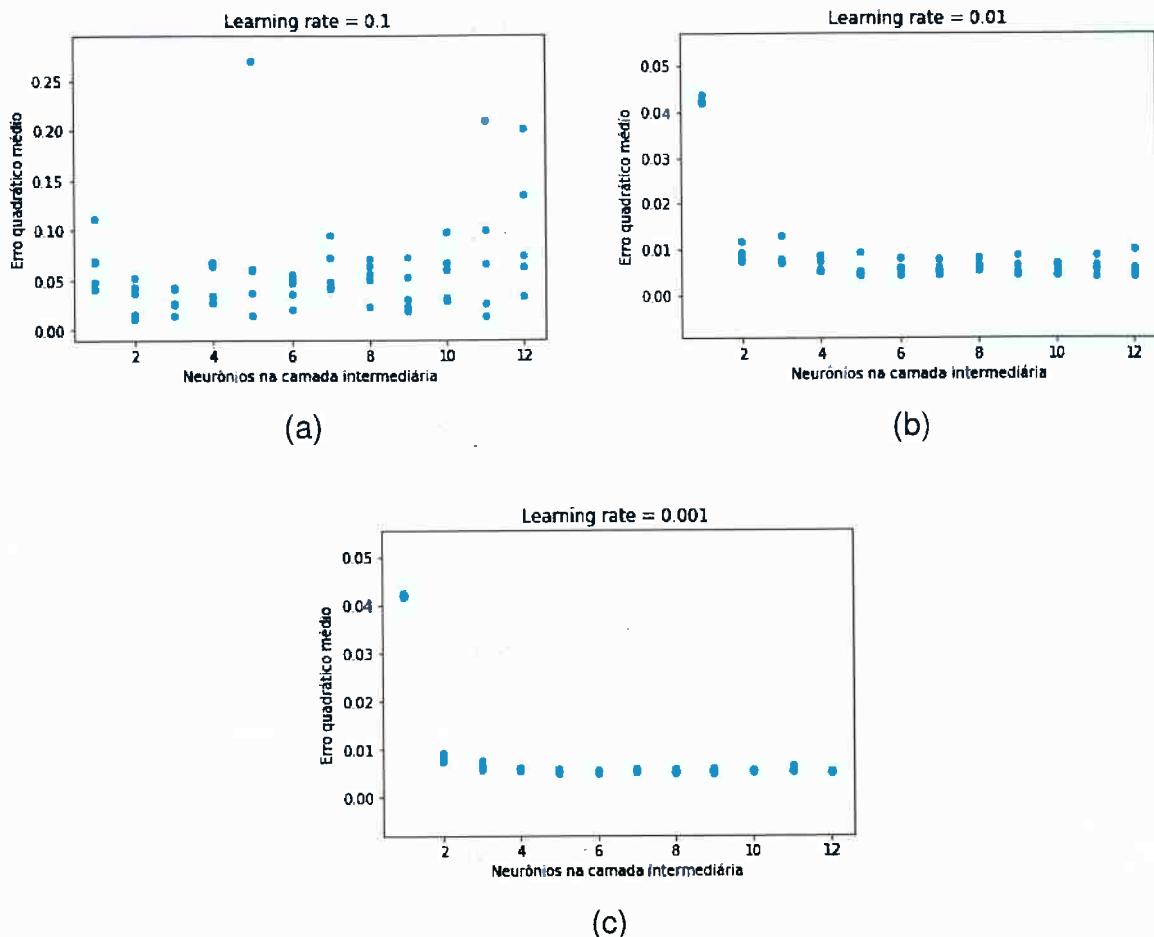


Figura 16 - Erro quadrático médio vs. Número de neurônios na camada intermediária para (a) Taxa de aprendizado = 0.1, (b) Taxa de aprendizado = 0.01, (c) Taxa de aprendizado = 0.001

rando 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 mostram as Figuras 19, 20, 21, 22 e 23 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

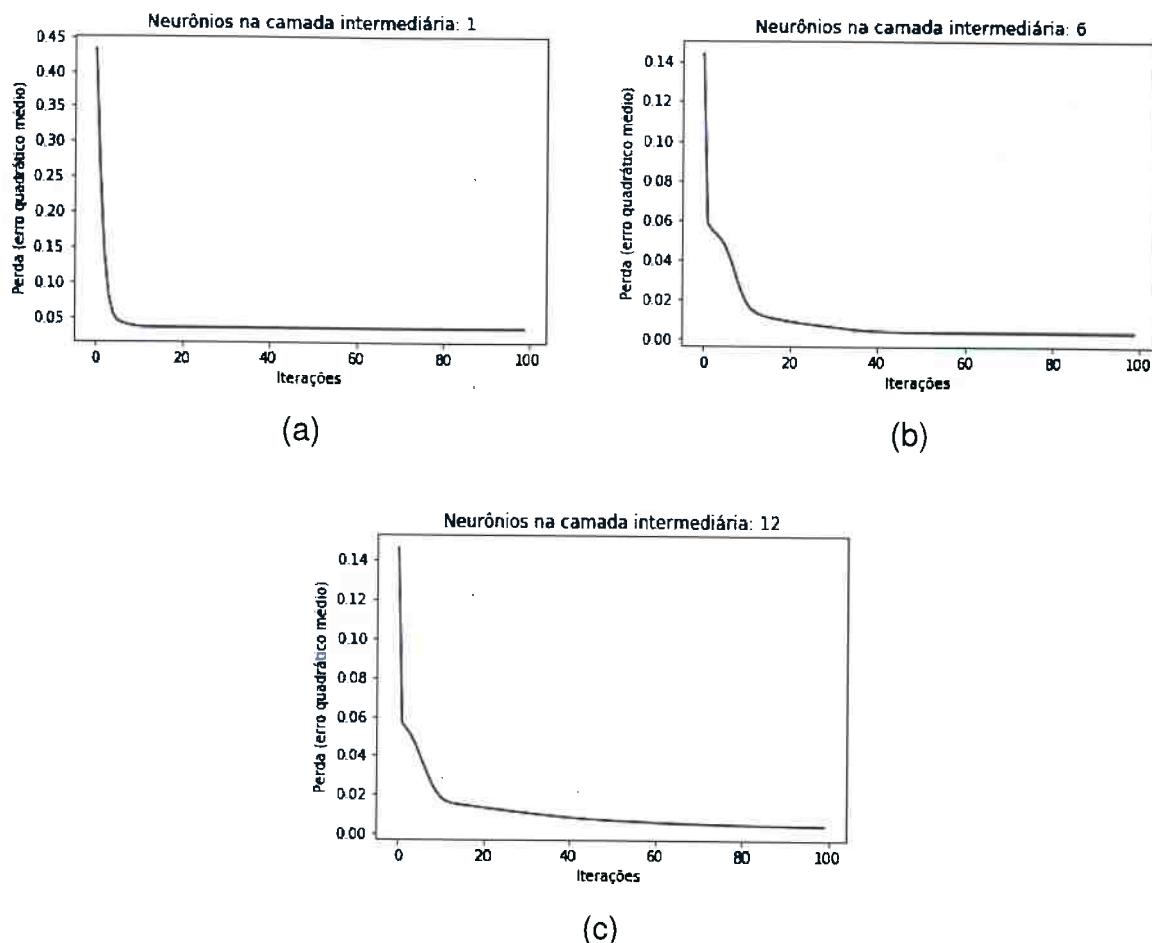


Figura 17 - Perda (erro quadrático médio) vs. Número de iterações para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária

mais suscetível a erros, como foi observado na Figura 14 da regressão linear e na Figura 18b 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 21a. Uma possível explicação está no diagrama binário Fe-Si, da Figura 25, que mostra o campo γ fechado a baixas concentrações de Si. O mesmo 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 predição do modelo nesses casos.

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 determi-

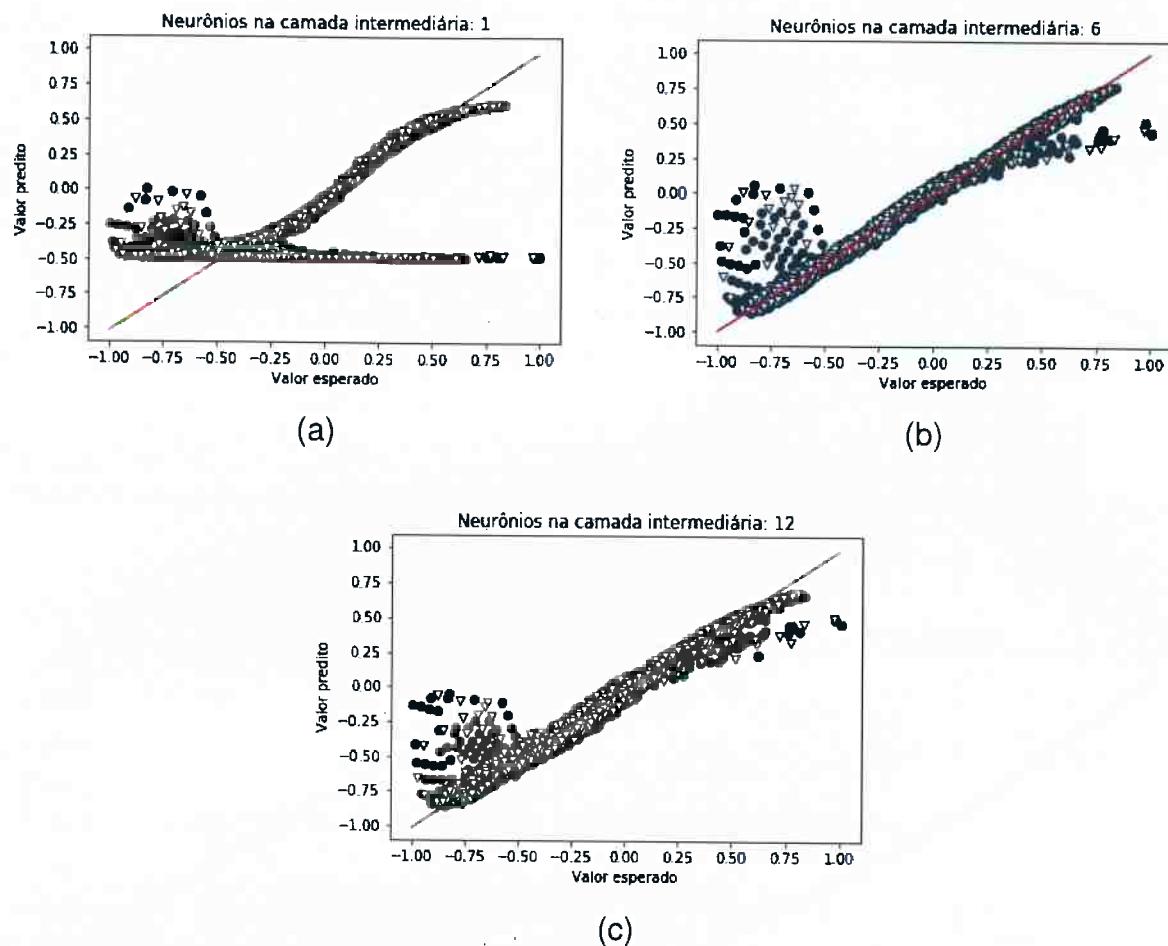


Figura 18 - Valores Preditos vs. Valores Esperados para (a) 1, (b) 6, (c) 12 neurônios na camada intermediária. • : valores de treino, ▽ : valores de teste

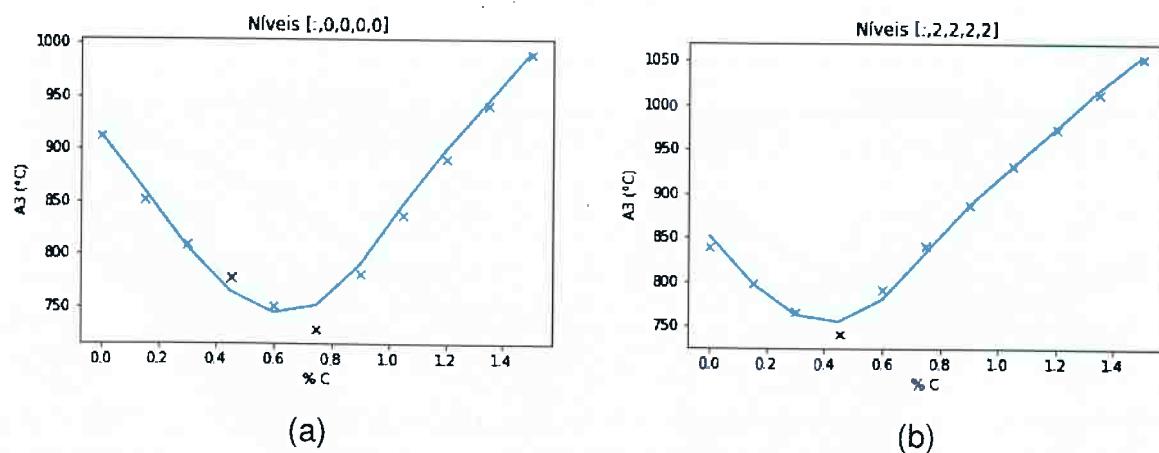


Figura 19 - Isopletas de Carbono geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

nação (R^2), 0.9734.

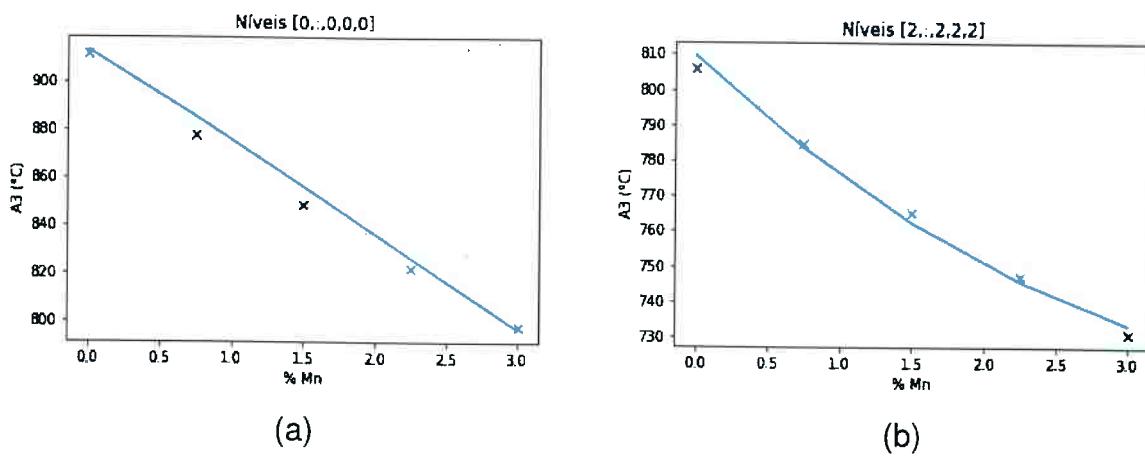


Figura 20 - Isopletas de Manganês geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

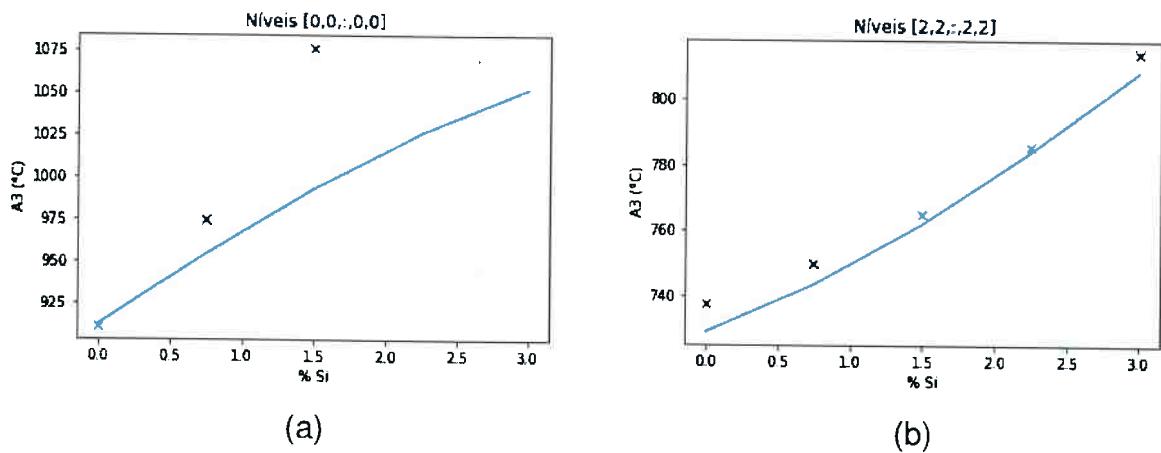


Figura 21 - Isopletas de Silício geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

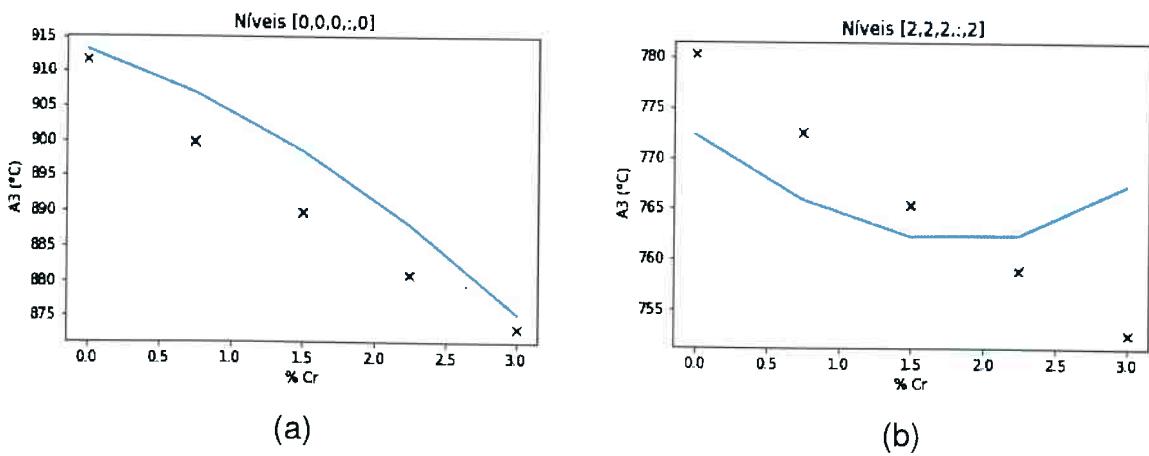


Figura 22 - Isopletas de Cromo geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

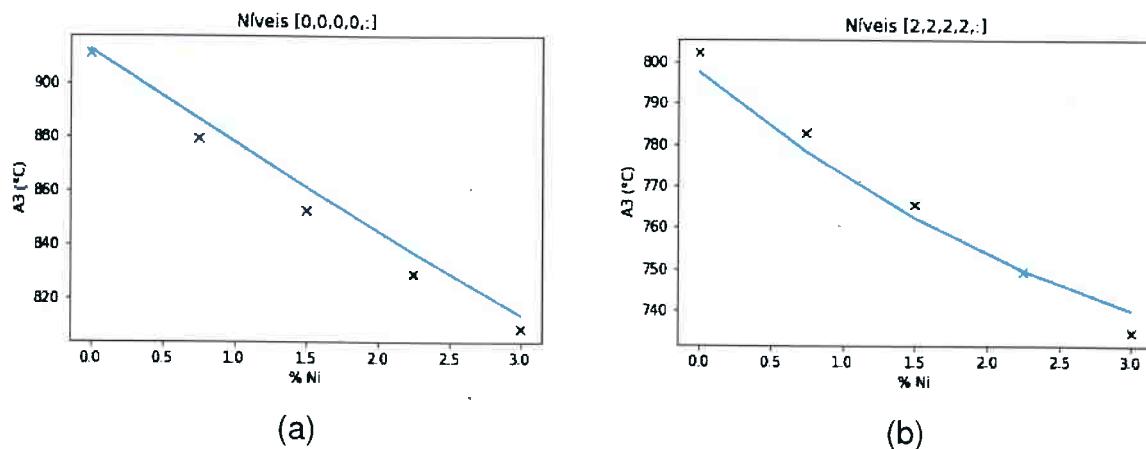


Figura 23 - Isopletas de Níquel geradas pelas previsões da rede neural para (a) Nível 0; (b) Nível 2

5.4 COMPARAÇÃO DOS MODELOS

Com o propósito de comparar os modelos de regressão linear com o de rede neural e Equação de Andrews para predição de A3, foi calculado o Coeficiente de Determinação de cada um deles, que pode ser visto na Tabela 8 a seguir.

Tabela 8 - Valores de R^2 para regressão linear e rede neural de A3

Modelo	R ²
Régressão Linear Hipoeutetóide	0.9607
Régressão Linear Hipereutetóide	0.9971
Régressão Linear Total	0.8774
Rede Neural Artificial	0.9734
Equação de Andrews	0.2217

É possível constatar que a regressão linear para os hipereutetóides foi o modelo com melhor ajuste, seguido pela rede neural e pela regressão linear hipoeutetóide. Já a regressão linear total teve ajuste menor, pois como discutido anteriormente, o ponto de inversão da curva não é bem predito. A Equação de Andrews, por sua vez, não tem um bom ajuste com os dados do Thermo-Calc®.

O valor alto de R^2 para a rede neural torna menos provável a hipótese de a regressão linear apresentar *overfit* devido a parâmetros em excesso.

6 CONCLUSÕES

Foi estudada a implementação de dois algoritmos de aprendizado de máquina para prever temperaturas críticas de transformações de fase em aços comuns de engenharia. Para isso, foi criado um banco de dados a partir de simulações termodinâmicas e algoritmos para extração dessas temperaturas críticas. Os dados foram analisados mediante comparação com equações empíricas e foram tratados antes de serem usados para o treino.

O modelo de regressão linear mostrou um coeficiente de determinação alto para a maior parte dos casos estudados, mesmo quando testado por um banco de dados aleatório. Sua desvantagem foi a necessidade de separação dos dados entre hipó e hipereutetóide para que o modelo tivesse melhor qualidade de predição.

A rede neural, por sua vez, foi capaz de prever a temperatura A3 sem a necessidade de separação pelo ponto eutetóide, apesar de não conseguir calcular tão bem as temperaturas próximas a esse ponto de inversão. Seu alto coeficiente de determinação diminui a probabilidade de o modelo de regressão estar com *overfit* causado por número de parâmetros em excesso. Entretanto, não foi totalmente descartada a hipótese de *overfit* e para tal deveriam ser estudadas outras métricas e realizar novos testes com outros bancos de dados. Até então, os valores altos dos coeficientes de determinação sugerem que os modelos estudados são capazes de descrever bem as temperaturas críticas.

Por fim, conclui-se que os modelos de aprendizado de máquina utilizando a linguagem *Python* têm implementação razoavelmente simples e podem ser aplicados a conjuntos de dados similares, como temperaturas críticas determinadas experimentalmente.

7 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Dado o tempo limitado para elaboração do trabalho, certas ideias surgiram ao longo do processo e não puderam ser executadas. Assim sendo, elas podem ser utilizadas por outros alunos em trabalhos futuros.

A primeira delas é um estudo com mais profundidade da rede neural. O número de camadas intermediárias poderia ser estudado para prever com melhor precisão os valores de A₃. O modelo também poderia ser aplicado às outras temperaturas críticas para avaliar sua predição.

Além disso, uma análise sobre como os modelos se comportam mediante extração das composições químicas poderia ser relevante. Até mesmo a inserção de novos parâmetros, como a taxa de aquecimento e outros elementos químicos, como Fósforo, Enxofre e Molibdênio, que podem influenciar nas temperaturas críticas e não foram considerados.

Um terceiro projeto está relacionado com a visualização dos resultados do modelo. Poderia ser elaborado um *site* ou aplicativo, no qual o usuário inseriria os parâmetros e esse retornaria os valores das temperaturas críticas, de forma a tornar a ferramenta mais acessível à comunidade científica.

Por fim, uma última ideia seria o cálculo da porcentagem de carbono no ponto eutetóide, o que poderia ser feito utilizando os coeficientes da regressão linear de A₃ para hipo e hipereutetóides. Sabe-se que esses modelos são de segunda ordem, tal qual a equação 4. Assim, as equações para A₃ são:

$$A_3^{\text{hipo}} = \beta_0^{\text{hipo}} + \sum_{i=1}^k \beta_i^{\text{hipo}} x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij}^{\text{hipo}} x_i x_j + \varepsilon \quad (15)$$

$$A_3^{\text{hiper}} = \beta_0^{\text{hiper}} + \sum_{i=1}^k \beta_i^{\text{hiper}} x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij}^{\text{hipo}} x_i x_j + \varepsilon \quad (16)$$

No ponto eutetóide:

$$A_3^{\text{hipo}} = A_3^{\text{hiper}} \Rightarrow A_3^{\text{hipo}} - A_3^{\text{hiper}} = 0 \quad (17)$$

Logo:

$$\beta_0^{\text{hipo}} - \beta_0^{\text{hiper}} + \sum_{i=1}^k (\beta_i^{\text{hipo}} - \beta_i^{\text{hiper}}) x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k (\beta_{ij}^{\text{hipo}} - \beta_{ij}^{\text{hiper}}) x_i x_j = 0 \quad (18)$$

Definindo:

$$\beta_i^{eut} = \beta_i^{hipo} - \beta_i^{hiper} \quad (19)$$

$$\beta_{ij}^{eut} = \beta_{ij}^{hipo} - \beta_{ij}^{hiper} \quad (20)$$

Substituindo as definições acima na equação 18, temos:

$$\beta_0^{eut} + \sum_{i=1}^k \beta_i^{eut} x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij}^{eut} x_i x_j = 0 \quad (21)$$

Reescrevendo 21 de modo a separar x_1 (fração de carbono):

$$\begin{aligned} \beta_0^{eut} + \beta_1^{eut} x_1 + \sum_{i=2}^k \beta_i^{eut} x_i + \beta_{11}^{eut} x_1^2 + \sum_{j=2}^k \beta_{1j}^{eut} x_1 x_j + \sum_{i=2}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij}^{eut} x_i x_j &= 0 \\ \beta_{11}^{eut} x_1^2 + \left(\beta_1^{eut} + \sum_{j=2}^k \beta_{1j}^{eut} x_j \right) x_1 + \left(\beta_0^{eut} + \sum_{i=2}^k \beta_i^{eut} x_i + \sum_{i=2}^k \sum_{j=i}^k \beta_{ij}^{eut} x_i x_j \right) &= 0 \end{aligned} \quad (22)$$

Dividindo todos os termos em 22 por $2\beta_{11}^{eut}$ e definindo:

$$\alpha_i = \frac{\beta_i^{hipo} - \beta_i^{hiper}}{2\beta_{11}^{eut}} = \frac{1}{2} \frac{\beta_i^{hipo} - \beta_i^{hiper}}{\beta_{11}^{hipo} - \beta_{11}^{hiper}} \quad (23)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\beta_{ij}^{hipo} - \beta_{ij}^{hiper}}{2\beta_{11}^{eut}} = \frac{1}{2} \frac{\beta_{ij}^{hipo} - \beta_{ij}^{hiper}}{\beta_{11}^{hipo} - \beta_{11}^{hiper}} \quad (24)$$

então obtemos:

$$\frac{x_1^2}{2} + \left(\alpha_1 + \sum_{j=2}^k \alpha_{1j} x_j \right) x_1 + \left(\alpha_0 + \sum_{i=2}^k \alpha_i x_i + \sum_{i=2}^k \sum_{j=i}^k \alpha_{ij} x_i x_j \right) = 0 \quad (25)$$

A equação 25 pode ser resolvida para x_1 utilizando a fórmula quadrática:

$$x_1 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (26)$$

em que $a = 1/2$ e b e c são:

$$b = \alpha_1 + \sum_{j=2}^k \alpha_{1j} x_j \quad (27)$$

$$c = \alpha_0 + \sum_{i=2}^k \alpha_i x_i + \sum_{i=2}^k \sum_{j=i}^k \alpha_{ij} x_i x_j \quad (28)$$

Usando a substituição $a = 1/2$, a equação 26 torna-se:

$$x_1 = -b \pm \sqrt{b^2 - 2c} \quad (29)$$

Em suma:

$$\begin{aligned}\alpha_i &= \frac{1}{2} \frac{\beta_i^{\text{hipo}} - \beta_i^{\text{hiper}}}{\beta_{11}^{\text{hipo}} - \beta_{11}^{\text{hiper}}} \\ \alpha_{ij} &= \frac{1}{2} \frac{\beta_{ij}^{\text{hipo}} - \beta_{ij}^{\text{hiper}}}{\beta_{11}^{\text{hipo}} - \beta_{11}^{\text{hiper}}} \\ b &= \alpha_1 + \sum_{j=2}^k \alpha_{1j} x_j \\ c &= \alpha_0 + \sum_{i=2}^k \alpha_i x_i + \sum_{i=2}^k \sum_{j=i}^k \alpha_{ij} x_i x_j \\ x_1 &= -b \pm \sqrt{b^2 - 2c}\end{aligned}$$

$$b = \alpha_C + \alpha_{CMn} Mn + \alpha_{CSi} Si + \alpha_{CCr} Cr + \alpha_{CNi} Ni \quad (30)$$

$$\begin{aligned}c &= \alpha_0 + \alpha_{Mn} Mn + \alpha_{Si} Si + \alpha_{Cr} Cr + \alpha_{Ni} Ni + \\ &\quad \alpha_{Mn^2} Mn^2 + \alpha_{MnSi} Mn Si + \alpha_{MnCr} Mn Cr + \alpha_{MnNi} Mn Ni + \\ &\quad \alpha_{Si^2} Si^2 + \alpha_{SiCr} Si Cr + \alpha_{SiNi} Si Ni + \\ &\quad \alpha_{Cr^2} Cr^2 + \alpha_{CrNi} Cr Ni + \\ &\quad \alpha_{Ni^2} Ni^2 \quad (31)\end{aligned}$$

Tabela de correspondência:

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
C	Mn	Si	Cr	Ni	

Assim, os valores dos coeficientes da regressão linear seriam inseridos nessas equações para o cálculo da porcentagem de carbono eutetóide.

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.I.: 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.

BRONSHTEIN, A. Train/Test Split and Cross Validation in Python. Disponível em: <<https://towardsdatascience.com/train-test-split-and-cross-validation-in-python-80b61beca4b6>>. Acesso em: 6 nov. 2018.

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.I.: s.n.], 1960.

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

DRAKOS, G. How to select the Right Evaluation Metric for Machine Learning Models: Part 1 Regression Metrics. Disponível em: <<https://towardsdatascience.com/how-to-select-the-right-evaluation-metric-for-machine-learning-models-part-1-regression-metrics-3606e25beae0>>. Acesso em: 31 out. 2018.

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.I.: s.n.], 2012. 140 p. January. DOI: 10.1016/S0026-0576(03)90166-8.

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

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

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of simulation experiments**. 8. ed. [S.I.]: John Wiley & Sons, 2018. 3–22 p. v. 231.

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.

RASCHKA, S. About Feature Scaling and Normalization – and the effect of standardization for machine learning algorithms. Disponível em: <https://sebastianraschka.com/Articles/2014_about_feature_scaling.html>. Acesso em: 6 nov. 2018.

SAE SOCIETY OF AUTOMOTIVE ENGINEERS. **SAE Handbook vol. 1**. [S.I.: s.n.], 1983.

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

SKALSKI, P. Deep Dive into Math Behind Deep Networks. Disponível em: <<https://towardsdatascience.com/https-medium-com-piotr-skalski92-deep-dive-into-deep-networks-math-17660bc376ba>>. Acesso em: 4 out. 2018.

THERMO-CALC SOFTWARE AB. **Thermo-Calc User's Guide**. Stockholm: [s.n.], 2003. DOI: 10.1038/ng980.

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

ANEXO A – Diagramas binários

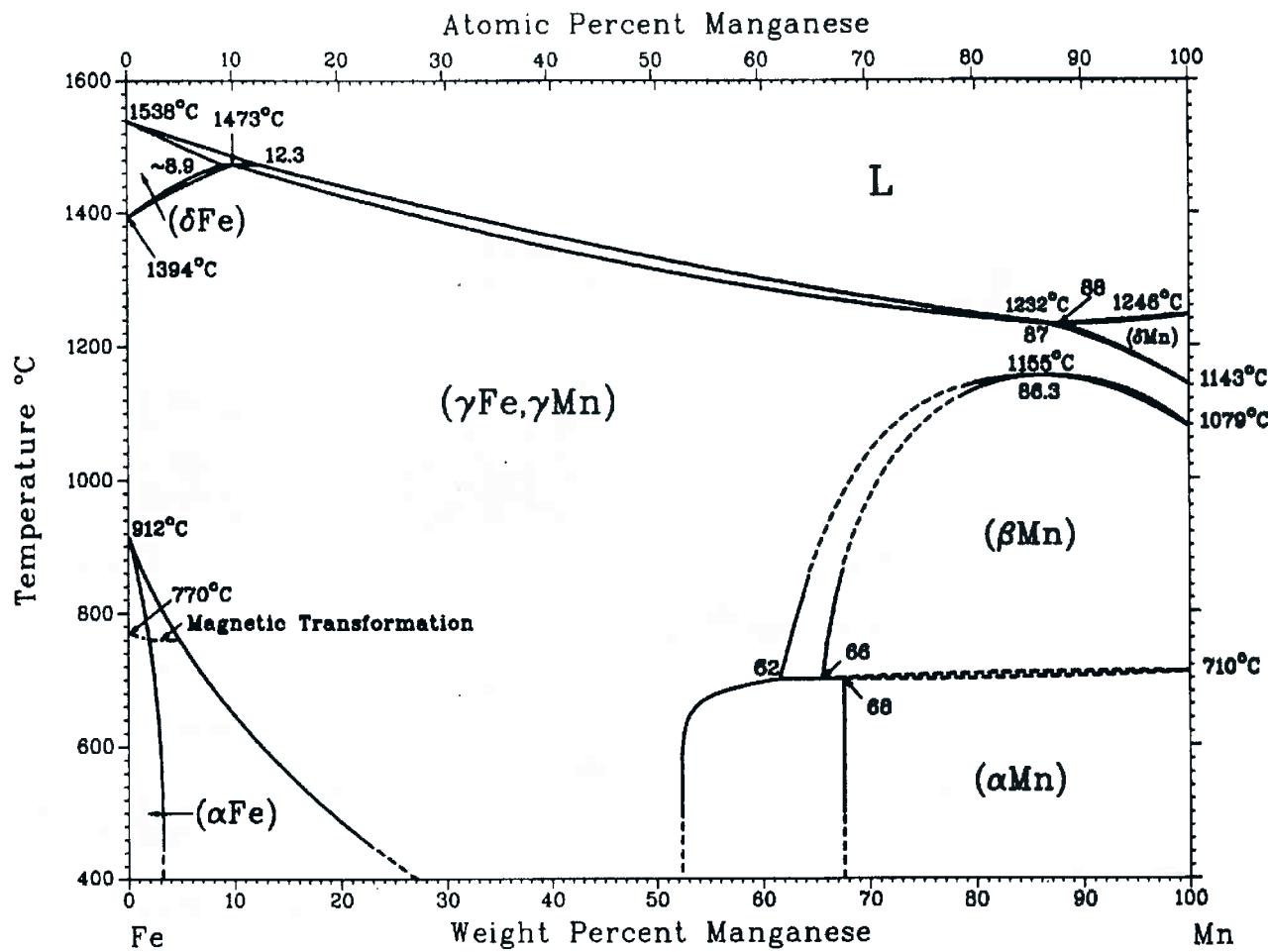


Figura 24 - Diagrama binário Fe-Mn (MASSALSKI, 1996)

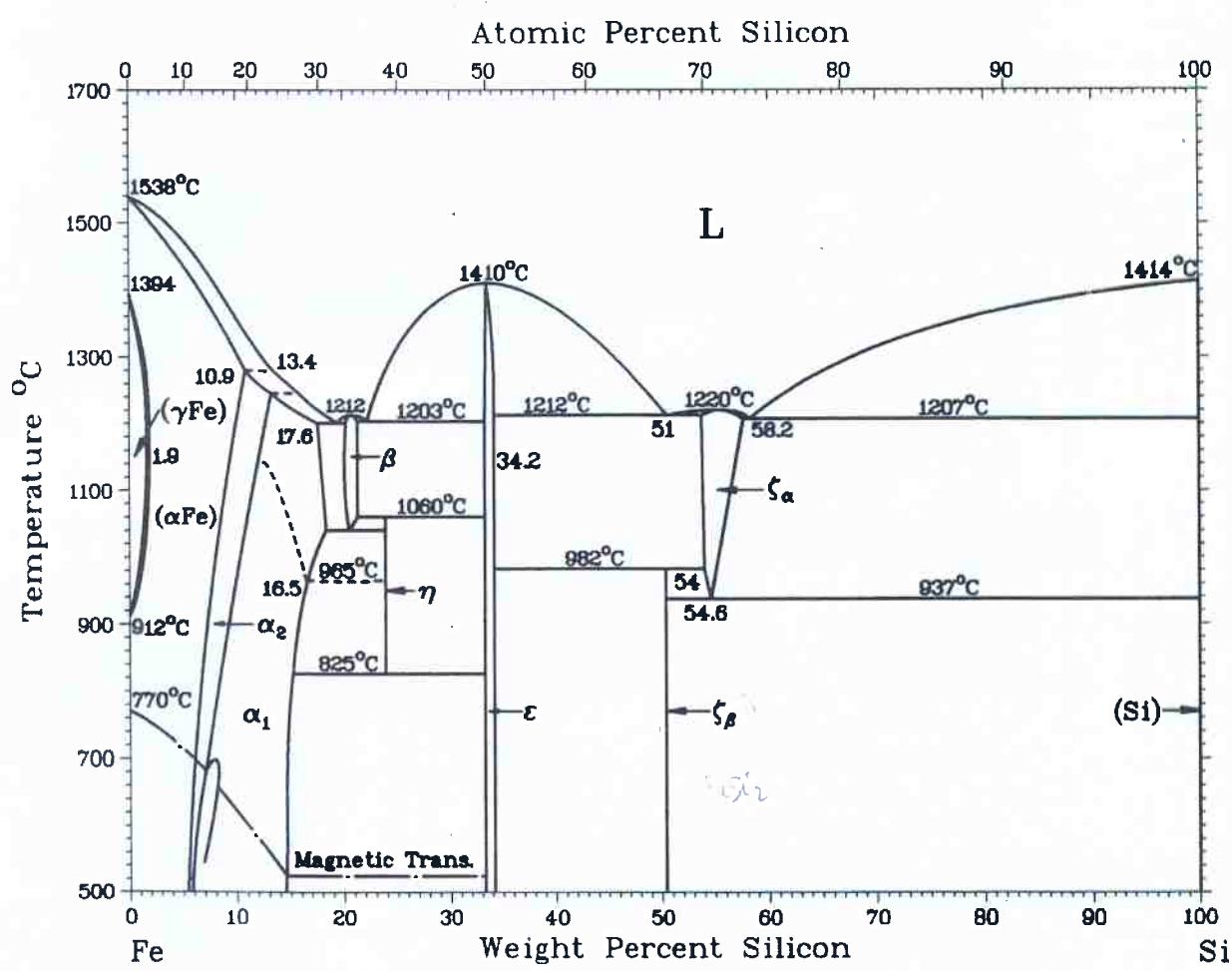


Figura 25 - Diagrama binário Fe-Si (MASSALSKI, 1996)

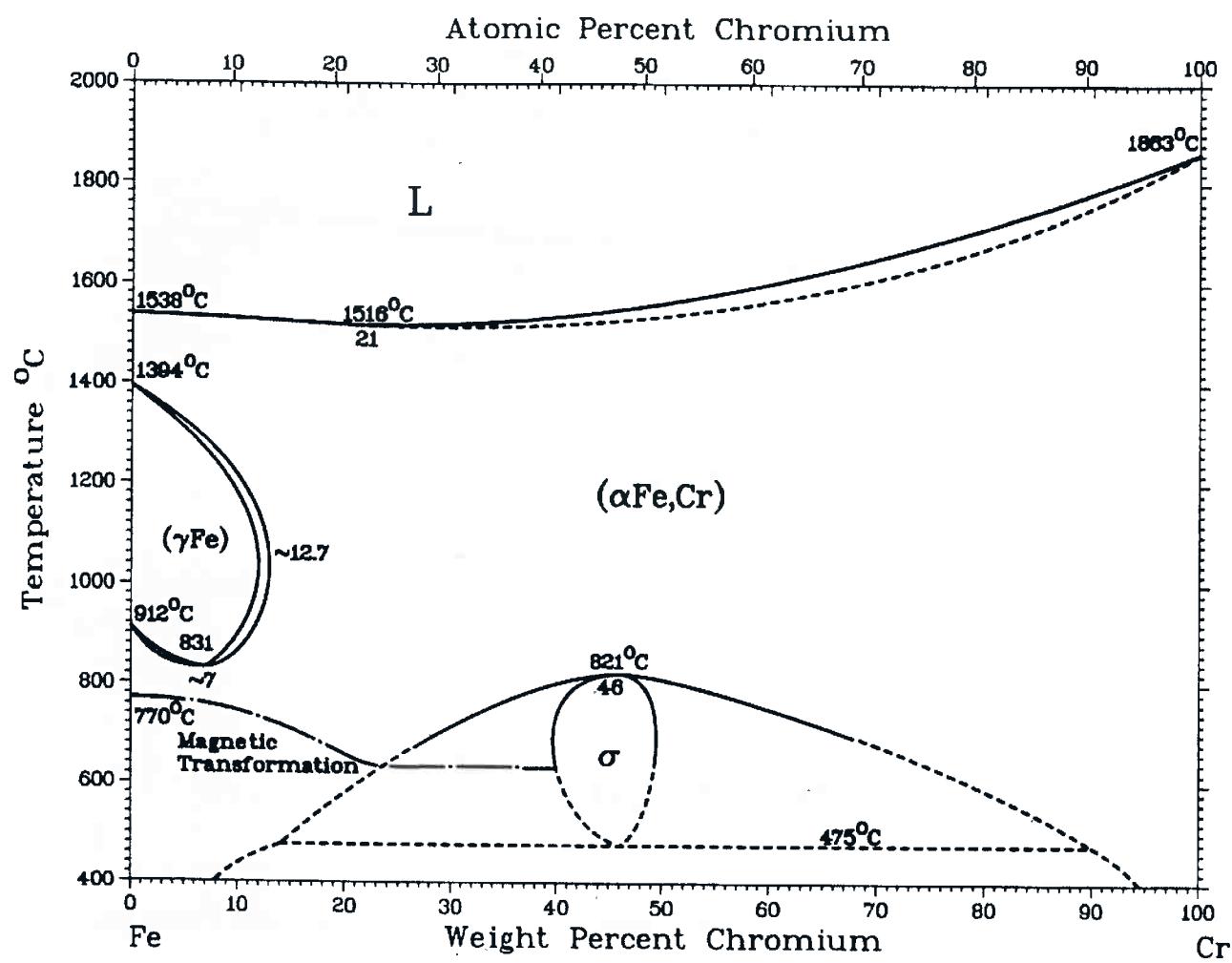


Figura 26 - Diagrama binário Fe-Cr (MASSALSKI, 1996)

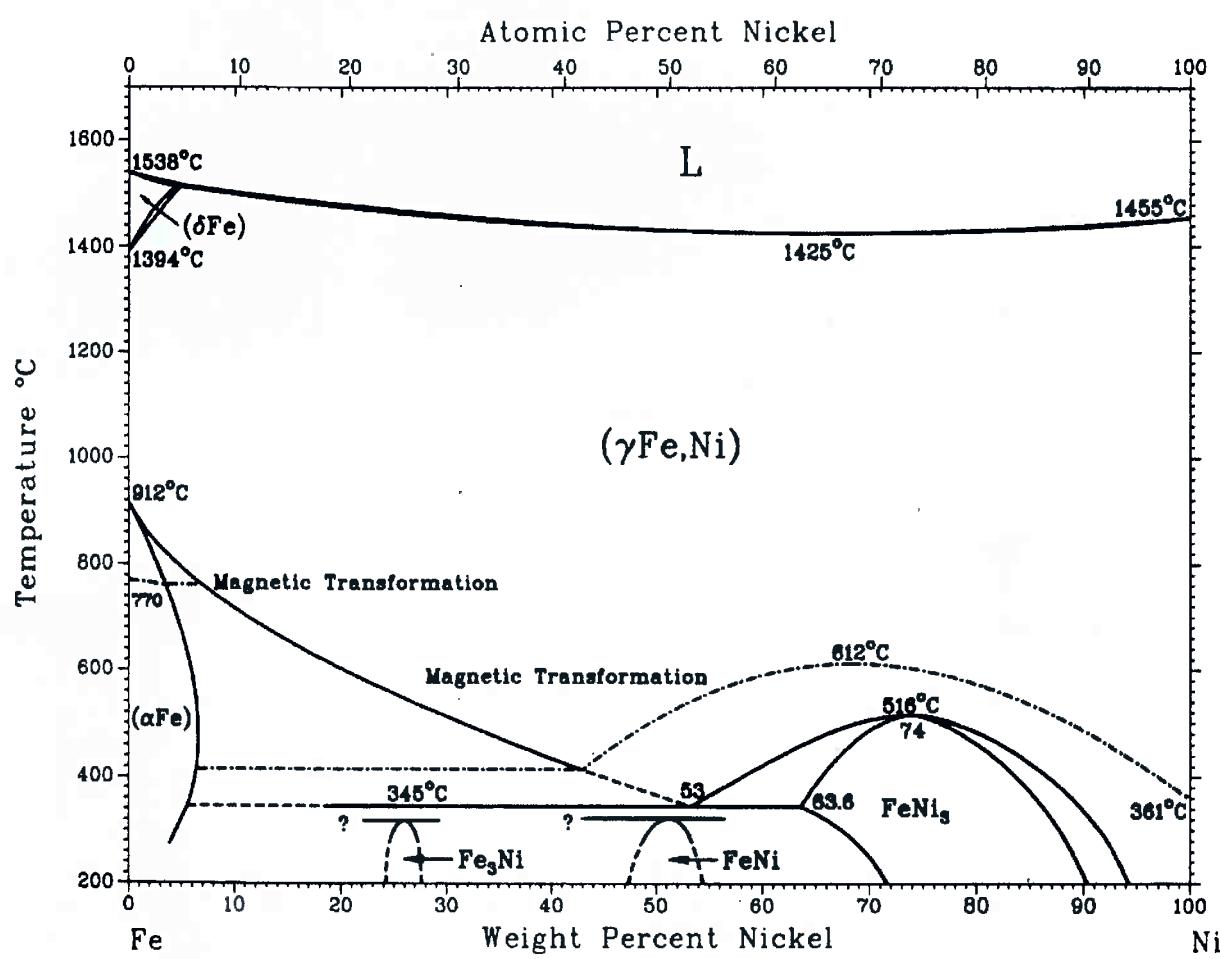


Figura 27 - Diagrama binário Fe-Ni (MASSALSKI, 1996)