

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

FELIPE JOSÉ DOS SANTOS

Análise estatística de dados de curvas de resfriamento utilizando modelo de
regressão linear múltipla

São Carlos

2020

FELIPE JOSÉ DOS SANTOS

Análise estatística de dados de curvas de resfriamento utilizando modelo de
regressão linear múltipla

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Materiais e Manufatura, da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Engenheiro de Materiais e Manufatura.

Orientadora: Profa. Dra. Luralice de Campos Franceschini Canale

São Carlos

2020

AUTORIZAÇÃO DO TRABALHO E FICHA CATALOGRÁFICA

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

S237a SANTOS, FELIPE JOSE DOS
Análise estatística de dados de curvas de resfriamento utilizando modelo de regressão linear múltipla / FELIPE JOSE DOS SANTOS; orientadora Lauralice de Campos Franceschini Canale. São Carlos, 2020.

Monografia (Graduação em Engenharia de Materiais e Manufatura) -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2020.

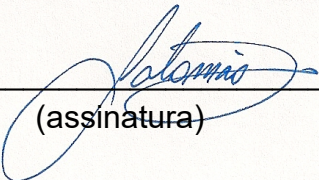
1. regressão estatística. 2. meios de resfriamento. 3. soluções iônicas. 4. tempera. I. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Candidato: Felipe Jose dos Santos
Título do TCC: Análise estatística de dados de curvas de resfriamento utilizando modelo de regressão linear múltipla
Data de defesa: 26/11/2020

Comissão Julgadora	Resultado
Professor Titular Luralice de Campos Franceschini Canale (orientador)	APROVADO
Instituição: EESC - SMM	
Professor Doutor Jose Benedito Marcomini	APROVADO
Instituição: EESC - SMM	
Pesquisador Luiz Henrique Pizetta Zordão	APROVADO
Instituição: Politecnico di Milano - Dipartimento Di Meccanica	

Presidente da Banca: **Professor Associado Rafael Salomão**


(assinatura)

DEDICATÓRIA

*Dedico esse trabalho a minha família,
meus pais Vagner e Leny e meu irmão
Pedro, que nunca desistiram de mim,
estiveram sempre ao meu lado e são os
maiores impulsionadores da minha
felicidade nesse mundo.*

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela oportunidade de viver nesse mundo complexo e cheio de aprendizagem, iluminado pela sua Graça.

A meu pai, Vagner, um grande exemplo de vida, que sempre acreditou em meu potencial e sempre me disse que eu poderia ser quem eu quisesse na vida.

A minha mãe, Leny, que cuidou e cuida de seu filho com muito amor e carinho e nunca me deixou faltarem conselhos ou sorrisos, e me ensinou que o amor genuíno existe.

A meu irmão, Pedro, um grande amigo, professor, companheiro e confidente, que sempre me apoia, me aconselha e me escuta, e me diz que não devemos nunca parar de aprender.

À professora Luralice Canale, pela confiança, compreensão, sorrisos e aprendizagem ao longo de todos os anos de minha graduação e realização de vários trabalhos.

A Luís Pizetta, que forneceu informações para a elaboração desse trabalho e em muito contribuiu para minha formação como engenheiro durante a graduação.

A todos os professores e funcionários da Universidade de São Paulo que, direta ou indiretamente contribuíram para minha formação profissional e pessoal.

A meu amigo, João Pedro, cujos ensinamentos e palavras foram essenciais para que eu pudesse seguir em frente com esse trabalho.

A todos aqueles que um dia trocaram palavras ou sorrisos comigo, ou simplesmente tiveram e experiência de me conhecer. Não seria quem sou se não fosse por todas as experiências e aprendizagens que a vida proporcionou.

Aos meus amigos que sempre estiveram ao meu lado, nos momentos bons e ruins, compartilhando de experiências únicas que nos fazem crescer como pessoas.

A minha noiva Renata, que se tornou um alicerce de minha vida, com quem eu compartilho sonhos e sentimentos. Seu apoio e carinho são primordiais para a conclusão deste trabalho e para me dar mais força e energia em minha vida.

RESUMO

SANTOS, F. **Análise estatística de dados de curvas de resfriamento utilizando modelo de regressão linear múltipla**. 2020. 76f. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

Soluções iônicas de sais são muito utilizadas como meios de resfriamento durante o tratamento térmico de têmpera. Em geral, apresentam taxas máximas de resfriamento altas e uma maior extração de calor, resultado de uma menor estabilidade da camada de vapor que é formada durante o resfriamento, e um maior poder condutivo do líquido com o metal. Devido a esse rompimento mais rápido ou a ausência da camada de vapor, são muito utilizadas para diminuir distorções nas peças e também para aços com baixa temperabilidade, onde as taxas máximas de resfriamento precisam ser suficientemente altas para formação de estrutura martensítica ou bainítica. Experimentos de curvas de resfriamento são realizados com o objetivo de se caracterizar um meio de resfriamento com diferentes parâmetros, como a temperatura do banho, a agitação do meio, a substância utilizada como meio de resfriamento e, no caso de soluções, a concentração do soluto. O presente trabalho pretendeu realizar um estudo estatístico de regressão linear em um banco de dados de curvas de resfriamento, construindo modelos lineares que explicam a variabilidade dos dados e permite inferências para prever as taxas máximas de resfriamento médias em condições não utilizadas previamente no experimento, como diferentes porcentagens dos sais utilizados, oferecendo previsibilidade e explicando a relação entre as diferentes variáveis. O resultado com os modelos mais complexos foi satisfatório do ponto de vista estatístico, com uma grande explicação da variabilidade dos resultados experimentais fornecidos. Esses modelos foram compilados para a construção de um aplicativo que recebe parâmetros de entrada e fornece a taxa máxima de resfriamento esperada para a condição desejada, permitindo ao usuário planejar um experimento de têmpera com confiança no meio de resfriamento utilizado.

Palavras-chave: regressão estatística, meios de resfriamento, soluções iônicas, têmpera.

ABSTRACT

SANTOS, F. **Statistical analysis of cooling curve data using multiple linear regression model** 2020. 76f. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

Ionic salt solutions are widely used as quenching mediums during quenching heat treatment. In general, they have higher maximum cooling rates and greater heat extraction, resulting from low stability of the vapor layer that is formed during cooling, and a greater conductive power of the liquid with the metal. Because of that, they are widely used to reduce distortions in components and for steels that have low hardenability, where the maximum cooling rates must be high enough to form a martensitic or bainitic structure. Cooling curve experiments are carried out in order to characterize a cooling medium with different parameters, such as the bath temperature, the agitation of the medium, the substance used as additives in a cooling medium and, in the case of solutions, the percentage of the solute. The present work intends to carry out a statistical study of linear regression in a database of cooling curves, building linear models that explain the variability of the data and allows inferences to predict average maximum cooling rates in conditions not previously used in the experiment, such as different percentages of the salts added, offering predictability and explanation of the relationship between the different variables. The results with the most complex models are satisfactory from a statistical point of view, with a great explanation of the variability of the experimental results provided. These models were compiled for the construction of an application that receives input parameters and provides the maximum expected cooling rate for the desired condition, allowing the user to plan a quenching experiment with confidence in the cooling medium used.

Keywords: statistical regression, cooling mediums, ionic solutions, quenching.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	17
2. OBJETIVOS.....	19
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	20
3.1 Diagramas TTT (tempo-temperatura-transformação).....	20
3.2 Tratamento Térmico	22
3.3 Mecanismos de Resfriamento	23
3.4 Sais como meios de têmpera.....	24
3.5 Modelos Lineares.....	25
4. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL.....	29
4.1 Obtenção dos Dados	29
4.2 Construção dos Modelos Estatísticos	31
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	35
5.1 Estatística Descritiva (bivariada)	35
5.2 Regressão linear simples.....	42
5.3 Regressão linear múltipla – coeficientes parciais	46
5.4 Regressão linear múltipla – com interações	52
5.5 Diagnóstico dos modelos	57
5.6 Discussão dos modelos e comparativo	63
5.7 Aplicativo Shiny para previsão da taxa máxima de resfriamento	64
6. CONCLUSÃO	70
7. REFERÊNCIAS	73
8. ANEXO A – Comparativo entre modelos estatísticos (modelos 1 a 5).....	75
9. ANEXO B – Comparativo entre modelos estatísticos (modelos 5 a 9)	76

1. INTRODUÇÃO

Aços são ligas metálicas que possuem ferro e carbono em sua estrutura. São materiais muito utilizados em vários segmentos da indústria como componentes de máquinas ou em construções mecânicas. Uma importante característica desses materiais é a possibilidade de combinar diferentes propriedades mecânicas em um só componente, feito que é atingido com a utilização de tratamentos térmicos (SILVA; MEI, 2006).

A têmpera consiste em aquecer o aço até sua temperatura de austenitização, normalmente entre 845 e 870 °C para aços carbono comuns, e posteriormente submetê-lo a um rápido meio de resfriamento com o objetivo de se obter uma estrutura martensítica. Após esse tratamento, a peça é submetida ao revenido para alívio de tensões e aumento da tenacidade. A microestrutura final obtida é a martensita revenida, que combina as propriedades mecânicas de resistência e tenacidade (KRAUSS, 1980).

O sucesso de um tratamento térmico de têmpera, ou seja, o resultado em termos de microestrutura e propriedade, depende também da composição do metal e do meio de resfriamento utilizado. Para a obtenção da martensita, é importante evitar as transformações difusionais do aço, que resultam nas estruturas ferríticas, perlíticas e bainíticas. Aços que possuem determinados elementos de liga em maiores quantidades possuem uma maior temperabilidade, ou seja, uma facilidade maior de formar martensita em relação a aços comuns, enquanto aços comuns precisam de meios com taxas de resfriamento mais altas para formarem martensita com sucesso (SILVA; MEI, 2006).

Soluções salinas de têmpera são muito utilizadas como meios de resfriamento para se obter altas taxas de resfriamento, necessárias para aços que possuem uma baixa temperabilidade, e por contribuírem também no rompimento da camada de vapor ou evitarem completamente sua formação, o que resulta em uma peça com uma menor probabilidade de trincas e distorções (LOZANO, 2016).

Em uma análise de dados, regressão pode ser definida como uma técnica que permite fazer inferências sobre a relação entre variáveis respostas e variáveis independentes. Existem métodos práticos para analisar regressões assumindo o mínimo possível de conhecimento em relação aos dados analisados. Nesse processo, é possível definir uma equação matemática que descreve a relação entre duas ou mais variáveis (FOX; WEISBERG, 2018).

A quantidade de peças que são submetidas a tratamentos térmicos de têmpera para obtenção de propriedades desejadas é muito grande, e cada metal possui uma combinação de taxa de resfriamento, que pode ser estimada por meio de seu respectivo diagrama TTT ou CCT,

e fluido ideal para se chegar no resultado desejado. Neste contexto, o trabalho proposto é de analisar um banco de dados de curvas de resfriamento de soluções salinas a base de sódio, determinando as relações entre as variáveis do experimento, com a pretensão de contribuir fornecendo informações sobre a relação dessas variáveis e a melhor combinação entre elas, otimizando a escolha do meio de resfriamento ideal para o determinado tratamento térmico.

2. OBJETIVOS

O objetivo geral do trabalho é estudar e quantificar as relações entre as variáveis de entrada em um experimento de determinação de curvas de resfriamento e as variáveis de saída.

Os objetivos específicos são:

- Utilizar de ferramentas estatísticas para obter equações (regressão estatística) que descrevam os dados obtidos nos experimentos;
- Comparar os diferentes modelos construídos e avaliar o que melhor representa o banco de dados, com base na literatura;
- Construir um aplicativo de predição da taxa máxima de resfriamento com a equação de regressão do modelo que apresentar melhores resultados.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Aços são ligas ferro-carbono que podem conter quantidades significativas de outros elementos de liga. As propriedades mecânicas de um aço, e consequentemente sua aplicação, dependem do teor de carbono, da presença de diferentes elementos de liga e dos tratamentos térmicos. Ainda que possam existir alternativas a esses materiais, os aços são amplamente utilizados na indústria devido a seu relativo baixo custo, a possibilidade de se alterar as propriedades mecânicas com simples tratamentos térmicos e o vasto conhecimento disponível na literatura sobre esses materiais (CALLISTER, 2014).

Um diagrama de fases é uma ferramenta importante para estudar ligas metálicas, com representações de fases e as respectivas temperaturas e composições onde são estáveis (equilíbrio). Para resfriamentos fora do equilíbrio, o que normalmente acontece na maioria dos tratamentos térmicos, os diagramas CCT (Cooling Continuous Transformation) são mais utilizados, pois refletem as consequentes transformações que ocorrem com as mudanças de temperatura.

Na maioria dos tratamentos térmicos o componente é aquecido até a fase austenítica e dependendo do resfriamento dá origem a outras fases comumente conhecidas, como ferrita, perlita fina, perlita grossa, bainita e martensita (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2009).

3.1 Diagramas TTT (tempo-temperatura-transformação)

O processo de formação de fases como a perlita e a ferrita ocorre por difusão, com nucleação de pequenos nódulos das respectivas fases e crescimento de grãos, até que a nova microestrutura seja formada. Essa transformação não é instantânea e são necessários tempo e energia para que ocorra a movimentação atômica, que origina os primeiros núcleos da fase a ser formada e o consequente rearranjo da microestrutura do aço. Os núcleos crescem até que se encontram fisicamente tornando o processo mais lento e prosseguem até a total estabilização da microestrutura. Quando um aço eutetóide, situado no campo austenítico – por exemplo a 800°C, é resfriado até uma temperatura abaixo de 727°C, nucleiam-se pequenos nódulos de perlita, até a transformação completa da austenita (SILVA; MEI, 2006).

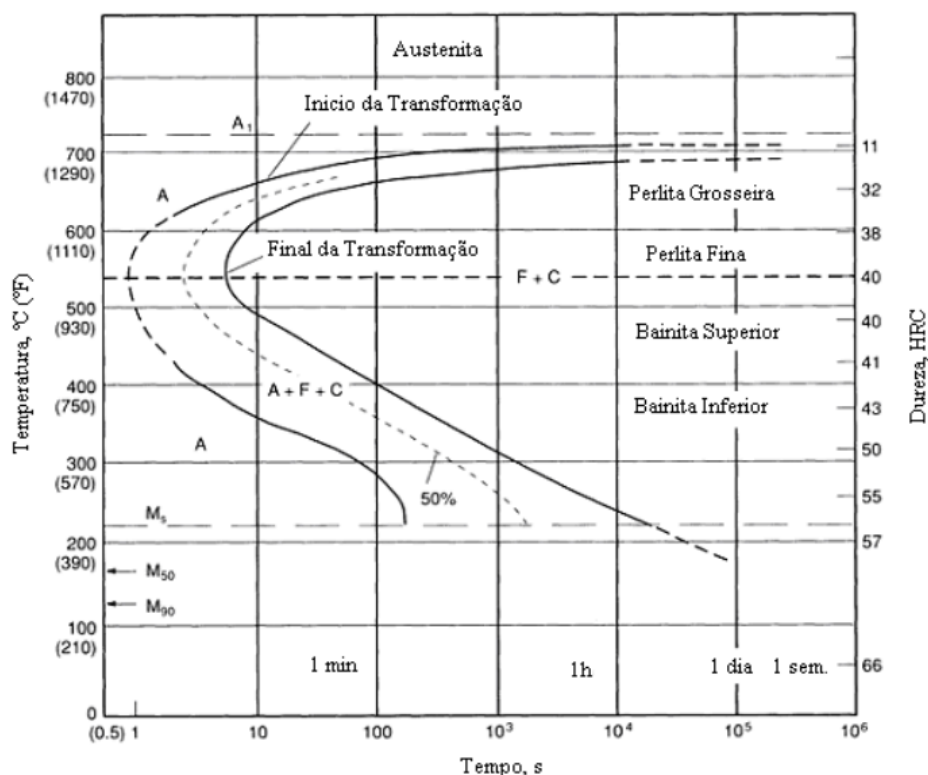
Na transformação de fases, existem dois processos com efeitos antagônicos na cinética de transformação, a supersaturação e o processo difusional. Quanto mais baixa a temperatura abaixo de zona austenítica, maior será a força motriz de decomposição da austenita devido à

supersaturação, ou seja, uma quantidade de carbono muito acima do limite de solubilidade da nova fase, a ferrita. Por outro lado, como é necessária energia para essa movimentação atômica, quanto mais baixa a temperatura, menor é a difusão atômica e maior o tempo necessário para formação da nova microestrutura (SILVA; MEI, 2006).

Pode-se subdividir as curvas TTT em dois tipos: curvas ITT (isothermal, time, transformation), quando são utilizados métodos isotérmicos, e curvas CCT (continuous cooling transformation), quando são analisadas por meio da constante queda da temperatura promovida por um meio de resfriamento contínuo.

Um diagrama ITT (curva de transformação isotérmica) apresenta diferentes microconstituintes que não estão presentes no diagrama de fases Fe-Fe₃C, como a bainita e a martensita. A Figura 1 mostra a curva ITT de um aço SAE 1080 e as diferentes microestruturas possíveis de serem formadas. Acima do “nariz” da curva, podemos dizer que o efeito dominante é o da supersaturação, e abaixo do “nariz” da curva que o efeito dominante é o da difusão (SILVA; MEI 2006).

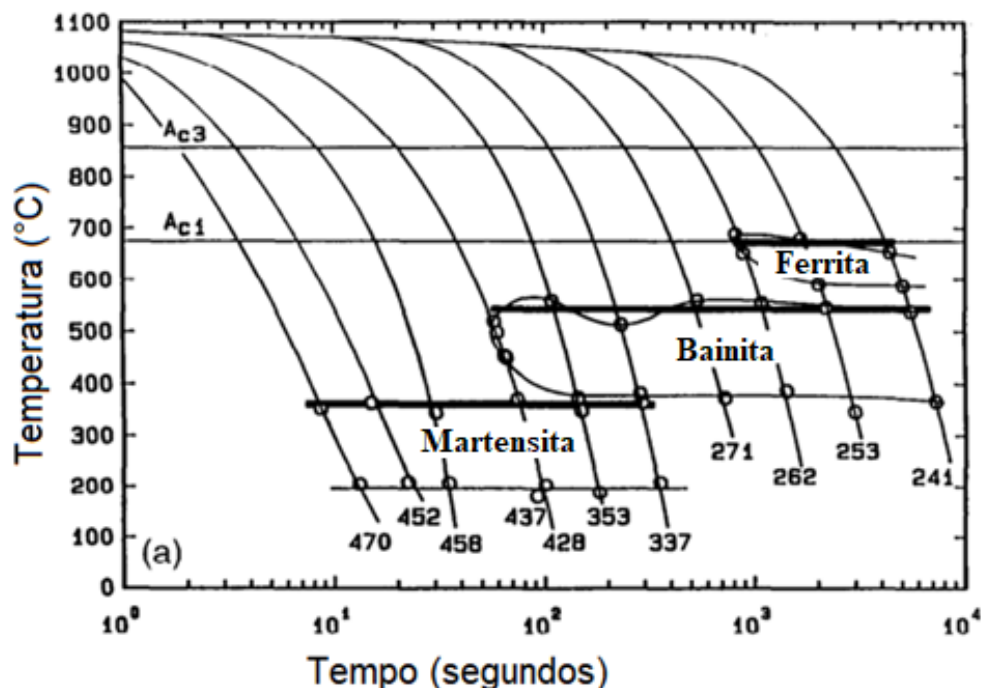
Figura 1: Curva ITT para o aço SAE 1080



Fonte: Metals Handbook, 1990.

A Figura 2 traz uma típica curva CCT de um aço ligado. É interessante notar que as temperaturas de início de transformação bainítica e martensítica independem da velocidade de resfriamento, evidenciado no gráfico pelas linhas mais escuras (ZHAO; NOTIS, 1995).

Figura 2: curva CCT de um aço hipoeutetóide 0,24C-1,67Mn-0,39Si-0,14Ni-0,17Cr-0,22Mo-0,11V apresentando para cada curva o valor da dureza Brinell obtido com essas microestruturas



Fonte: Adaptado de Zhao; Notis (1995)

3.2 Tratamento Térmico

Podemos definir tratamentos térmicos como um conjunto de operações térmicas às quais um material é submetido com objetivo de se obter propriedades específicas. Nessa operação, os aços são submetidos a condições controladas de tempo, atmosfera, velocidades de aquecimento e resfriamento. As propriedades de um material dependem de sua microestrutura, e como os tratamentos térmicos são capazes de alterar essa microestrutura, em maior ou menor escala, geram um consequente efeito de alteração em suas propriedades. (CHIAVERINI, 2008).

Os tratamentos térmicos são vitais na produção dos aços, e estão presentes em várias etapas do processamento. Muitas vezes um mesmo material é submetido a diversos tratamentos térmicos e diferentes etapas de conformação até que a geometria e as propriedades almejadas sejam atingidas. É importante conhecer o material que se está tratando, pois cada peça e material possuem particularidades que influenciam no planejamento de tratamentos térmicos, afetando parâmetros como temperatura, tempo e velocidades de aquecimento e resfriamento.

Uma das combinações de propriedades mais desejadas nas aplicações dos aços é a de resistência e tenacidade, que é obtida através do tratamento térmico de têmpera, seguido pelo revenimento. A têmpera consiste em aquecer o material até a temperatura de austenitização e depois resfriá-lo rapidamente, mergulhando o material em um fluido de resfriamento. Esse resfriamento rápido origina nos componentes de aço uma microestrutura de elevada dureza e resistência mecânica conhecida como martensita. A transformação martensítica depende da velocidade de resfriamento do processo, de modo que essa taxa deve ser alta o suficiente para evitar a formação das microestruturas difusionais do aço durante o tratamento térmico, como a bainita e a perlita (SILVA; MEI, 2006).

Ao se analisar as curvas TTT dos aços, é necessário atingir uma velocidade de resfriamento igual ou superior a $T_{XCrítica}$ para se obter uma estrutura martensítica. Podemos definir $T_{XCrítica}$ como o valor mínimo de taxa de resfriamento que deve ser obtido para evitar as transformações difusionais do aço. Para cada grupo de aço e cada condição de tratamento existe um meio de resfriamento mais adequado, que gerará a microestrutura desejada, uniformidade e uma incidência menor de trincas e distorções. Para aços de temperabilidade mais alta, como o SAE 4340, meios menos severos de têmpera como óleos são suficientes para formar uma estrutura martensítica. Aços com poucos elementos de liga e de temperabilidade mais baixa, como um aço SAE 1045, se submetidos a um tratamento térmico de têmpera em óleo podem não gerar uma estrutura totalmente martensítica, não atingindo as propriedades mecânicas desejadas. Nesses casos é necessário se utilizar de meios mais severos, como a água ou soluções salinas.

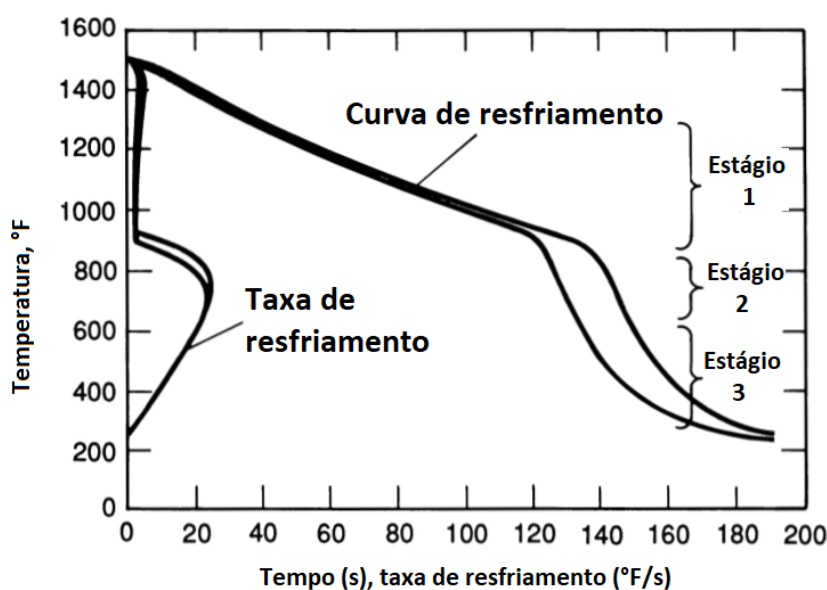
3.3 Mecanismos de Resfriamento

Pode-se dividir os mecanismos de resfriamento que ocorrem durante a têmpera em um meio líquido volátil em três fases distintas, cada uma com características bem diferentes entre elas, como pode ser visto na Figura 3. A primeira fase é a da formação da camada de vapor, que ocorre logo no início do tratamento, imediatamente após o contato do metal quente com o fluido. Como a diferença de temperatura é muito alta, e acima da temperatura de Leidenfrost, é formada uma camada de vapor estável ao redor da peça. Os principais mecanismos de transferência de calor nessa etapa são a condução e a radiação do filme de vapor. Nessa etapa são encontradas as menores taxas de resfriamento da têmpera, principalmente para fluidos cuja camada de vapor é duradoura e mais estável. Na segunda etapa a camada de vapor colapsa e as

taxas de resfriamento são mais altas. Isso se dá pela nucleação de bolhas na superfície do metal. A terceira fase, em temperaturas mais baixas, é associada com o fim da ebulição de bolhas na superfície do metal e o início de uma extração de calor que se dá por condução e convecção do aço e o meio de resfriamento líquido (TOTTEN; BATES; CLINTON, 1993).

A agitação do meio de resfriamento costuma acelerar a extração de calor da peça fazendo com que a primeira etapa acabe mais cedo, rompendo a camada de vapor em uma temperatura mais alta e em um tempo mais curto. Assim, o resfriamento predomina-se na etapa dois onde as taxas são mais altas e na etapa 3 até o equilíbrio térmico. Outro fator que é estudado é a temperatura do fluido: normalmente, quanto maior a temperatura, menores são as taxas de resfriamento, dado que as outras variáveis se mantenham constantes. As taxas de resfriamento e as faixas de temperatura para cada etapa dependem da composição do fluido e de outros parâmetros, como agitação, temperatura do banho, massa e geometria. Do meio mais severo para o menos severo, tem-se as soluções salinas, água, soluções poliméricas em água, óleos, gases inertes e finalmente o ar (TOTTEN; BATES; CLINTON, 1993).

Figura 3: representação de curvas de resfriamento e os três diferentes estágios da extração de calor.



Fonte: Adaptado de Totten; Bates; Clinton, 1993.

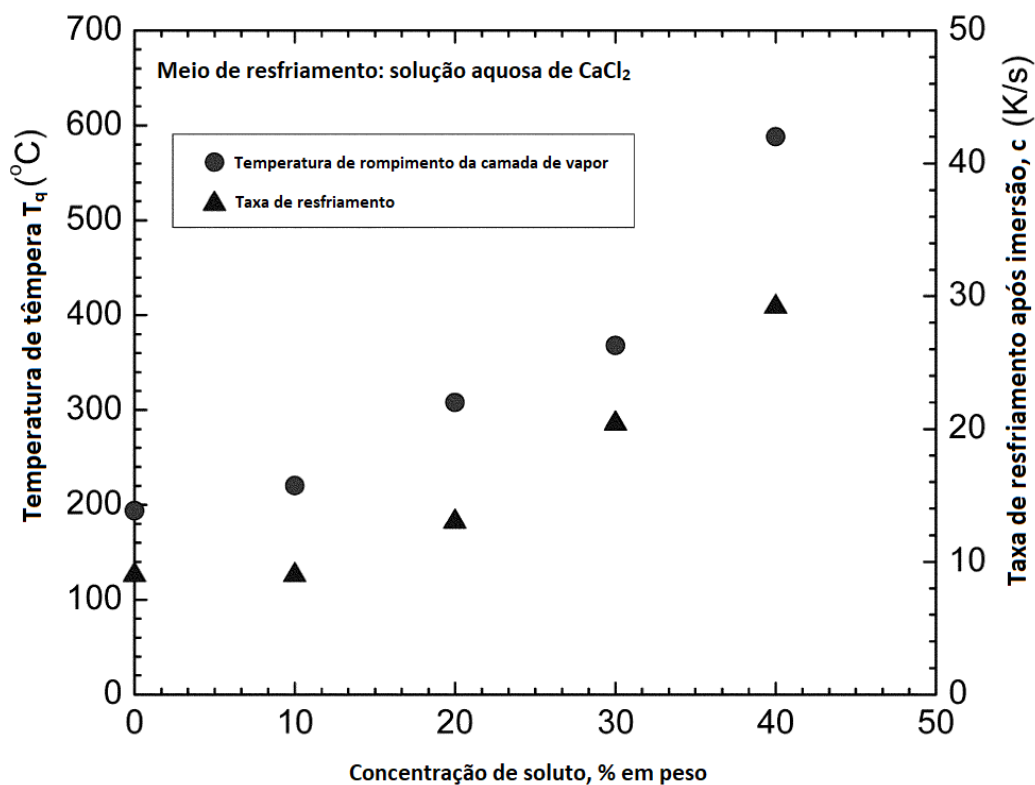
3.4 Sais como meios de t mpera

Uma outra maneira de se romper a camada de vapor   com o aumento na taxa de transfer ncia de calor da condens  o. Solu  es salinas em  gua s o muito utilizadas como

meios de t mpera por normalmente apresentarem altas taxas de resfriamento, e uma das explica  es   o colapso dessa camada em temperaturas mais altas e em tempos mais curtos. Com esse tipo de fluido   poss vel alterar o modo de resfriamento da superf cie da pe a em refrigera  o.

Estudos mostram que a concentra  o do sal na  gua   importante para aumentar a temperatura de transi  o de est gio 1 para o est gio 2, a qual pode ser definida como a temperatura na qual a camada de vapor se rompe promovendo um aumento na taxa de transfer ncia de calor m xima. A Figura 4 mostra o efeito de diferentes concentra  es de sal na taxa de resfriamento e na temperatura de rompimento da camada de vapor para uma solu  o salina de CaCl_2 (ARAI; FURUYA, 2011).

Figura 4: efeito da concentra  o de sal na taxa de resfriamento e na temperatura de t mpera



Fonte: Adaptado de Arai; Furuya, 2011.

3.5 Modelos Lineares

Um modelo estat stico pode ser definido como um conjunto de premissas que possuem estrutura suficiente para apoiar na estimativa de diferentes quantidades de fatores interessantes;

para utilizar informações passadas para prever valores futuros; e para executar muitas outras tarefas. (FOX; WEISBERG, 2018).

Modelos lineares são essenciais para estatística aplicada. São frequentemente utilizados em pesquisa e promovem a base para várias outras classes de modelos estatísticos, como os modelos lineares generalizados, mais complexos.

Possui-se um conjunto de m preditores tal que $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ ou variáveis explicativas, e uma variável resposta y para cada uma das diferentes situações e casos. Esses preditores podem ser variáveis numéricas qualitativas contínuas, como a nota de uma prova na faculdade, podem ser variáveis categóricas, como uma nacionalidade, gênero de uma pessoa ou um grupo de tratamento a qual ela faz parte, e também uma variável ordinal categórica, como uma nota de 1 a 5 em um teste de personalidade onde o número se refere a discordar ou concordar com as frases sugeridas (Escala Likert). Todos esses preditores são, então, transformados em variáveis de regressão, ou regressores, que são variáveis numéricas que aparecem diretamente no modelo. Finalmente, para poder construir um modelo linear, precisamos que algumas premissas básicas sejam cumpridas: (FOX; WEISBERG, 2018):

- **Resposta:** a resposta em um modelo estatístico linear deve ser uma variável numérica que deve ser, pelo menos, nominalmente contínua;
- **Observações:** as observações das variáveis para um caso devem ser independentes das observações para todos os outros casos. Se os casos são dependentes, então devem ser utilizados modelos lineares de efeitos mistos;
- **Linearidade:** a dependência da variável resposta dos preditores se dá por meio do valor esperado condicional ou pela função média. Podemos definir que a quantidade $\eta(x) = \beta_0 + \beta_1.x_1 + \dots + \beta_k.x_k$, onde o lado direito da equação é o preditor linear e $x = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ o vetor de regressão. Se a função de regressão está incorreta, então qualquer parâmetro e quaisquer conclusões atingidas com a utilização do modelo em questão podem se tornar inválidas;
- **Variância Condicional Constante:** A variância condicional da resposta, dados os regressores (ou, de forma equivalente, os preditores) deve ser constante. A falha em não manter essa suposição não necessariamente invalida as estimativas de mínimos quadrados dos β_s , mas pode invalidar outros fatores do modelo, como os erros padrões dos coeficientes e suas consequentes derivadas, ou seja, testes e declarações de confiança.

- **Normalidade:** $(\varepsilon|x) \sim N(0, \sigma_2)$, produzindo um modelo linear normal (distribuição dos resíduos). Um modelo de distribuição normal provê muito mais estrutura do que o necessário para ajustar um modelo linear pelo método dos mínimos quadrados, embora forneça uma forte justificativa para isso.

Duas variáveis explicativas de um modelo de regressão linear são ditas interativas quando o efeito parcial de uma delas depende do valor da outra, isto é, quando as regressões construídas em várias categorias de um fator não se dão de maneira paralela. Logo, pode-se afirmar que o fator interage com uma ou mais das variáveis explicativas quantitativas. O modelo de regressão pode então ser modificado e reformulado para refletir essas interações e possivelmente aumentar a aplicabilidade do modelo. As premissas para a construção de um modelo linear com interações são as mesmas que para os modelos sem interações (FOX, 2015).

Para analisar os o resultado de uma regressão linear, são utilizados alguns conceitos estatísticos em relação aos coeficientes que são obtidos. Os coeficientes formam a equação de regressão e devem ser analisados de acordo com a significância estatística que possuem dentro do modelo. Alguns conceitos importantes são:

- **Distribuição de resíduos:** os resíduos são a diferença entre os valores obtidos no banco de dados e os valores previstos pelo modelo. Um resíduo negativo é uma superestimativa e um resíduo positivo é uma subestimativa. Idealmente, deve-se chegar a uma distribuição como mediana próxima a zero.
- **Estimativa:** são os valores estimados para os coeficientes. Cada coeficiente possui uma estimativa própria que não pode ser comparada a outros coeficientes, em especial quando são categorias distintas, porque a origem das informações pode ser tão distante quanto uma cor, uma porcentagem ou a nota em uma prova da faculdade.
- **Desvio padrão:** o erro do coeficiente. São utilizados para construir as faixas de variabilidade dos coeficientes, normalmente sob a forma de Coeficiente \pm Desvio Padrão, o que indica a faixa na qual o valor será dado se for utilizado um outro banco de dado com as mesmas variáveis. O desvio padrão também é utilizado para verificar se o parâmetro é significativamente diferente de 0. Quando isso ocorre, pode-se afirmar que o coeficiente tem impacto na variável resposta.
- **Valor “t”:** o valor t é a razão entre o coeficiente de regressão β e seu erro padrão, ($t = \text{coeficiente} \div \text{desvio padrão}$). A estatística t testa a hipótese de que um

coeficiente de regressão populacional é 0. Se um coeficiente for diferente de zero, então ele tem um efeito genuíno na variável dependente. No entanto, um coeficiente pode ser diferente de zero, mas se a diferença for devido à variação aleatória, então ele não tem impacto na variável dependente.

- **Teste $\Pr(> |t|)$:** o valor P indica se a variável independente possui capacidade preditiva. Essencialmente, esse valor mostra se o efeito da variável se deu por efeito aleatório ou se existe algum efeito na variável dependente. Quanto menor o valor de P, mais significativo é o impacto do coeficiente no modelo.
- **R^2 :** o R quadrado é uma medida estatística que representa a proporção de variância para uma variável dependente que é explicada por uma ou mais variáveis independentes de um modelo de regressão estatística. É um número entre zero e um, e quanto mais próximo de zero, pior é o modelo.

Outro ponto importante na avaliação de um modelo de regressão é o diagnóstico que deve ser feito. Os diagnósticos de regressão são métodos para determinar se um modelo de regressão ajustado representa adequadamente os dados. Eles abordam a adequação de um modelo estatístico depois que ele foi ajustado aos dados. Um trabalho preliminar cuidadoso, no entanto, não garante a adequação de um modelo de regressão, e a prática da modelagem estatística é, portanto, muitas vezes um refinamento iterativo. Modelos lineares fazem suposições fortes e às vezes irrealistas sobre a estrutura dos dados, pois não requerem, necessariamente, um conhecimento prévio do pesquisador acerca dos dados. Quando as suposições são violadas, as estimativas e previsões podem se comportar mal e podem até mesmo deturpar completamente os dados. Isso é verdadeiro para outros modelos de regressão paramétrica. Os diagnósticos de regressão podem revelar problemas e geralmente apontar o caminho para soluções (FOX; WEISBERG, 2018).

4. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Por se tratar de uma análise estatística de um banco de dados para quantificar a relação entre variáveis de um experimento, o procedimento experimental foi dividido em etapas cronológicas, partindo da obtenção dos resultados experimentais utilizados na análise, passando pela etapa dos modelos descritivos dos dados até a obtenção das equações de regressão linear.

4.1 Obtenção dos Dados

Para a realização do trabalho, foram utilizadas informações de uma base de dados de curvas de resfriamento, cuja fonte são experimentos de meios de resfriamento utilizando soluções salinas baseados nas normas ASTM D6200 e ASTM D6482-06. Cada condição do experimento continha as seguintes informações para caracterização (ZORDÃO, 2019):

Variáveis de entrada:

- Sal
- Concentração de soluto (será referido também, ao longo do trabalho, como *porcentagem* ou *porcentagem do sal*)
- Agitação
- Temperatura do banho

Todas as curvas de resfriamento foram compiladas e transformadas em uma tabela resumo em formato Microsoft Excel. Cada condição experimental foi realizada no mínimo duas vezes, ou até se obter uma diferença de resultado experimental na taxa máxima de resfriamento e na temperatura em que elas ocorrem não superior a 10 °C, de forma que os dados utilizados são as médias calculadas dos diferentes experimentos com os mesmos parâmetros. Isso garante a sanidade de dados e uma menor variabilidade nos resultados.

Variáveis de saída:

- Taxa máxima de resfriamento

- Temperatura da taxa máxima
- Taxa de resfriamento a 700°C
- Taxa de resfriamento a 300°C
- Taxa de resfriamento a 200°C
- Tempo entre temperaturas de 850 e 700°C
- Tempo entre temperaturas de 850 e 300°C
- Tempo entre temperaturas de 850 a 200°C

O objetivo do referido trabalho foi estudar o comportamento de diferentes soluções iônicas em relação a água pura, assim como avaliar a influência dos fatores externos (agitação e temperatura do banho). Foram extraídos valores das propriedades dos meios, como taxas de resfriamento a diferentes temperaturas para caracterizar e diferenciar esses meios. Foram utilizadas 5 substâncias diferentes para a obtenção dos dados, conforme Tabela 1. Todos os materiais são do fabricante Labsynth e as informações retiradas das respectivas FISPQ (Ficha de Informações de Segurança de Produtos Químicos (ZORDÃO, 2019).

Tabela 1: Sais utilizados e respectivas solubilidades em água

Descrição	Fórmula Química	Solubilidade em Água
SULFATO DE SÓDIO ANIDRO P.A.	Na_2SO_4	200 g/L
NITRITO DE SÓDIO P.A.	NaNO_2	820 g/L
CLORETO DE SÓDIO P.A.	NaCl	333 g/L
BICARBONATO DE SÓDIO P.A.	NaHCO_3	95,5 g/L
HIDRÓXIDO DE SÓDIO P.A.	NaOH	1111 g/L

Fonte: Adaptado de ZORDÃO, 2019.

Apesar do composto NaOH não ser considerado um sal, essa nomenclatura foi utilizada ao longo dos trabalhos por sua aceitação no âmbito industrial. Para efeito de comparação e padronização, foi utilizada água destilada (ZORDÃO, 2019).

Os sais utilizados foram solubilizados em meio aquoso, em quantidades calculadas de 2, 7, 12 e 15% massa, exceto pelo NaHCO_3 , pois este possui uma solubilidade limitada em meio aquoso. Para esse sal, foram utilizadas as concentrações de 2, 5 e 7% massa. Essa informação foi levada em consideração na construção dos modelos propostos e do aplicativo, produto deste trabalho (ZORDÃO, 2019).

Foi utilizada uma sonda Inconel 600® aquecida em um forno elétrico a $850 \pm 2^\circ\text{C}$. Após o atingimento da temperatura e estabilização, a sonda era mergulhada no fluido em estudo rapidamente. Cada experimento promovido gerava uma base de dados com um registro na queda de temperatura com frequência de 8 Hz (medição a cada 0,125 segundos), medida por um sistema de aquisição de dados do fabricante National Instruments (SCXI-1000DC e NI SCXI-1600), além do software Labjack (ZORDÃO, 2019).

A agitação mecânica foi promovida por um agitador laboratorial e o aquecimento do meio de resfriamento foi promovido por uma chapa aquecedora.

Foram utilizadas as temperaturas de banho de 25, 35 e 45°C , e as agitações de 0 (sem agitação), 500 e 800 rpm. A temperatura durante o experimento foi registrada por meio de um termopar do tipo K, localizado no centro geométrico da sonda.

4.2 Construção dos Modelos Estatísticos

A base de dados fornecida em Microsoft Excel foi carregada em um software em linguagem R para compilação dos dados. A construção do modelo se inicia na leitura e classificação dos dados como recebidos.

Para facilitar, os dados foram nomeados da maneira abaixo, quando colocados no software:

- Variáveis resposta (variáveis de interesse do experimento)
 - Txmax – taxa de resfriamento máxima
 - Temp_txmax – temperatura que se atinge a taxa máxima
 - Tx700 – taxa a 700°C
 - Tx300 – taxa a 300°C
 - Tx200 – taxa a 200°C
- Variáveis preditoras (variáveis que afetam a resposta e são medidas pelo pesquisador)
 - Sal – meio de resfriamento utilizado
 - Porcentagem – concentração em massa de sal da solução
 - Graus_c – temperatura do banho
 - Rpm – rotação do banho, agitação
 - T850_700 – intervalo de tempo entre 850 a 700°C
 - T850_300 – intervalo de tempo entre 850 a 300°C
 - T850_200 – intervalo de tempo entre 850 a 200°C

A Figura 5 mostra a tela inicial do software R utilizado para as análises estatísticas, com a leitura da planilha em Excel. Algumas informações fornecidas, como o fluxo de calor, o coeficiente de transferência de calor e o índice de aceleração podem ser calculados com o restante das variáveis do experimento, e, portanto, não foram incluídos na análise.

Figura 5: tela de leitura da planilha Excel no software R.

```
## # A tibble: 6 x 17
##   sal   graus_c porcentagem rpm   txmax temp_txmax tx700 tx300 tx200 t850_700
##   <fct> <fct>         <dbl> <fct> <dbl>         <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>
## 1 H2O   25             0 0      232      656    221    86    36    4.9
## 2 H2O   25             0 500     234      641    153    85    42    5.3
## 3 H2O   25             0 800     243      658    232    87    48    2.3
## 4 H2O   35             0 0      204      586    171    84    35    4.6
## 5 H2O   35             0 500     196      581    111    86    41    3.8
## 6 H2O   35             0 800     240      640    231    85    46    2.6
## # ... with 7 more variables: t850_300 <dbl>, t850_200 <dbl>, ld850_300 <dbl>,
## #   qmax <dbl>, hmaxguilherme <dbl>, hmaxbudapest <dbl>, hgrossmann <dbl>
```

Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Durante a construção do trabalho, foi necessário escolher uma variável resposta mais adequada para se analisar, e as respectivas variáveis preditoras. Pela influência que a taxa máxima de resfriamento possui no que diz respeito a severidade de têmpera, essa foi a variável escolhida para os modelos. Como variáveis preditoras, foram utilizadas o sal, a porcentagem, a temperatura do banho e a rotação. Os tempos foram entendidos como preditores das taxas de resfriamento (pois a taxa é calculada a partir da diferença de temperatura entre dois pontos, dado um intervalo de tempo), e, portanto, foram desconsiderados.

Após atestada a sanidade dos dados, é feita uma análise estatística descritiva bivariada simples, onde os valores são lidos e tentam ser relacionados, procurando tendências visuais que possam ajudar a interpretar os dados fornecidos. Para essa etapa foram construídos gráficos lineares e boxplots (ou diagrama de caixa) que traduzem os dados de forma visual.

Após as primeiras impressões em relação aos dados, foi feita uma regressão linear simples com as variáveis, primeiro dois a dois, construindo alguns modelos estatísticos. Cada modelo é avaliado quanto à significância das variáveis na equação de regressão e o quanto da variabilidade dos dados pode ser explicada pelo modelo (R^2). Ao passo que os modelos são construídos, são adicionados outros coeficientes e analisa-se se a inclusão tornou o modelo mais ou menos explicativo que o anterior, fazendo um paralelo com a literatura para explicar os diferentes resultados obtidos.

Para construção dos modelos de regressão foi considerada como base a água destilada, na temperatura de 25°C e sem agitação.

Assim como na análise descritiva bivariada, foram construídos gráficos para melhor visualização dos parâmetros e das tendências apresentadas pelos dados. Em seguida, foram construídas regressões lineares múltiplas com as variáveis de entrada, procurando construir um modelo que explicasse melhor a variabilidade.

A última etapa na produção das regressões é considerar, além de mais variáveis, a interação entre elas. Dessa forma, avaliou-se como todas as variáveis se relacionavam entre si para construção de um modelo de regressão linear múltipla com interações. Para esse modelo, a base considerada foi o sal NaSO_4 , porque não existe sentido físico em usar a água como base para um modelo onde está sendo quantificada a relação entre um sal e sua porcentagem na solução. A escolha se deu de maneira aleatória, de acordo com a ordenação dos dados no software.

A leitura da significância das variáveis nos modelos no aplicativo R pode ser interpretada da seguinte maneira:

- ***: 0,1%;
- **: 1%
- *: 5%
- .: 10%

Quando a variável não é estatisticamente significativa dentro das faixas descritas, seu resultado, no código do programa, aparece em branco. O valor máximo de significância avaliado pelo software R foi de 10%. Algumas literaturas consideram a faixa de 15%, mas entende-se que, para o experimento em questão, seria considerar um erro muito significativo e as variáveis nessa categoria foram ditadas como não significativas.

Os modelos foram comparados de forma resumida quanto às características que apresentam, mostrando a evolução da análise de acordo com a inclusão dos coeficientes. Também foi feito um diagnóstico de cada modelo quanto aos resíduos de Pearson, para verificar se o modelo representa de maneira adequada os dados utilizados para sua construção. Eles são obtidos pela diferença entre os dados calculados e os dados reais.

Para o modelo que apresentou o maior R^2 , são apresentadas as relações entre as variáveis e alguns exemplos de gráficos onde o resultado obtido (modelado) é muito próximo do presente no banco de dados.

Por fim, utilizando-se os modelos com maior poder explicativo da relação entre as variáveis, foi feito um aplicativo em linguagem R com a biblioteca Shiny que usa como base as equações de regressão linear múltipla obtidas. O aplicativo tem como objetivo auxiliar um

usuário na predição das taxas de resfriamento máxima quando são utilizados os sais contidos no banco de dados deste trabalho, mas também permite extrapolar o resultado para valores que não foram medidos experimentalmente, otimizando a utilização das condições para se obter um experimento de têmpera com maior confiabilidade. Alguns exemplos de resultados obtidos com o software são demonstrados na seção de resultados e discussões.

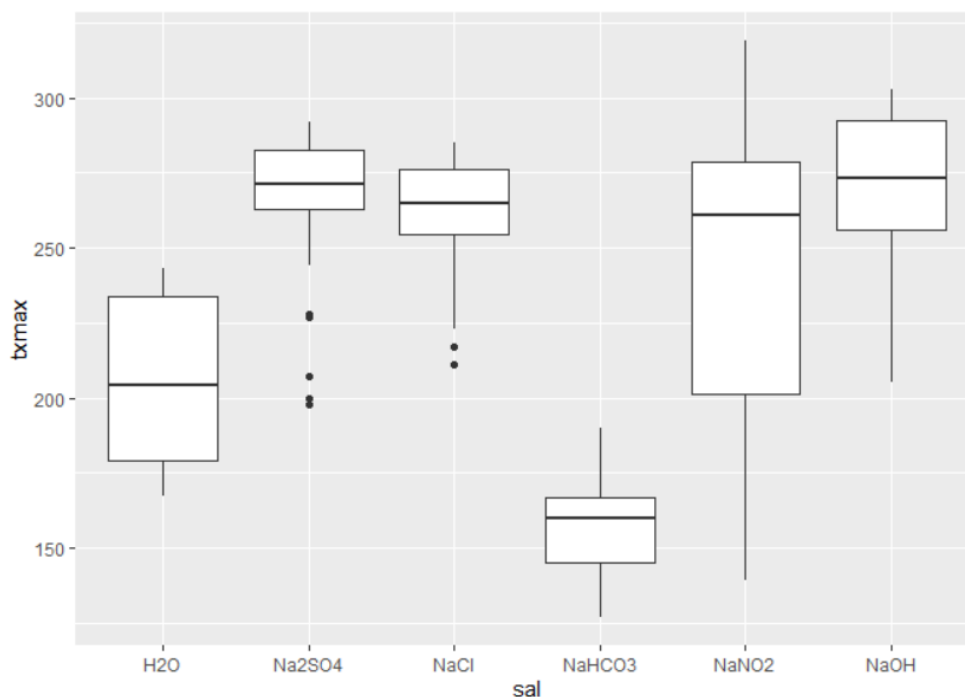
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A apresentação dos resultados e suas discussões será dividido em ordem cronológica, de acordo com a leitura e construção dos modelos estatísticos deste trabalho. De forma a não tornar repetitiva e exaustiva as referências teóricas da literatura quanto aos efeitos observados, esse ponto será deixado para o final, de forma consolidada, ou apresentado de forma pontual quando pertinente. O resumo de todos os modelos estatísticos construídos, os erros, valores de coeficientes e respectivos R^2 estão presentes nos anexos deste trabalho.

5.1 Estatística Descritiva (bivariada)

Os primeiros resultados da análise são gráficos que plotam as variáveis do banco de dados conforme extraídas, sem nenhum tratamento estatístico. A Figura 6 mostra a distribuição da taxa máxima de resfriamento de acordo com o tipo de sal. Os pontos fora do diagrama são chamados de pontos discrepantes, ou *outliers*, e podem ser definidos como os pontos fora dos limites inferiores e superiores do diagrama, construído pela mediana e pelos primeiros e terceiros quartis de um grupo de dados (GONÇALVES, 2020).

Figura 6: diagrama de caixa da taxa máxima de resfriamento e o tipo de sal

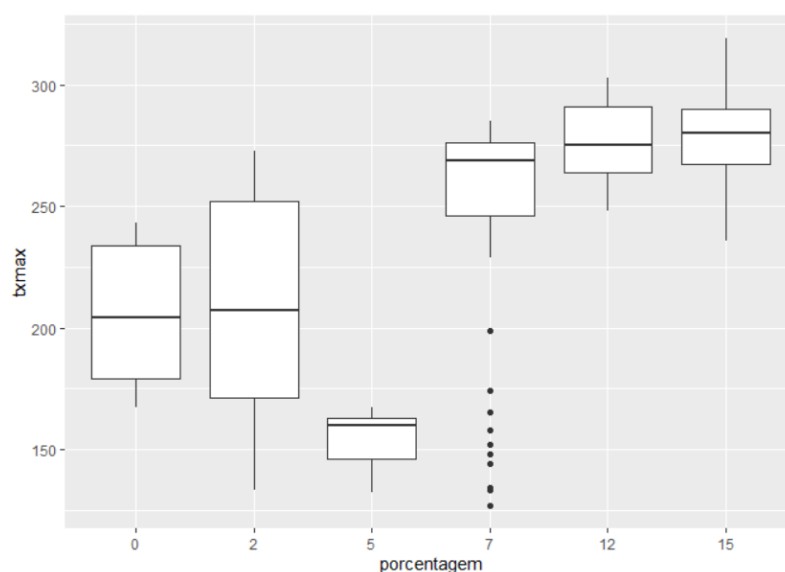


Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Com o diagrama, visualmente pode-se dizer que alguns sais, como o sulfato de sódio e o cloreto de sódio possuem uma variabilidade mais baixa na taxa máxima de resfriamento, enquanto o nitrito de sódio possui uma alta variabilidade. Também podemos afirmar que o bicarbonato de sódio possui as taxas mais baixas do banco de dados, estatisticamente inferiores à da base considerada, a água pura, e que o hidróxido de sódio possui altas taxas de resfriamento.

A Figura 7 mostra a porcentagem do sal em relação a taxa máxima de resfriamento. Nesse diagrama existe uma tendência de crescimento na taxa máxima com o aumento da porcentagem do sal, exceto em 5%, onde o comportamento está fora do padrão. Além disso, em 7% vemos uma alta quantidade de *outliers*, pontos que não compõem um grupo estatisticamente grande dos dados. Analisando a forma com que o experimento foi conduzido, verifica-se que, devido à solubilidade limitada do NaHCO_3 , ele foi utilizado em 2, 5 e 7% massa, enquanto os outros sais foram utilizados em 2, 7, 12 e 15%. Associando essa informação experimental com o diagrama anterior, pode-se afirmar que o comportamento fora do padrão a 5% se dá porque o único sal analisado com essa porcentagem é o NaHCO_3 , e que os pontos fora da caixa e do limite de variabilidade a 7% são os pontos referentes, também, ao NaHCO_3 , que ao contrário das outras soluções, apresenta taxas mais baixas que a base, e não mais altas (ZORDÃO, 2019).

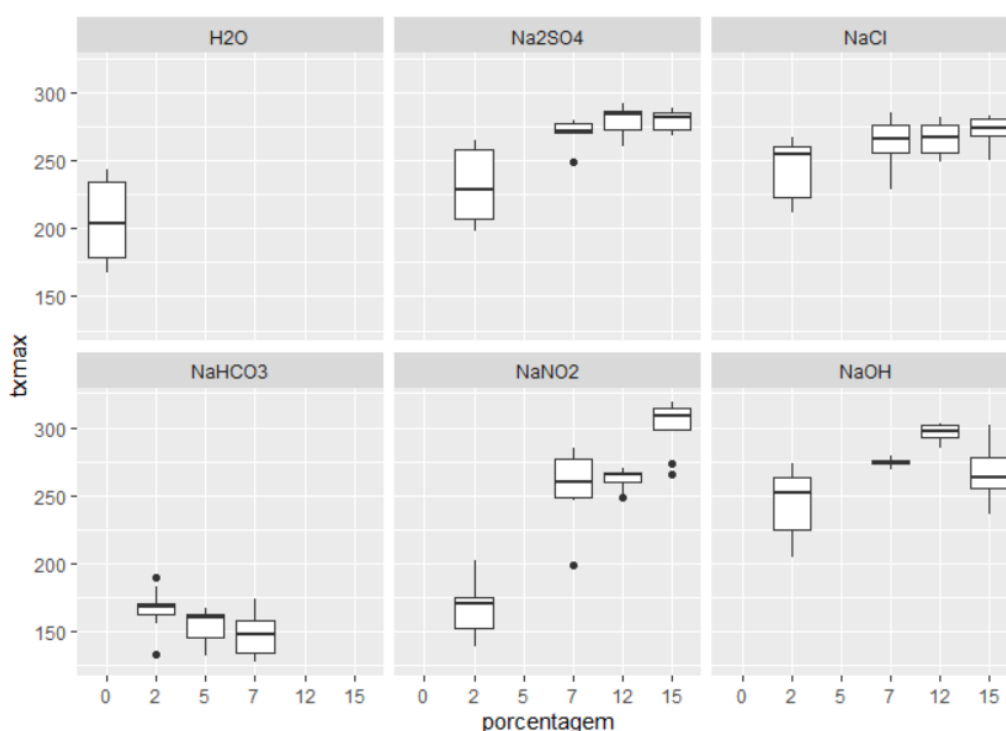
Figura 7: diagrama de caixa da taxa máxima de resfriamento e a porcentagem do sal



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Para confirmar essas suposições, foram construídos gráficos da relação entre a porcentagem e a taxa máxima de resfriamento para cada sal, presentes na Figura 8. Pela figura, confirma-se que os únicos pontos a 5% são referentes ao bicarbonato de sódio, o que explica o comportamento fora do padrão. Além disso, é possível analisar um outro efeito em relação a esse sal: enquanto a tendência em relação a taxa máxima de resfriamento parece ser diretamente proporcional com a porcentagem do sal, para esse em específico a relação parece ser inversa, ou seja, quanto mais desse sal temos solubilizado, menor é a taxa máxima de resfriamento média obtida no experimento.

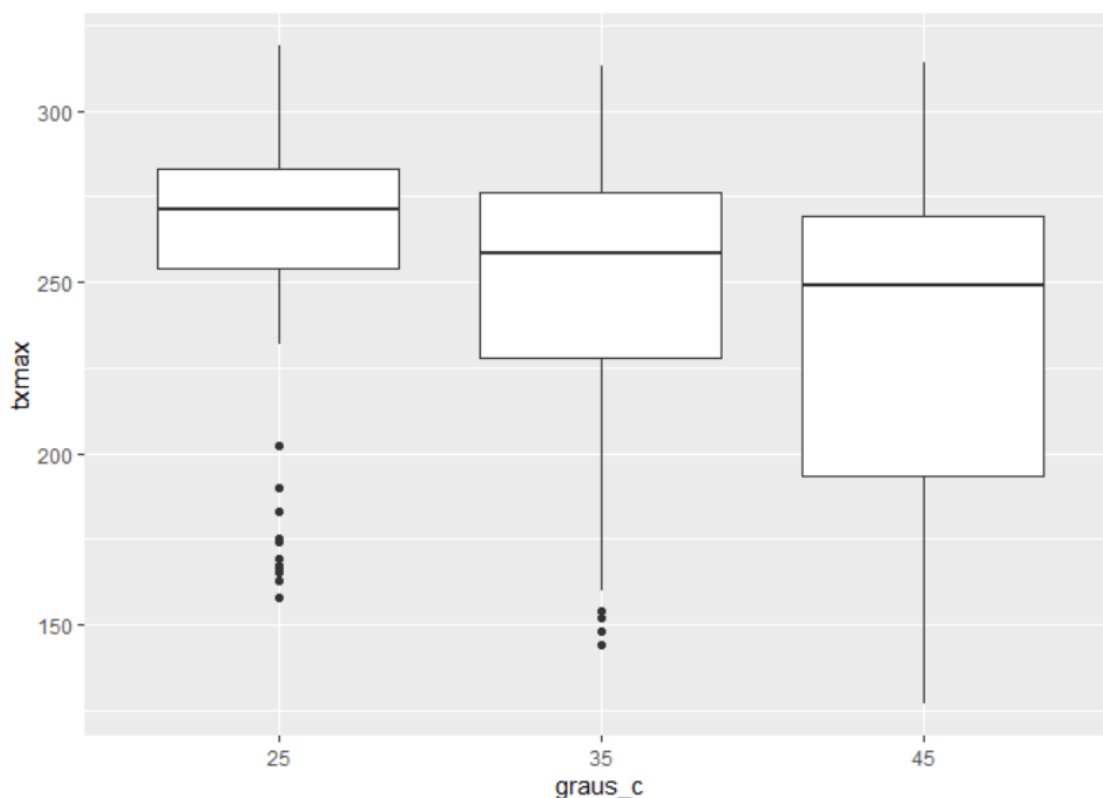
Figura 8: diagrama de caixa da taxa máxima de resfriamento, o tipo de sal e a porcentagem



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Outra variável que deve ser analisada no modelo é a temperatura do banho. A Figura 9 mostra o diagrama de caixa relacionando a taxa máxima de resfriamento e a temperatura do banho.

Figura 9: diagrama de caixa da taxa máxima de resfriamento e a temperatura do banho

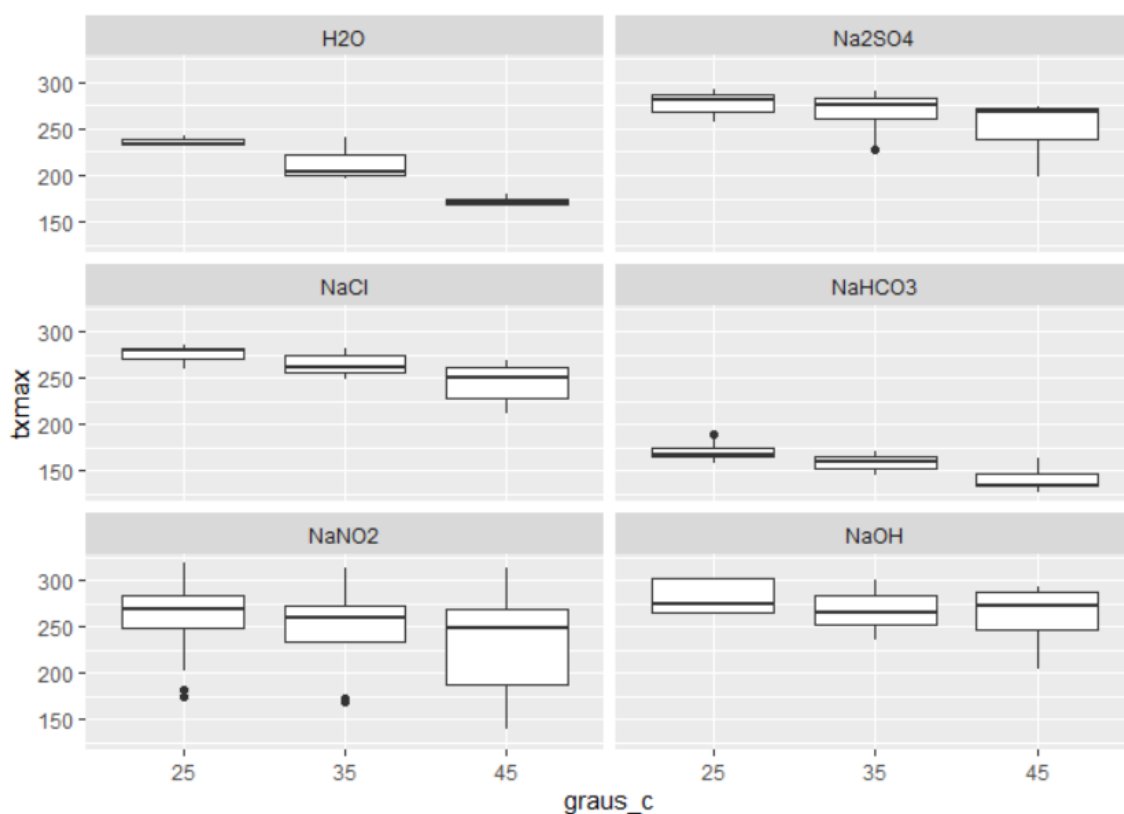


Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Apesar de alguns *outliers*, a variabilidade a 25 graus parece ser a menor, e parece existir uma tendência de diminuição da taxa máxima com o aumento da temperatura do banho. No entanto, como a variabilidade é muito alta, não se pode afirmar de forma definitiva que a temperatura diminui a taxa máxima de resfriamento, quando analisada sozinha.

A Figura 10 traz o efeito da temperatura do banho para cada um dos sais. Com essa informação adicional, e com variabilidades menores, pode-se afirmar que existe uma tendência de diminuição na taxa máxima de resfriamento com o aumento da temperatura do banho, independente do sal. Aqui, por exemplo, o efeito não difere para o NaHCO_3 , como visto anteriormente em relação à porcentagem do sal.

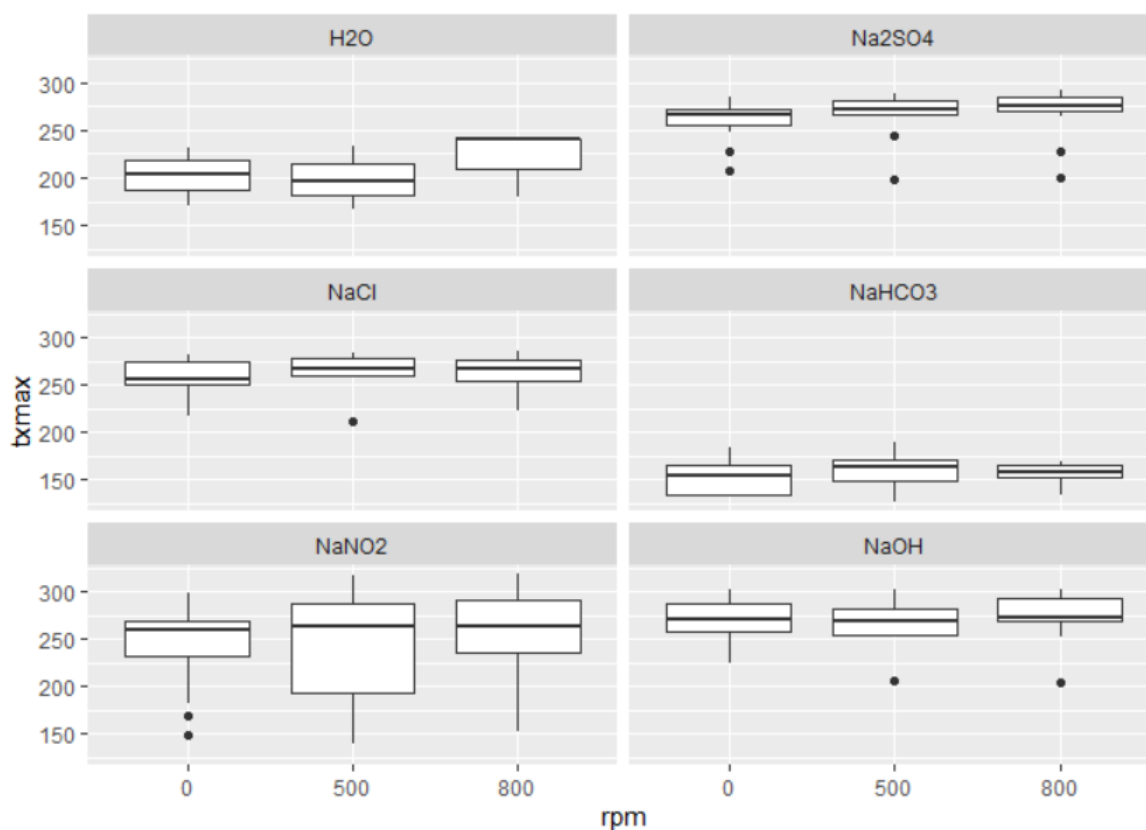
Figura 10: diagrama de caixa da taxa máxima de resfriamento, o tipo de sal e a temperatura do banho



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Finalizando o segmento de estatística descritiva bivariada, a variável rotação (rpm) é analisada em relação à taxa máxima de resfriamento. A variabilidade de taxas para essa variável preditora é muito grande, então, foi apresentado somente o resultado com os diferentes tipos de sal, na Figura 11. Mesmo com essas duas variáveis, não é possível afirmar que existe uma influência, porque existem tanto tendências de aumento quanto de diminuições na taxa.

Figura 11: diagrama de caixa da taxa máxima de resfriamento, o tipo de sal e a rotação

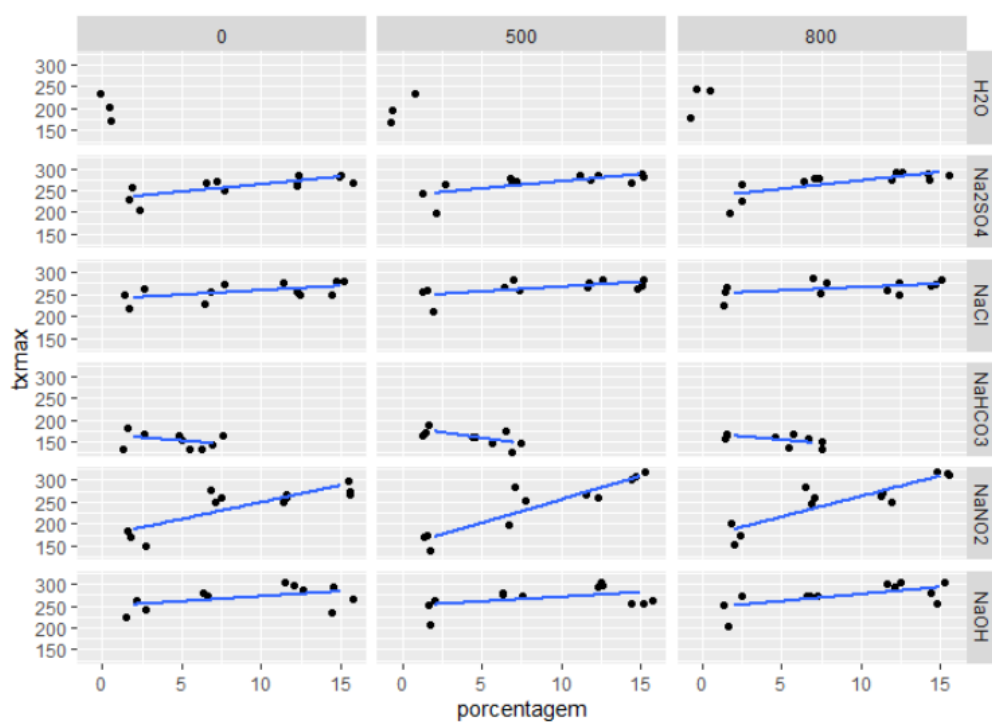


Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Finalmente, foram plotados os gráficos levando em consideração 3 variáveis. Por apresentarem os efeitos mais significativos aparentes na taxa, foram mantidos o tipo de sal e a porcentagem do sal, alterando a terceira variável entre a rotação e a temperatura do banho. Esse resultado é apresentado nas Figuras 12 e 13, respectivamente.

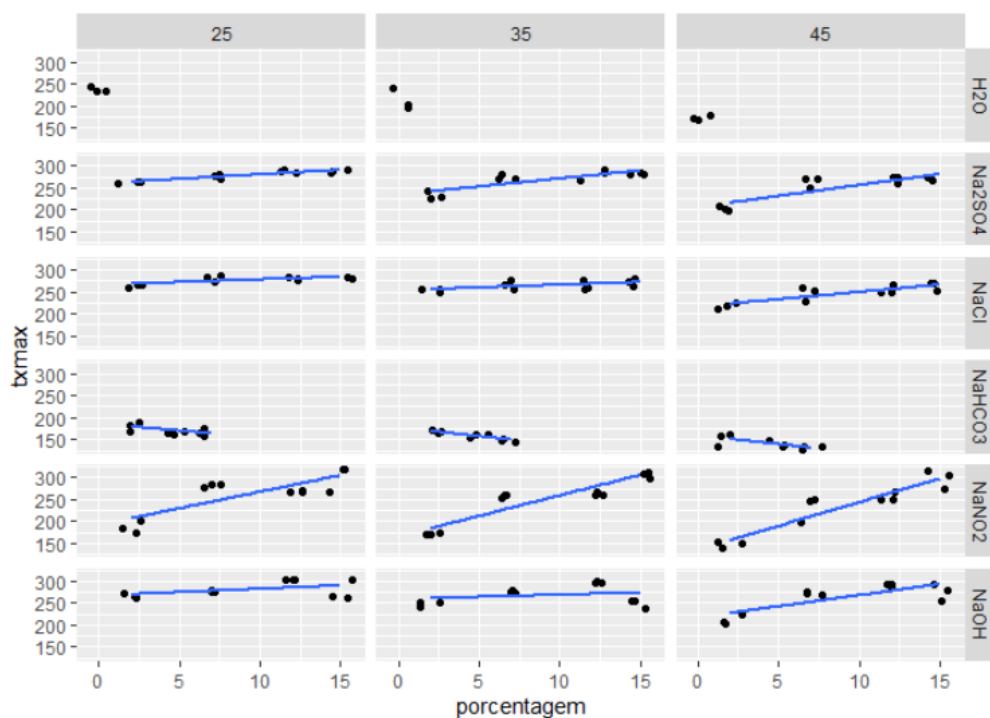
Estudar a influência de cada um desses efeitos na taxa máxima de resfriamento, somente com a leitura e visualização dos dados não é prático nem confiável, pois são muitos fatores a serem considerados, muitas inferências com a literatura e poucas ferramentas que permitem previsibilidade de resultados. Por isso, são construídos modelos lineares como a regressão linear para modelar o banco de dados e facilitar as análises.

Figura 12: linhas médias relacionando taxa máxima, tipo de sal, porcentagem e rotação



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Figura 13: linhas médias relacionando taxa máxima, tipo de sal, porcentagem e temperatura do banho



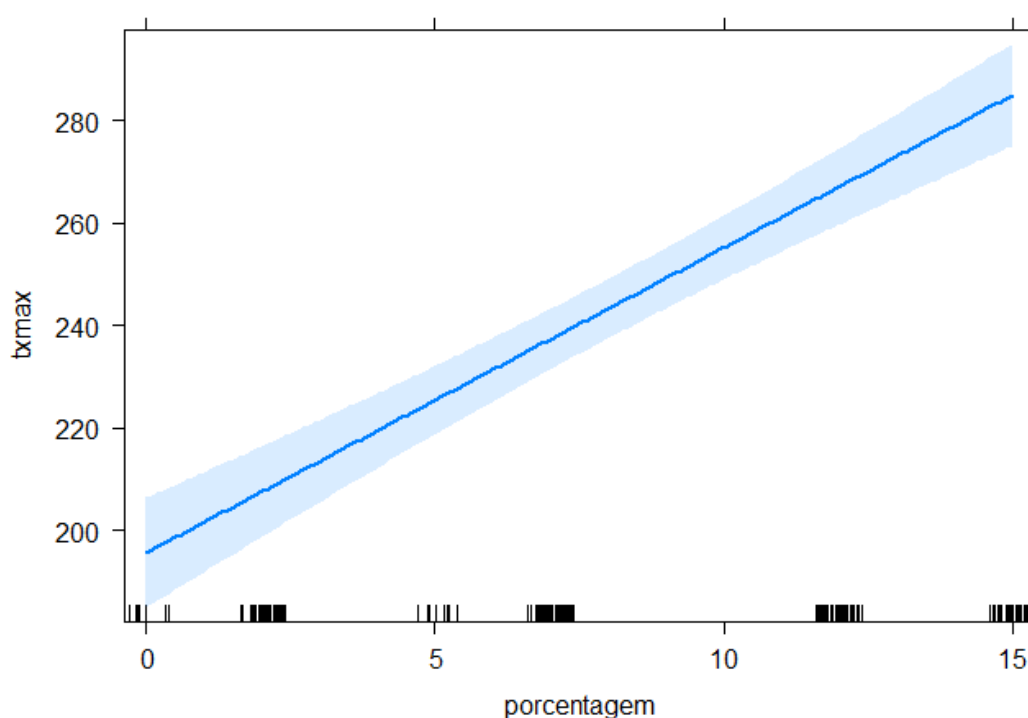
Fonte: Elaborado pelo próprio autor

5.2 Regressão linear simples

A força motriz da construção dos modelos é encontrar a resposta para simples perguntas que podem ser feitas quando se analisa o banco de dados. Os modelos de regressão linear simples consideram apenas um coeficiente na explicação da variável resposta, e nesse caso foram construídos 4 modelos para esse tipo de regressão.

O modelo 1 procura responder se é possível estudar o efeito médio da concentração do sal na taxa de resfriamento máxima. A Figura 14 traz a relação entre a porcentagem e a taxa máxima de resfriamento.

Figura 14: taxa máxima de resfriamento e porcentagem do sal (modelo 1)



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Nesse gráfico é apresentada a linha de regressão na forma de uma linha azul. A faixa em azul-claro é o intervalo de confiança do modelo, e as faixas no eixo x são as observações fornecidas pelo banco de dados.

A leitura estatística do modelo é apresentada na Figura 15.

Figura 15: resultado do modelo 1

```
## Call: lm(formula = txmax ~ porcentagem, data = db)
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 195.6395     5.4188   36.10  <2e-16 ***
## porcentagem   5.9556     0.5767   10.33  <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard deviation: 39.37 on 178 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.3747
## F-statistic: 106.7 on 1 and 178 DF,  p-value: < 2.2e-16
##      AIC      BIC
## 1837.06 1846.63
```

Fonte: elaborado pelo próprio autor

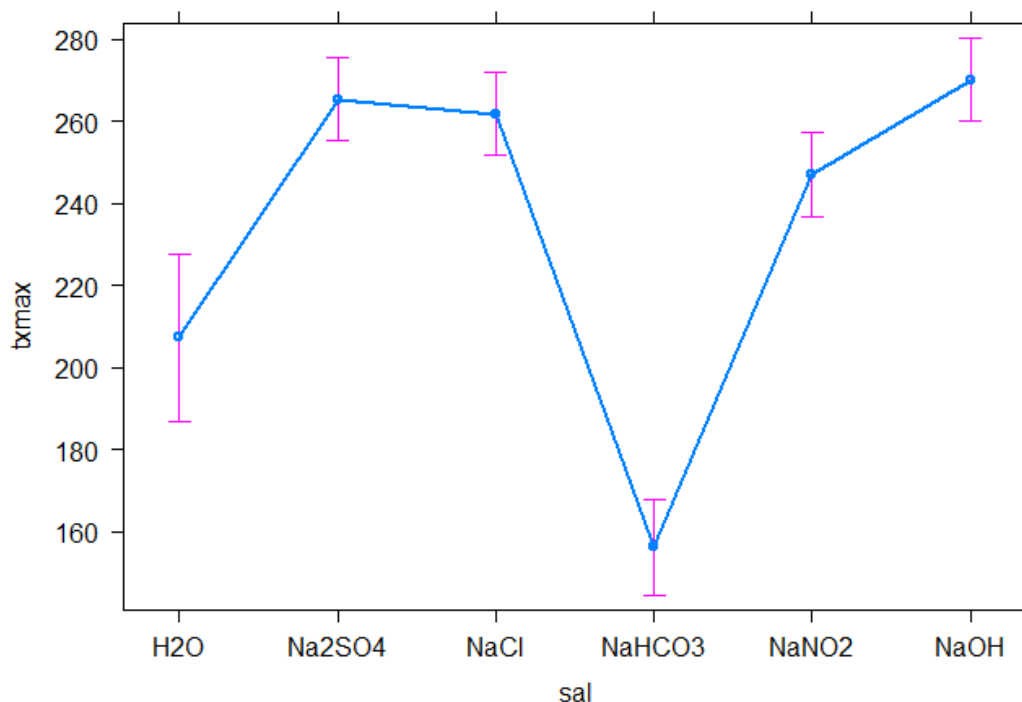
Para todos os casos, incluindo o modelo 1, podemos ler os valores que refletem se o modelo é estatisticamente significativo ou não. Esse conceito se repete ao longo da apresentação dos modelos e seu conceito foi apresentado na revisão bibliográfica, seção 3.6.

Para esse modelo, apesar do intercepto e da porcentagem possuírem significância estatística, o R^2 encontrado é de 37%, o que é considerado baixo para os padrões e insuficiente para explicar a taxa máxima de resfriamento.

O modelo 2 utiliza como variável independente o tipo de sal. Importante notar que, diferente da porcentagem, o tipo de sal é uma variável categórica (e não contínua), mas que pode ser utilizada em uma regressão linear, de forma que cada categoria possui um coeficiente diferente na construção da equação de regressão. O mesmo vale para a rotação e a temperatura do banho, consideradas variáveis categóricas na construção dos modelos.

A Figura 16 representa a relação entre a taxa máxima de resfriamento e o tipo de sal. Para esse modelo, o R^2 é de 62% e todas as variáveis são estatisticamente significativas. Com esse resultado é possível inferir que, mesmo que o tipo de sal não explique toda a variabilidade do banco isoladamente, é definitivamente uma variável que, quando alterada, irá alterar os resultados da taxa máxima de resfriamento.

Figura 16: taxa máxima de resfriamento e tipo de sal (modelo 2)



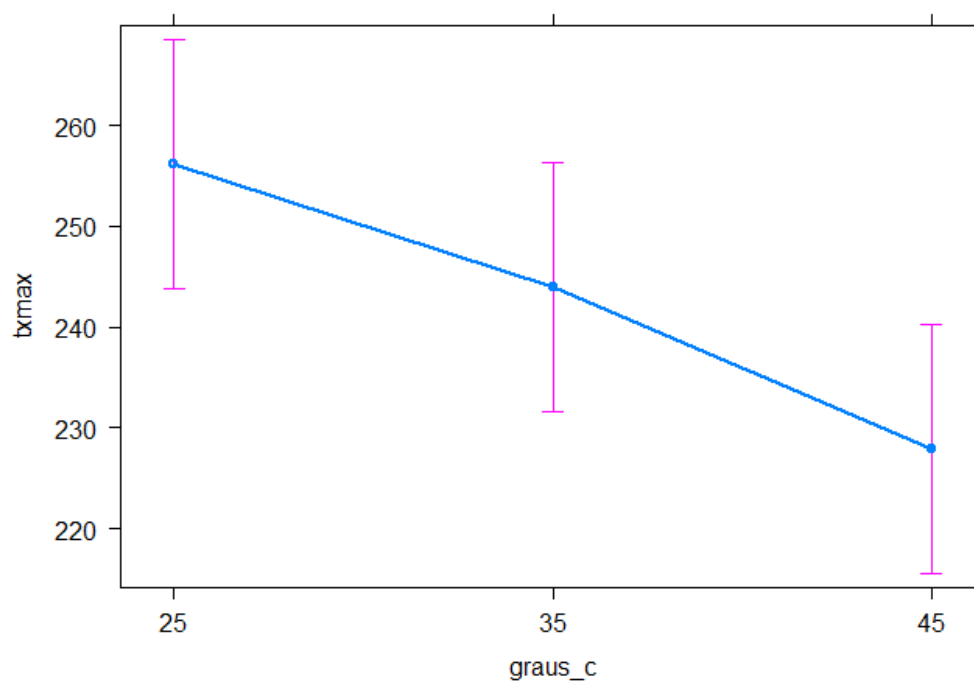
Fonte: elaborado pelo próprio autor

Nesse modelo, o coeficiente que apresenta a maior taxa máxima de resfriamento é o NaOH, e a menor, o NaHCO₃, o que vai de encontro com a análise descritiva bivariada feita anteriormente. Apesar deste modelo ter um R² maior que o anterior, o valor de desvio padrão para os coeficientes é alto (variando entre $\pm 10,37$ e $\pm 11,97$) e boa parte deles está no mesmo intervalo de taxa máxima.

O modelo 3 apresenta um R² de 5% e foi construído com a variável temperatura do banho, e o modelo 4 possui um R² de 0,4% e foi construído com a variável rotação. Ambos modelos apresentam resultados ruins e possuem pouca ou nenhuma variável estatisticamente significativa. Isso significa que, isoladamente, essas variáveis não são suficientes para explicar a variabilidade do banco de dados, o que é de se esperar, pois os fatores que mais influenciam nas taxas máximas de resfriamento em meios de soluções iônicas são o tipo de sal e a respectiva porcentagem do mesmo. A temperatura do banho e a rotação podem, no entanto, influenciar em alguns fatores que não são objeto de estudo dessa análise estatística e trazerem benefícios ao tratamento térmico de têmpera, como já descrito por outros autores (TOTTEN; CANALE, 2005).

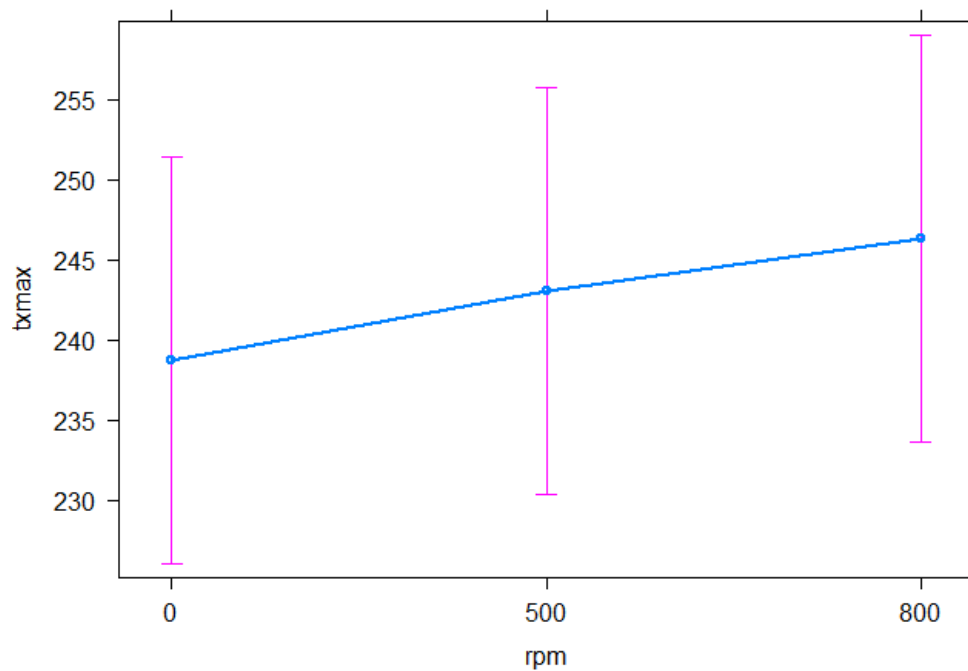
As Figuras 17 e 18 trazem os modelos 3 e 4 e os resultados obtidos de forma gráfica, respectivamente.

Figura 17: relação entre taxa máxima de resfriamento e temperatura do banho (modelo 3)



Fonte: elaborado pelo próprio autor

Figura 18: relação entre taxa máxima de resfriamento e a rotação do banho (modelo 4)



Fonte: elaborado pelo próprio autor

A regressão linear simples realizada mostra que, dentre as quatro variáveis utilizadas para construção dos modelos, somente a porcentagem e o tipo de sal tem uma forte influência

no modelo e explicam a variabilidade, fato verificado nos modelos 1 e 2. No entanto, quando os fatores são estudados em conjunto, a rotação e a temperatura do banho podem, também, serem estatisticamente significativos, e os próximos modelos apresentados mostram essas combinações e os respectivos resultados.

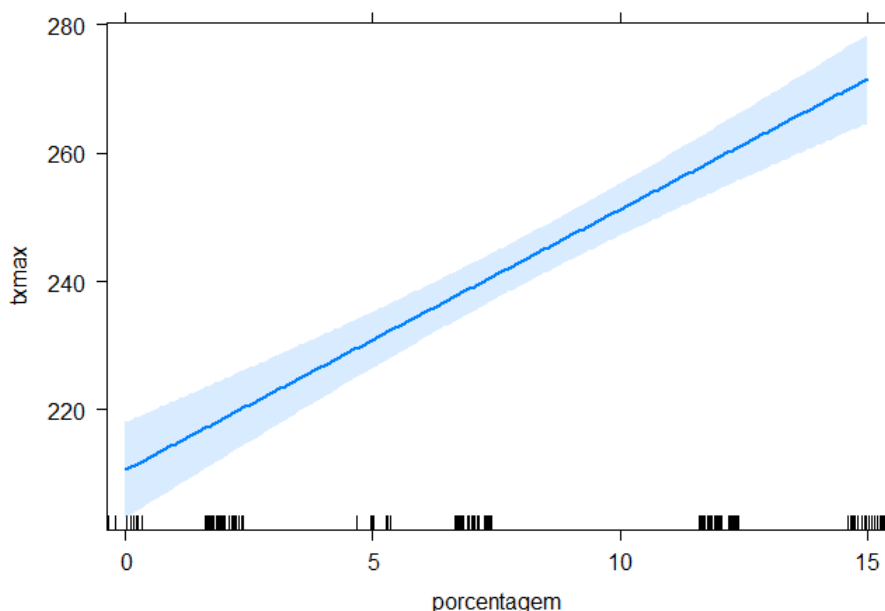
5.3 Regressão linear múltipla – coeficientes parciais

Em uma regressão linear múltipla, os coeficientes são considerados parciais, isto é, cada coeficiente representa o efeito na variável resposta mantendo constante o valor das outras variáveis explicativas. Diferente da regressão linear simples, onde o efeito de outras variáveis é ignorado, a regressão linear múltipla consegue construir modelos que explicam melhor a variabilidade de dados por considerar tanto o efeito das variáveis quanto a combinação entre elas.

Seguindo as mesmas premissas para os modelos anteriores, foram construídos modelos múltiplos para explicar a variabilidade dos dados e a relação entre as variáveis.

O modelo 5 apresenta um R^2 de 75%, e mostra que o efeito parcial da concentração de sal na temperatura máxima de resfriamento é de 4 graus a cada 1%. A Figura 19 mostra o efeito preditor da porcentagem na taxa máxima e a Figura 20 mostra o preditor do sal na taxa máxima.

Figura 19: efeito preditor da porcentagem na taxa máxima (modelo 5)

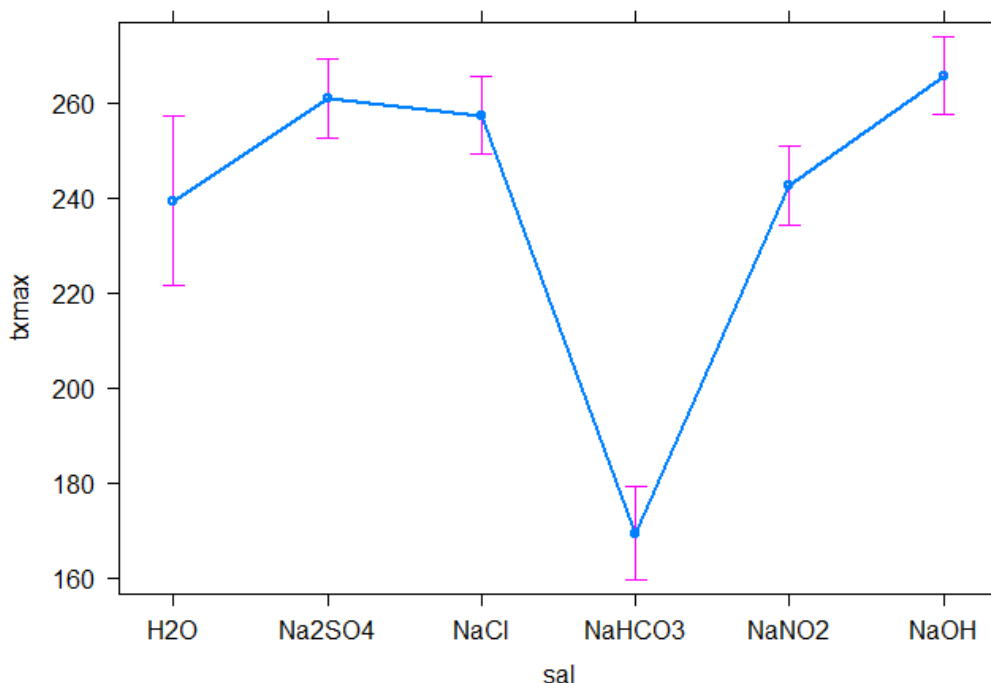


Fonte: elaborado pelo próprio autor

Podemos interpretar o coeficiente do tipo de sal de forma que, mantida a porcentagem do sal, a taxa máxima de resfriamento média para cada sal varia de acordo com o gráfico da

Figura 20. Da mesma maneira, a Figura 19 da porcentagem mostra, para um mesmo tipo de sal, a predição do efeito na taxa máxima de resfriamento média.

Figura 20: gráfico da relação entre o tipo de sal e a taxa máxima de resfriamento (modelo 6)

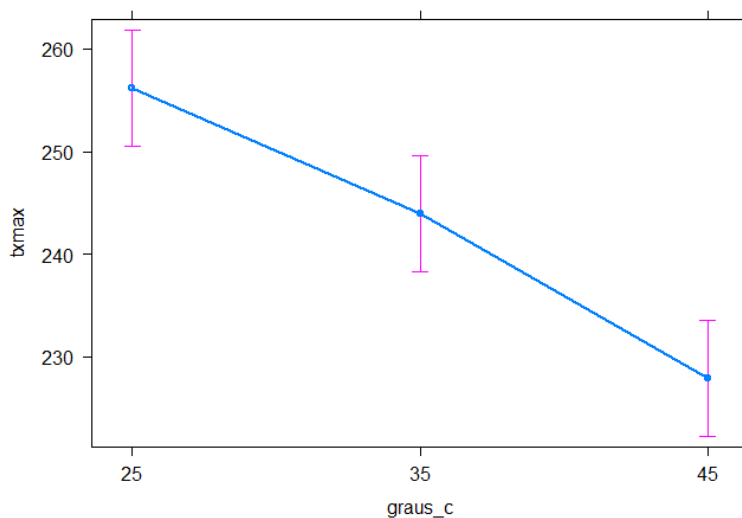


Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Esse resultado do efeito preditor da porcentagem do sal é esperado para uma solução iônica em geral, porque, quanto maior a concentração do soluto, mais fina será a camada de vapor e mais facilmente rompida, elevando as taxas de resfriamento. Consequentemente, podemos afirmar que o fluido pode ser recomendado em casos onde uma severidade de temperatura maior é necessária (ARAI; FURUYA, 2011).

O modelo 6, em relação ao modelo 5, adiciona aos coeficientes a temperatura do banho, e tem um poder explicativo, R^2 de aproximadamente 81%. O resultado dos efeitos preditores da porcentagem e do tipo de sal são muito similares graficamente ao modelo 5, apesar de existirem diferenças nos modelos. A Figura 21 mostra o efeito da temperatura do banho na taxa máxima de resfriamento média. Podemos inferir que os casos onde as temperaturas são 35 e 45 possuem, em média, taxas de resfriamento mais baixas. Isso pode ser explicada por uma maior estabilidade da camada de vapor formada, o que vai de encontro com os resultados relatados por outros autores.

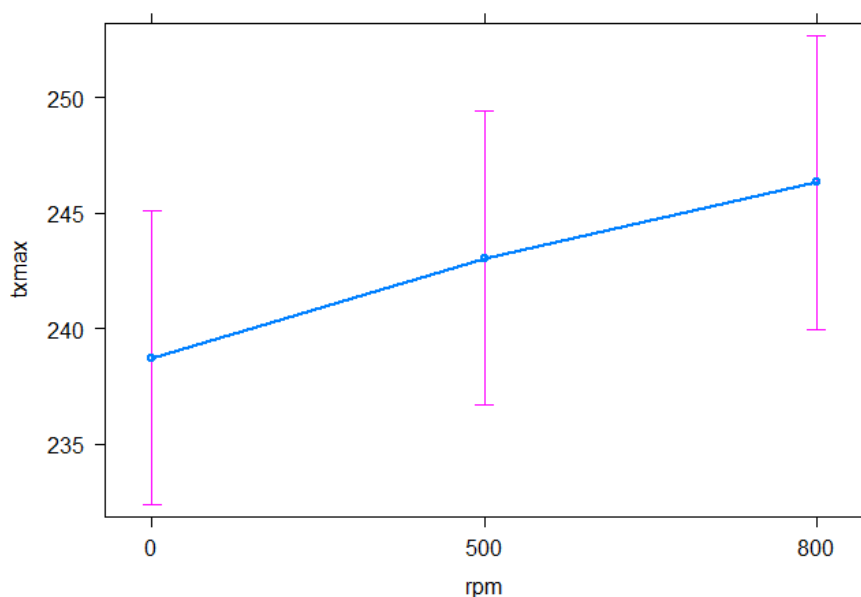
Figura 21: gráfico da relação entre a temperatura do banho e a taxa máxima de resfriamento (modelo 6)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

O modelo 7 apresenta R^2 de 75% e foi construído utilizando como coeficientes a porcentagem, o tipo de sal e a rotação (rpm). Quando comparado com o modelo 5, não existem vantagens em considerar a rotação, porque a variabilidade com esse coeficiente é muito alta, tornando a variável estatisticamente não significativas, e ele, sozinho, não consegue explicar satisfatoriamente a taxa máxima de resfriamento média. Essas classes, segundo o modelo, não são estatisticamente significativas e, portanto, não aumentam o poder explicativo do modelo. A Figura 22 traz de forma gráfica esses resultados obtidos com o modelo.

Figura 22: gráfico da relação entre a rotação e a taxa máxima de resfriamento (modelo 7)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Esse resultado é esperado, pois o sal e sua concentração são muito mais importantes na determinação do meio de têmpera do que a rotação. Isto é, sozinha, a rotação não é capaz de prever qual será o resultado das variáveis de saída do experimento (taxa máxima de resfriamento, severidade de têmpera), enquanto é possível fazer inferências utilizando meios com composições diferentes.

O modelo 8 é o modelo mais completo de regressão linear múltipla sem interações em relação aos coeficientes, levando em consideração a concentração e o tipo de sal, a temperatura do banho e a rotação. Apresenta um R^2 de 81%, similar ao modelo 6. Da mesma maneira que no modelo 7, o coeficiente da rotação não é estatisticamente significativo, pois não existe diferença média entre as rotações de 500 a 800 rpm em relação ao banho sem agitação. Para os resultados finais do modelo, a rotação foi mantida como um dos coeficientes para representar os resultados de maneira gráfica de maneira completa e também para construção do aplicativo, após a modelagem estatística. A Figura 23 traz a leitura estatística do modelo.

Figura 23: resultado do modelo 8

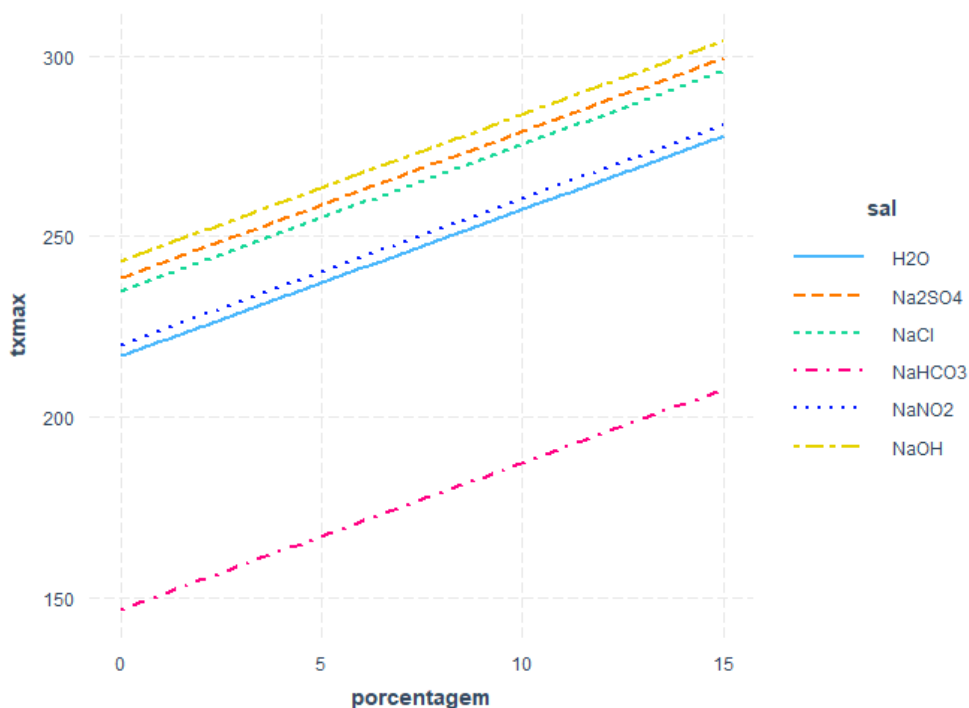
```
## Call: lm(formula = txmax ~ porcentagem + sal + graus_c + rpm, data = db)
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  216.872      8.065   26.892 < 2e-16 ***
## porcentagem    4.057      0.366   11.085 < 2e-16 ***
## salNa2SO4     21.602      8.865    2.437  0.01586 *
## salNaCl       18.019      8.865    2.032  0.04367 *
## salNaHCO3    -70.042      8.671   -8.078  1.19e-13 ***
## salNaNO2      3.130      8.865    0.353  0.72450
## salNaOH      26.324      8.865    2.969  0.00342 **
## graus_c35    -12.217      4.032   -3.030  0.00283 **
## graus_c45    -28.317      4.032   -7.023  5.08e-11 ***
## rpm500        4.317      4.032    1.071  0.28590
## rpm800        7.600      4.032    1.885  0.06117 .
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard deviation: 22.09 on 169 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.8131
## F-statistic: 73.54 on 10 and 169 DF,  p-value: < 2.2e-16
##      AIC      BIC
## 1637.64 1675.95
```

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

As variáveis com maior significância são a porcentagem, salNaHCO3 e graus_c45, com confiabilidade de até 0,1%. Pode-se afirmar que, em relação à base, que é a água, essas variáveis têm uma alta significância em alterar a taxa máxima de resfriamento. A variável salNaNO2 não possui significância no modelo 8, indicando que, em relação à base utilizada (H₂O), não existe, isoladamente, uma diferença estatística. Isso se dá pelo alto desvio padrão dos resultados encontrados utilizando esse sal, o que também foi analisado na seção de estatística descritiva.

As Figuras 24, 25 e 26 mostram, respectivamente, os gráficos dos diferentes tipos de sal, da temperatura do banho e da rotação com o aumento da porcentagem do sal.

Figura 24: tipos de sal e o efeito com o aumento da porcentagem

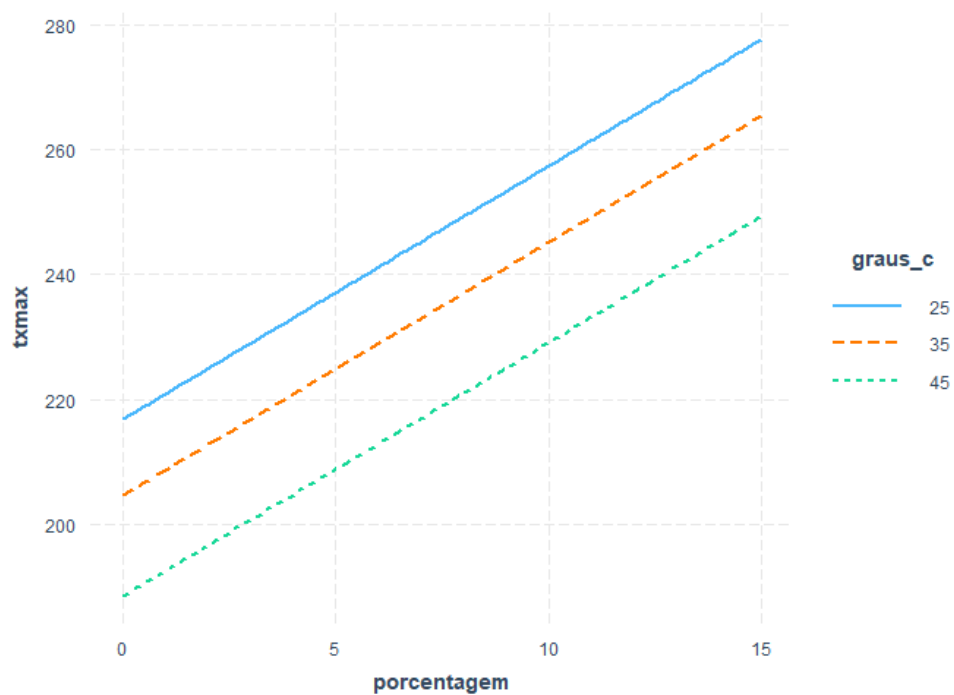


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Mesmo incluindo a rotação como variável, considerando, portanto, todas as variáveis preditoras descritas no procedimento experimental, o modelo 8 não apresenta vantagens em relação ao modelo 6. Segundo o modelo, não há diferença média na taxa máxima de resfriamento entre as rotações de 500 e 800 rpm com relação à 0 rpm.

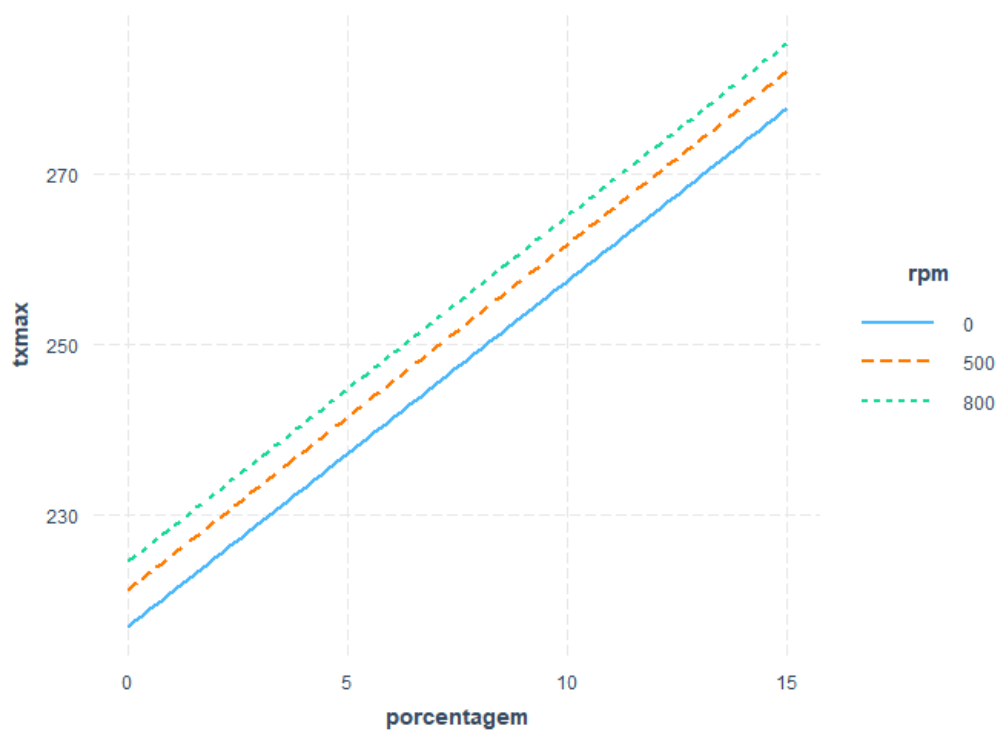
Além disso, como verificado na análise descritiva bivariada, o NaHCO_3 como meio de têmpera possui um efeito inversamente proporcional na taxa máxima de resfriamento, o que não é refletido no gráfico. Apesar de considerar todas as variáveis descritas no procedimento experimental, o modelo não considera as interações entre elas. O reflexo disso é que o coeficiente angular das retas dos efeitos preditores é o mesmo, independente do sal, da rotação ou do banho, o que não reflete alguns comportamentos já verificados na análise descritiva bivariada.

Figura 25: temperatura do banho e o efeito com o aumento da porcentagem



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 26: rotação e o efeito com o aumento da porcentagem



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

5.4 Regressão linear múltipla – com interações

O modelo 9 foi construído utilizando como base o sal NaSO₄ e considera as interações que se mostraram mais significativas durante a construção do modelo, que são as relações entre a porcentagem do sal e a temperatura do banho, e a porcentagem do sal com o tipo de sal. O resultado completo do modelo 9 é apresentado na Figura 27.

Figura 27: resultado do modelo 9

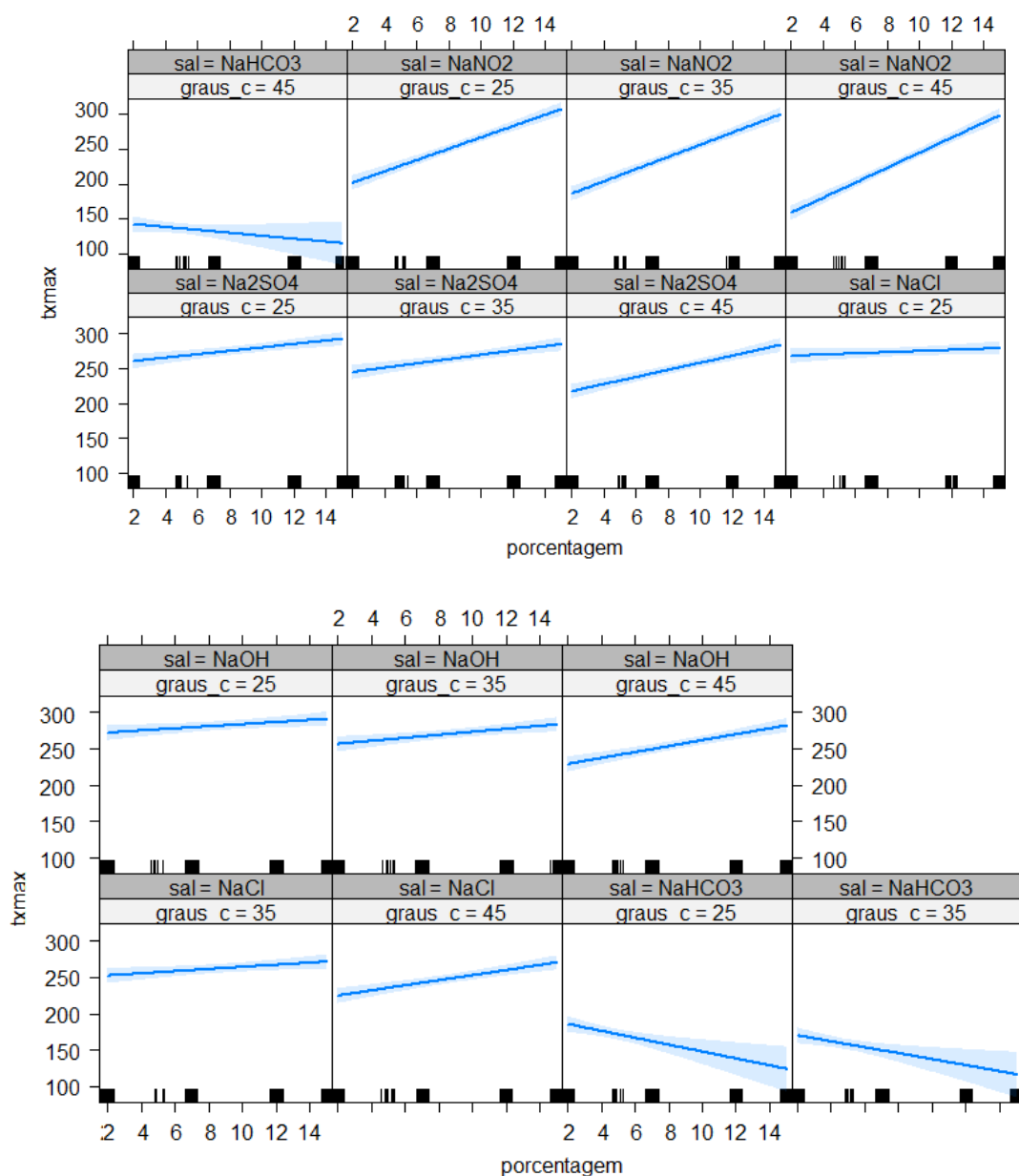
```
## Call: lm(formula = txmax ~ porcentagem + sal + graus_c + rpm + porcentagem *
##       graus_c + sal * porcentagem, data = db_9)
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)      251.3996      6.5552   38.351 < 2e-16 ***
## porcentagem         2.4528      0.6282    3.905 0.00014 ***
## salNaCl           10.9167      7.6209    1.432 0.15403
## salNaHCO3        -60.2029      9.1874   -6.553 7.91e-10 ***
## salNaNO2         -69.4824      7.6209   -9.117 3.78e-16 ***
## salNaOH           13.8447      7.6209    1.817 0.07120 .
## graus_c35        -16.8464      5.7684   -2.920 0.00402 **
## graus_c45        -48.4979      5.7684   -8.408 2.55e-14 ***
## rpm500             4.7193      2.9186    1.617 0.10792
## rpm800             7.0351      2.9186    2.410 0.01711 *
## porcentagem:graus_c35 0.6250      0.5983    1.045 0.29785
## porcentagem:graus_c45 2.6527      0.5983    4.434 1.75e-05 ***
## porcentagem:salNaCl -1.6111      0.7420   -2.171 0.03142 *
## porcentagem:salNaHCO3 -7.2120      1.5508   -4.651 7.04e-06 ***
## porcentagem:salNaNO2  5.6678      0.7420    7.639 2.12e-12 ***
## porcentagem:salNaOH  -1.0136      0.7420   -1.366 0.17388
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard deviation: 15.58 on 155 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9108
## F-statistic: 105.5 on 15 and 155 DF,  p-value: < 2.2e-16
##      AIC      BIC
## 1441.63 1495.04
```

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

O modelo 9 apresenta o maior R^2 de todos os modelos construídos, com um poder explicativo de 91%. Possui muitas variáveis que são estatisticamente significativas, como os sais e as interações entre eles, e uma significância nas interações das porcentagens com o banho a 45 graus. Foi o único modelo também que apresentou significância para agitação em 800 rpm, resultado de uma análise mais profunda nas interações.

A Figura 28 mostra o efeito da porcentagem no tipo de sal, para cada temperatura de banho considerada.

Figura 28: gráficos de efeitos preditores categorizados por tipo de sal e temperatura do banho. Eixo x com porcentagem do sal



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

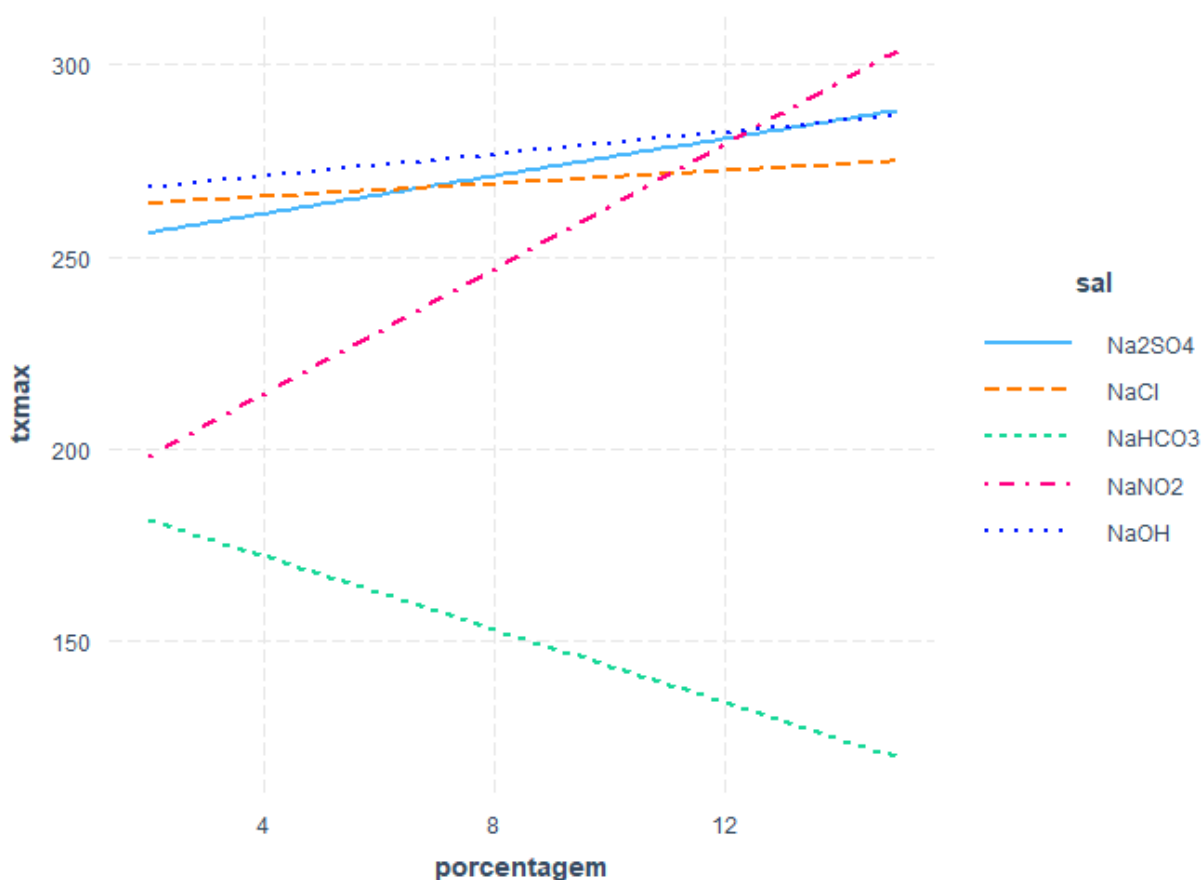
Diferente dos modelos apresentados anteriormente, o modelo 9 apresenta uma variabilidade muito menor nos gráficos, exceto para o NaHCO_3 . Como o mesmo só foi utilizado em concentrações de até 7%, a extrapolação da variável resposta possui uma maior variabilidade para esse sal.

Alguns coeficientes, como salNaOH , $\text{porcentagem:salNaOH}$ e sal NaCl , que apresentaram significância estatística relevante nos modelos anteriores passaram a não mais serem estatisticamente significativos. Isso ocorre porque a base para a construção do modelo 9

é o sal NaSO_4 , e como esses sais apresentam um efeito muito similar em relação à taxa máxima de resfriamento, não há diferença estatística em utilizar um ou outro, segundo o modelo.

A Figura 29 traz as curvas que mostram a interação do tipo de sal com a porcentagem do sal. Diferente do modelo 8, onde o coeficiente angular das retas era o mesmo, nesse gráfico cada sal possui uma predição diferente com o aumento da porcentagem. Como pode ser observado, o efeito inverso do aumento do NaHCO_3 foi corretamente previsto pelo modelo, como observado no banco de dados.

Figura 29: curvas de interação entre tipo de sal e porcentagem do sal e relação com taxa máxima de resfriamento.

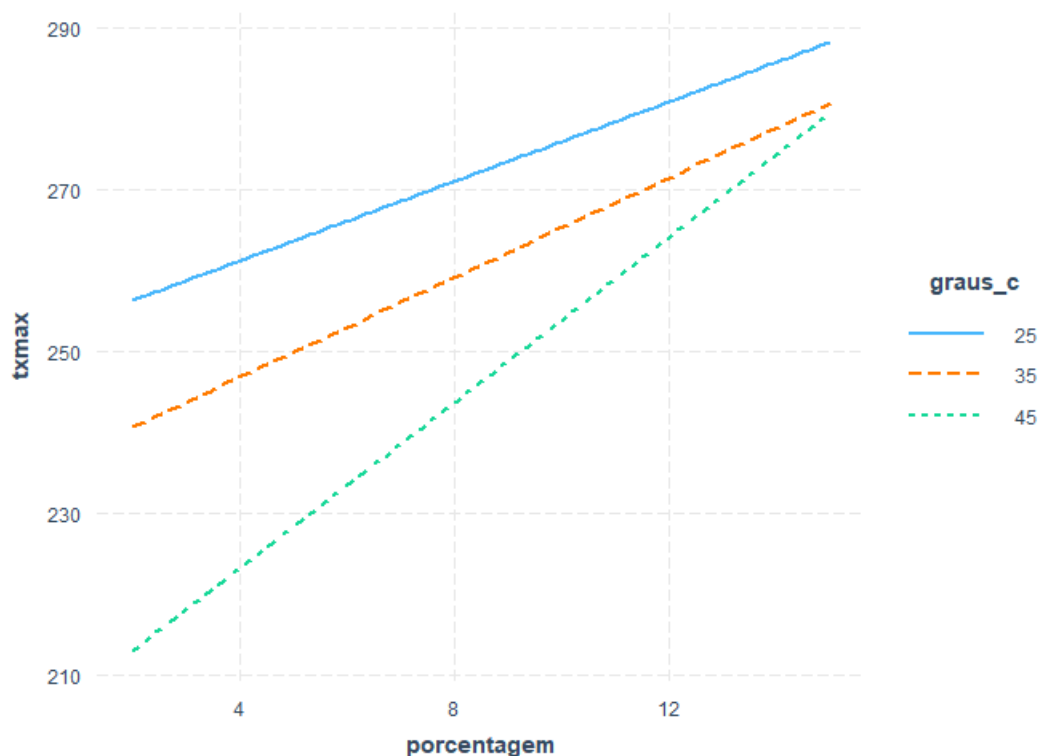


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Outro achado interessante é em relação ao sal NaNO_2 . Esse sal, quando em pequenas porcentagens, apresenta taxas máximas de resfriamento inferiores aos outros (exceto pelo NaHCO_3), mas em torno de 15% é o que apresenta, segundo o modelo, as maiores taxas de resfriamento.

A Figura 30 mostra a interação entre a porcentagem do sal e a temperatura do banho.

Figura 30: curvas de interação entre temperatura do banho e porcentagem do sal e relação com taxa máxima de resfriamento.

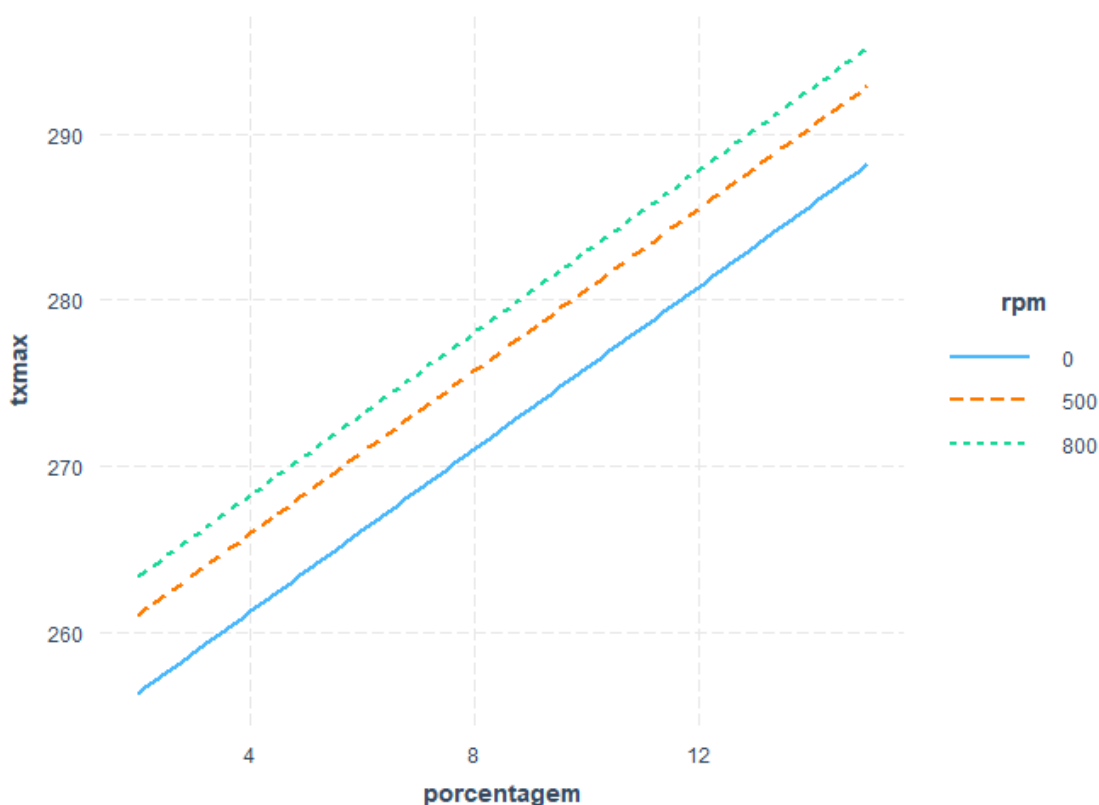


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Como visto em outros modelos, a temperatura do banho parece influenciar de maneira inversa na taxa máxima de resfriamento. Esse fato pode ser explicado pela estabilidade da camada de vapor que é gerada em temperaturas mais altas do banho. Por outro lado, o gráfico das interações mostra que, no caso de a porcentagem do sal ser suficientemente grande, esse efeito da estabilidade da camada parece ser vencido pelos benefícios da utilização da solução aquosa como meio de resfriamento, como esperado. A observação é de que, embora exista uma diferença na taxa média entre as temperaturas de 25 e 45°C, ela é muito menor em 15% do que em 2%, e seguindo o coeficiente angular da reta `graus_c 45`, poderia existir a possibilidade de que o efeito se inverta em porcentagens maiores, como 20%, mas não se pode assumir uma completamente linearidade dos dados fora do limite do banco de dados.

O único efeito que parece não ter relevância estatística como as outras variáveis é a rotação. A Figura 31 mostra as curvas de interação entre a rotação e a porcentagem do sal.

Figura 31: curvas de interação entre rotação e porcentagem do sal.



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Muitos estudos mostram que a agitação tem efeitos no perfil de dureza da peça obtida, na diminuição de distorções e trincas e em obtenção de maiores taxas máximas de resfriamento, aumentando a severidade de têmpera. Estudos conduzidos em óleos de têmpera e água dizem que a agitação é primordial no design de um experimento de têmpera, e recursos computacionais de simulação de extração de calor são comumente utilizados para mostrar os benefícios (TOTTEN; CANALE, 2005). O modelo 9 mostra que essa diferença observada no banco de dados não é significativa. Isso significa que seriam necessários mais pontos para cada caso para aumentar a relevância estatística desse parâmetro. Para entender melhor essa dissonância com alguns estudos da literatura, é primeiro necessário definir o que pode ser considerado uma agitação que tenha efeito no meio de têmpera, e se as rotações de 500 e 800 rpm estão dentro dessa faixa. Como o modelo quantifica o efeito dos coeficientes em relação à taxa máxima de resfriamento, é possível que outros efeitos secundários na peça que não estejam diretamente ligados à taxa máxima de resfriamento sejam afetados pela rotação, produzindo bolhas menores e mais uniformes durante a fase de nucleação de bolhas, elevando taxas de resfriamento por toda a peça e evitando gradientes térmicos. Além disso, dependendo do volume do recipiente utilizado para a têmpera, a agitação promoverá uma circulação do fluido,

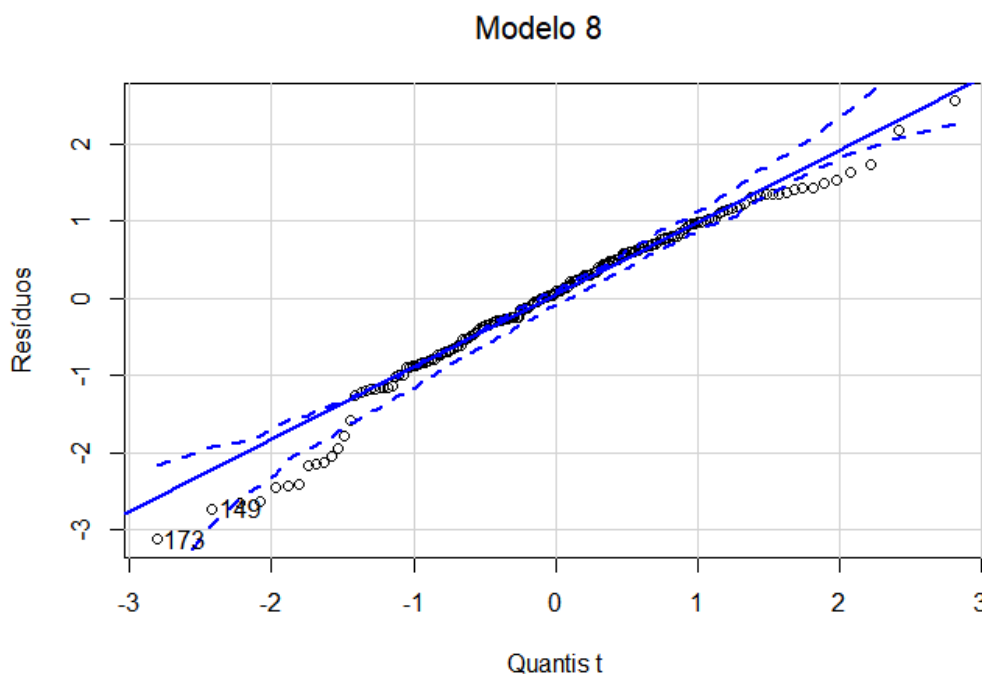
de forma que a peça estará em contato com um fluido em temperaturas mais baixas constantemente, o que também contribui para a dissipação de calor (HASAN, et al, 2018).

5.5 Diagnóstico dos modelos

Além dos efeitos visuais e da significância, o modelo precisa ser diagnosticado para poder ter alguma relevância na explicação dos dados. Por serem os modelos com maior poder explicativo e terem sido utilizados na construção do aplicativo, será apresentado somente o diagnóstico dos modelos 8 e 9.

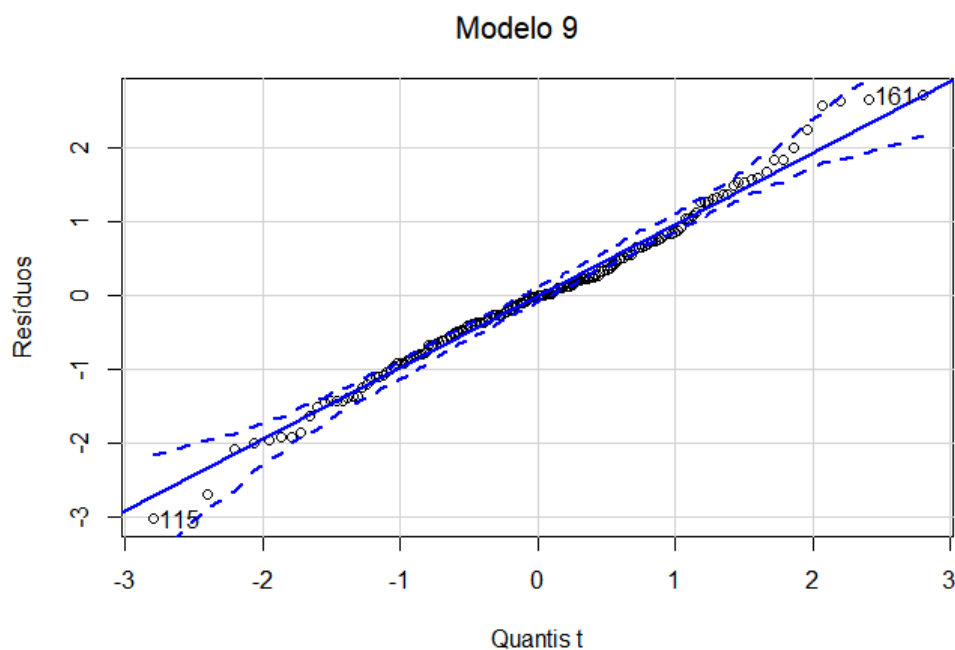
Os primeiros gráficos, apresentados nas Figuras 32 e 33, trazem os quantis (t) e os resíduos dos dois modelos. Essa análise tem como objetivo medir a normalidade, umas das premissas apresentadas para a construção de modelos lineares. Pela figura percebe-se que ambos os modelos possuem valores dentro da faixa, com o modelo 9 apresentando um resultado melhor, o que representa um bom diagnóstico. Em relação aos modelos mais simples, a omissão das variáveis faz com que o modelo fique sobrecarregado com erros e não seja capaz de explicar os dados, não cumprindo o teste da normalidade proposto

Figura 32: diagnóstico do modelo 8 (normalidade, quantis t)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

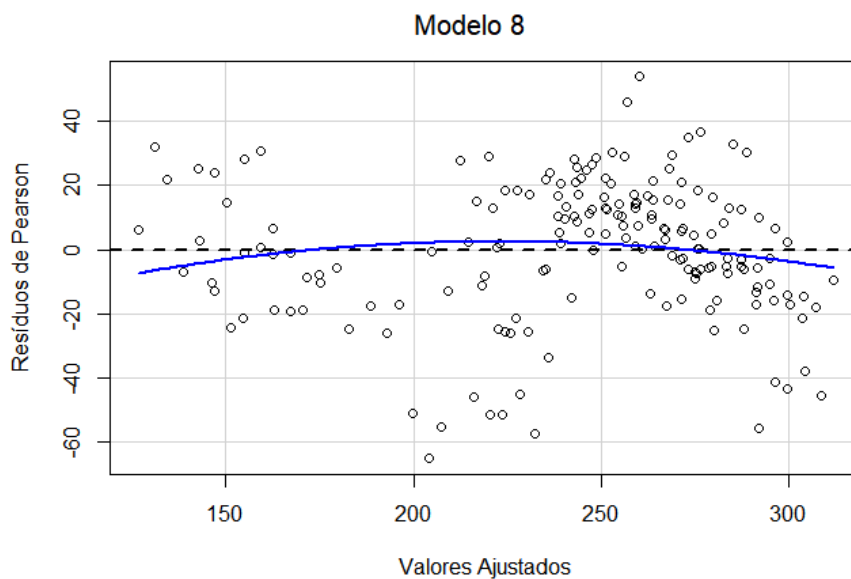
Figura 33: diagnóstico do modelo 9 (normalidade, quantis t)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

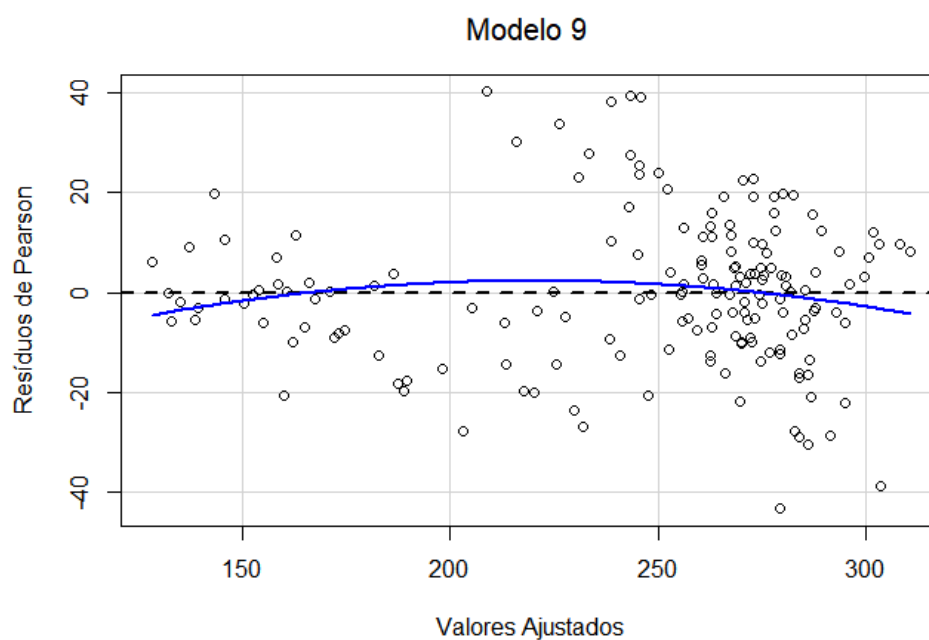
Um dos pontos mais importantes do diagnóstico é o gráfico dos resíduos e dos valores ajustados, também uma verificação inicial dos pressupostos apresentados anteriormente. Os resíduos devem estar dispostos de maneira aleatória ao redor do 0 do gráfico. As Figuras 34 e 35 trazem os gráficos de resíduos para os modelos 8 e 9

Figura 34: gráfico de dispersão dos resíduos (modelo 8).



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Figura 35: gráfico de dispersão dos resíduos (modelo 8).

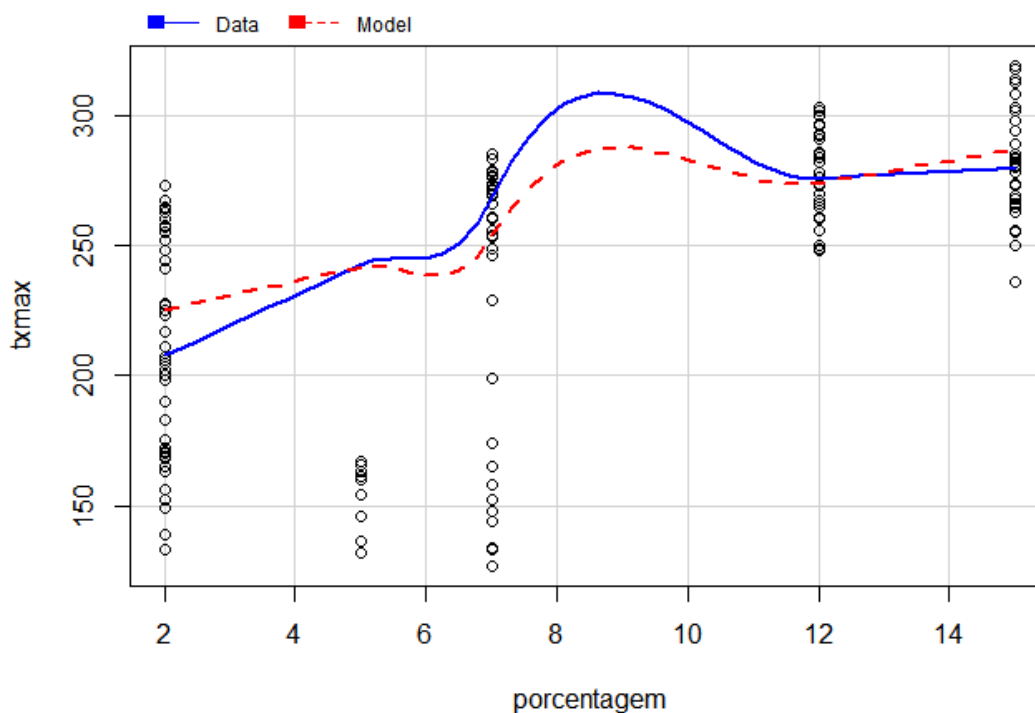


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Em ambos modelos existe um indício de não linearidade, evidenciado pela distância entre a faixa azul e a faixa pontilhada. Para o diagnóstico do modelo, no entanto, é uma não linearidade muito sutil e não invalida os resultados obtidos.

Essa não linearidade pode ser verificada no gráfico de taxa máxima de resfriamento pela porcentagem, desconsiderando o efeito das outras variáveis (relação marginal). A Figura 36 mostra o gráfico descrito para o modelo 9.

Figura 36: gráfico de relação marginal entre txmax e porcentagem

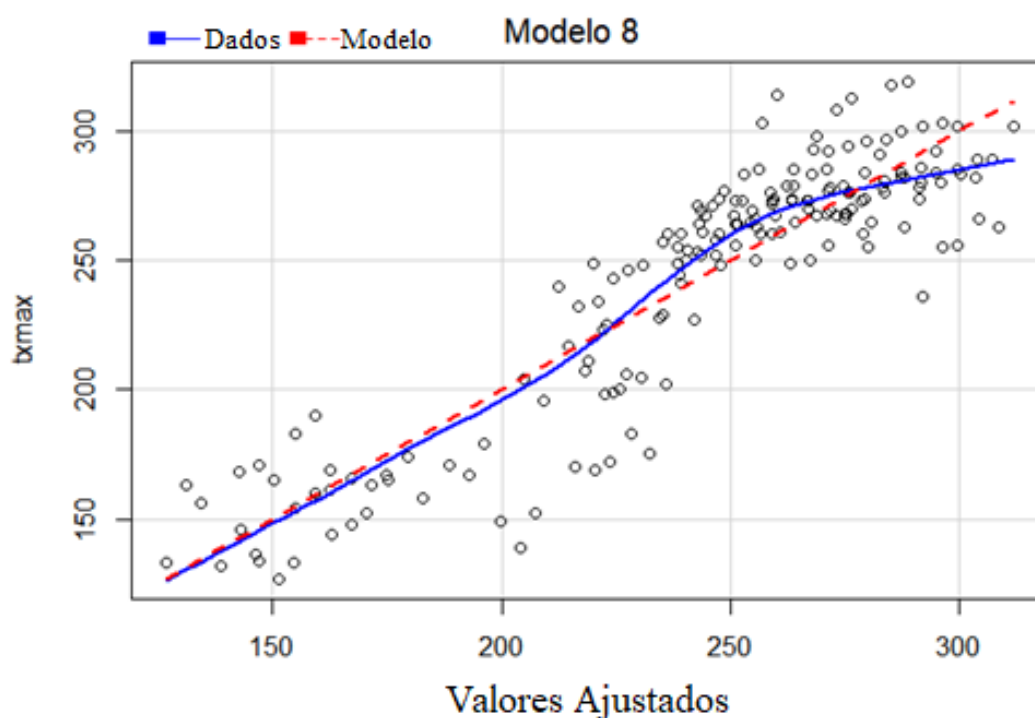


Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Apesar de o banco de dados possuir uma não linearidade clara nas faixas de 5 a 10% de porcentagem, o modelo foi capaz de captar esse efeito, mesmo sendo linear. Isso é um outro indício de que a modelagem foi bem executada e de que o modelo explica a variabilidade dos dados de maneira satisfatória. As figuras 37 e 38 evidenciam essa afirmação, com os gráficos que comparam os modelos e os valores do banco de dados.

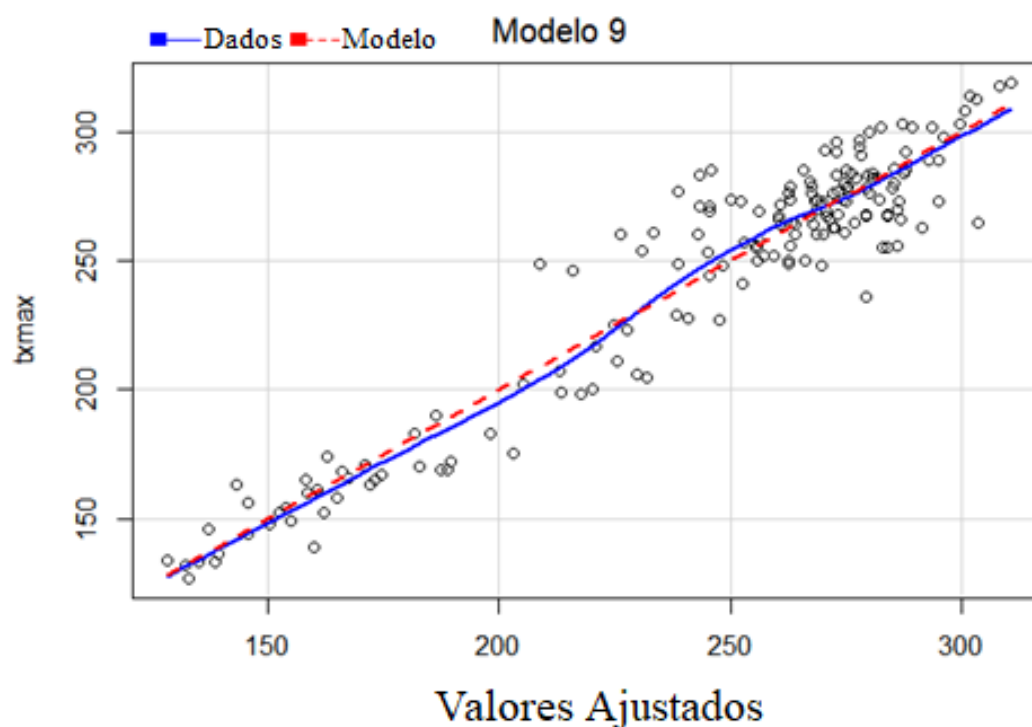
O modelo 8 possui um bom ajuste, mas a falta de interações impede que a linha vermelha, referente ao modelo, esteja sobreposta à linha azul, referente aos dados. Enquanto isso, o modelo 9 apresenta um ajuste quase que perfeito em relação aos dados, mesmo com os indícios de não linearidade já demonstrados. Quando a interação entre os dados é considerada, o ajuste do modelo é mais bem conduzido, porque isso reflete matematicamente um efeito que ocorre durante o experimento. Nesse caso, a interação entre o sal e a porcentagem do sal pode ser o que torna o ajuste do modelo 9 superior ao ajuste do modelo 8.

Figura 37: gráfico de valores ajustados por taxa máxima de resfriamento (modelo 8)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

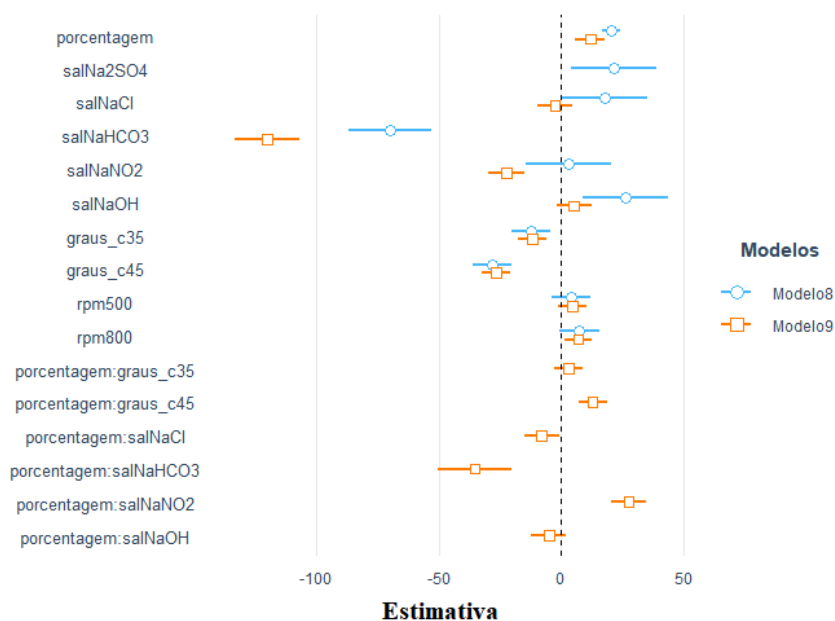
Figura 38: gráfico de valores ajustados por taxa máxima de resfriamento (modelo 9)



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Outra forma de demonstrar a superioridade do modelo 9 é analisar as estimativas para os parâmetros em relação ao modelo 8. A Figura 39 traz o comparativo com essas informações.

Figura 39: comparativo entre modelo 8 e modelo 9



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Os intervalos de confiança do modelo 9 são mais estreitos que os do modelo 8, o que indica uma precisão maior no modelo. Esse resultado também é reflexo da interação entre as variáveis, o que mostra a importância de se fazer essa análise na construção de regressões lineares múltiplas.

A Tabela 2 consolida todos os modelos, com os respectivos R^2 e as variáveis utilizadas para construção deles.

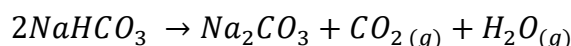
Tabela 2: consolidado dos modelos construídos

Modelo	R^2	Variáveis
1	37,5%	Porcentagem do sal
2	61,8%	Tipos de sais
3	5,5%	Temperaturas do banho
4	0,4%	Rotação
5	75,4%	Porcentagem do sal e tipos de sais
6	80,9%	Porcentagem do sal, tipos de sais, temperatura do banho
7	75,8%	porcentagem do sal, tipos de sais, rotação
8	81,3%	porcentagem do sal, tipos de sais, temperatura do banho, rotação
9	91,1%	porcentagem do sal, tipos de sais, temperatura do banho, rotação, interação entre porcentagem do sal e o tipo do sal, interação entre porcentagem do sal e temperatura do banho

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

5.6 Discussão dos modelos e comparativo

Alguns resultados não são reflexos da realidade e devem ser analisados com ressalvas. Quando analisamos os resultados para o NaHCO_3 , que possui uma solubilidade limitada em água, ele não pode ter o resultado extrapolado para porcentagens muito acima de 7%. Além disso, as taxas máximas de resfriamento média obtidas são inferiores à da água, efeito contrário à adição dos outros sais. Isso pode ser explicado pela decomposição do sal conforme equação química:



A geração de CO_2 na forma de gás estabiliza a camada de vapor durante o resfriamento, diminuindo as taxas de resfriamento e consequentemente diminuindo a severidade do meio (ZORDÃO, 2019).

Alguns estudos mostram que a porcentagem na qual a solução aquosa de NaNO_2 é mais eficaz como meio de resfriamento é em torno de 4%, e que acima dessa porcentagem não existe diferença na extração de calor da peça, com testes até 9%. (LOZANO et al, 2012). Outros estudos mostram uma relação inversa, de que quanto maior a porcentagem do sal, melhor é a extração de calor e mais altas são as taxas de resfriamento máxima, como no banco de dados fornecido para construção da regressão deste trabalho, que utiliza concentrações de até 15% (ZORDÃO, 2019). Quantidades maiores de casos no experimento que gerou o banco de dados pode ser o motivo pelo qual esse efeito aparece em um trabalho e não em outro. Isso indica a possibilidade de se existir um efeito de não linearidade da porcentagem do sal. Esse fato foi apresentado no diagnóstico do modelo 9, que apesar de não sobrepor os dados reais, capta muito bem a não linearidade em uma faixa de 5 a 10% de concentração.

De maneira geral, quanto maior a porcentagem do sal como meio de resfriamento, maiores serão as taxas máximas de resfriamento e maiores serão as extrações de calor da peça. Variáveis como agitação e temperatura do banho influenciam no resultado do meio e consequentemente influenciam nas propriedades mecânicas que a peça temperada terá, mas os efeitos são diminutos quanto comparados à composição do meio. Dito isso, é importante levar em consideração a solubilidade máxima dos sais em meio aquoso e outros efeitos adversos que podem ocorrer durante a têmpera, como é o caso do NaHCO_3 . Outro efeito adverso é na utilização do NaCl , que é corrosivo para vários metais. A obtenção das taxas altas é desejável em aços de baixa temperabilidade, e o rompimento mais rápido da camada de vapor é desejável

de maneira geral durante a têmpera, por diminuir as probabilidades de trincas e distorções nas peças (ARAI; FURUYA, 2011).

Um fator importante ao se analisar os modelos criados e as inferências que podem ser obtidas, é que o banco de dados fornecido foi construído utilizando faixas de 2 a 15% massa para diferentes sais. A literatura mostra que, acima de um certo limite para alguns sais, como NaCl, ocorre um efeito inverso nas taxas máximas de resfriamento e no rompimento da camada de vapor. Isto é, cada sal possui um “ponto ótimo” de extração de calor. Além disso, a geometria da peça, o volume do banho e a própria metodologia para a obtenção dos dados de temperatura varia de autor para autor, e esses fatores também contribuem para as variáveis respostas do experimento. Dessa forma, o modelo é certamente mais preciso e reflete a realidade quando utilizado dentro da faixa do banco de dados e sob as mesmas condições de experimento, e quaisquer extrapolações devem ser acompanhadas de um conhecimento técnico-científico mais aprofundado e específico acerca do sal que estará sendo utilizado como meio de têmpera (ZORDÃO, 2019; LOZANO, 2016).

5.7 Aplicativo Shiny para previsão da taxa máxima de resfriamento

Com os modelos 8 e 9 foi feito um aplicativo em linguagem R utilizando a biblioteca Shiny para tornar a equação de regressão em um produto com aplicação prática. O aplicativo permite prever as taxas máximas de resfriamento para diferentes sais, porcentagens, rotações e temperaturas do banho. Assim como na construção dos modelos, a porcentagem foi definida como uma variável contínua, e as outras variáveis foram definidas como categóricas. O aplicativo também possui função mobile. A Figura 40 traz um exemplo de utilização do aplicativo.

Figura 40: entrada do aplicativo Shiny sendo utilizado para predição da taxa máxima de resfriamento.

Taxa de resfriamento máxima

Porcentagem:

Tipo de sal:

Temperatura do banho:

Agitador:

Porcentagem	Sal	Temperatura	Rotação
0.1	H2O	25	0

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A interface foi construída de forma a ser amigável para o usuário que planeja utilizar o aplicativo. As Figuras 41 e 42 trazem exemplos de como ele pode ser utilizado para obtenção das taxas máximas de resfriamento e as faixas de variabilidade, de acordo com a predição que se deseja. No primeiro exemplo, trazido na Figura 41, foi utilizado o sal NaSO_4 em uma temperatura de banho de 35°C , rotação de 800 rpm e porcentagem de 9,1% massa. Essa condição é calculada com o modelo 9 e não estava originalmente presente no banco de dados. A predição da taxa máxima de resfriamento, nesse caso, é possível com o modelo que foi construído e com as devidas considerações e diagnósticos que foram realizados e comentados na seção anterior.

Figura 41: exemplo de utilização do aplicativo em Shiny. Sal escolhido: NaSO₄, temperatura do banho a 35°C, porcentagem em 9,1% e rotação de 800 rpm. Modelo 9.

Taxa de resfriamento máxima

Porcentagem:

0.1 9.1 20

0.1 2.1 4.1 6.1 8.1 10.1 12.1 14.1 16.1 18.1 20

Tipo de sal

Na2SO4 ▼

Temperatura do banho

35 ▼

Agitador

800 ▼

Calcular

Porcentagem	Sal	Temperatura	Rotação
9.1	Na2SO4	35	800
Est_inferior	Est_pontual	Est_superior	Modelo
238.03	269.60	301.16	modelo_9

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A Figura 42 traz um exemplo com a água pura em uma temperatura de 35°C e a rotação em 800 rpm.

No caso da água, independente da porcentagem colocada, o resultado será o mesmo, porque não existe sentido físico em alterar a porcentagem de uma substância pura. Para esse caso é utilizado o modelo 8, pois como explicado anteriormente, o modelo 9, por considerar interações entre as variáveis preditoras, utilizou o NaSO₄ como base, e não a água.

Figura 42: exemplo de utilização do aplicativo em Shiny. Meio escolhido: água pura, temperatura do banho a 35°C e rotação de 800 rpm. Modelo 8.

Taxa de resfriamento máxima

Porcentagem:

0.1 20

0.1 2.1 4.1 6.1 8.1 10.1 12.1 14.1 16.1 18.1 20

Tipo de sal

H2O ▼

Temperatura do banho

35 ▼

Agitador

800 ▼

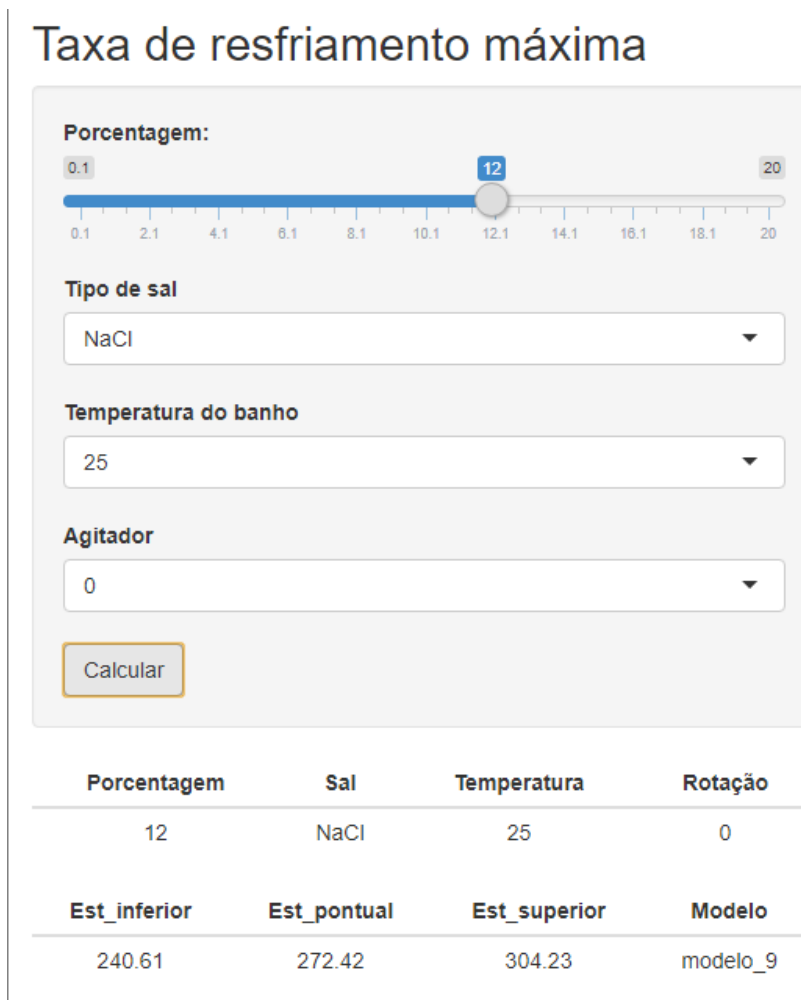
Calcular

Porcentagem	Sal	Temperatura	Rotação
0.1	H2O	35	800
Est_inferior	Est_pontual	Est_superior	Modelo
165.84	212.26	258.67	modelo_8

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Para avaliar os resultados obtidos com o aplicativo e comparar com aqueles do banco de dados, foram feitos alguns testes. Utilizando o sal NaCl a uma concentração de 12%, temperatura do banho a 25°C e sem agitação, tem-se, no banco de dados, o equivalente a uma taxa máxima de resfriamento de 276 °C. O aplicativo, com as mesmas condições, prevê um valor médio de 272,42 °C, com um limite inferior de 240,61 °C e um limite superior de 304,23 °C. Esse resultado pode ser visto na Figura 43.

Figura 43: exemplo de utilização do aplicativo em Shiny. Meio escolhido: NaCl, concentração de 12%, temperatura do banho a 25°C s sem agitação. Modelo 9



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Um outro teste, utilizando NaNO_2 , uma porcentagem de 7%, temperatura do banho de 35° C e rotação de 500 rpm foi realizado. O banco de dados possui um valor, para esse ponto, de 254 ° C. O aplicativo prevê um valor médio de 231,01 °C, um limite superior de 262,65 °C e um limite inferior de 199,37 °C. Esse resultado pode ser visto na Figura 44.

Figura 44: exemplo de utilização do aplicativo em Shiny. Meio escolhido: NaCl, concentração de 12%, temperatura do banho a 25°C s sem agitação. Modelo 9

Taxa de resfriamento máxima

Porcentagem:

0.1 12 20

0.1 2.1 4.1 6.1 8.1 10.1 12.1 14.1 16.1 18.1 20

Tipo de sal

NaNO2

Temperatura do banho

35

Agitador

500

Calcular

Porcentagem	Sal	Temperatura	Rotação
12	NaNO2	35	500
Est_inferior	Est_pontual	Est_superior	Modelo
242.93	274.74	306.55	modelo_9

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Esses resultados mostram que o modelo está bem ajustado e pode ser utilizado para prever faixas de valores que serão obtidos em experimentos de meios de resfriamento, considerando as mesmas condições que geraram o banco de dados.

6. CONCLUSÃO

Com uma análise descritiva bivariada, os dados fornecidos foram analisados e foram feitas algumas inferências quanto aos resultados. Considerando uma boa sanidade dos dados, existem tendências de relação entre os parâmetros com a taxa máxima de resfriamento, o que é de se esperar de acordo com a literatura.

A construção dos modelos de regressão linear de maneira progressiva segue uma lógica de aumento da complexidade, até atingir um número considerável de variáveis significativas e um R^2 suficientemente alto para explicar a variabilidade dos dados. O último modelo apresentado, o modelo 9, leva em consideração as interações entre as variáveis, apresenta um R^2 de 91% e muitas variáveis significativas, o que garante uma confiabilidade no modelo. Por esses pontos, foi considerado o melhor modelo construído neste trabalho.

Com esse resultado, a quantificação dos efeitos das variáveis preditoras na taxa máxima de resfriamento, proposta como objetivo do trabalho, é atingida, obtendo como produto uma equação de regressão linear múltipla cujos fatores foram estatisticamente verificados. Essa equação pode ser utilizada para predição de taxas máximas de resfriamento em experimentos que utilizam as mesmas condições daquelas incluídas no banco de dados. Além disso, é possível obter resultados interpolados da concentração do sal, porque a variável foi considerada contínua durante a construção dos modelos.

O diagnóstico dos modelos mostra que a relação entre os coeficientes e a taxa máxima de resfriamento possui indícios de não linearidade em algumas faixas. Ainda que o modelo tenha sido ajustado e o resultado seja muito próximo do banco de dados, esses fatores podem ser estudados de maneira mais aprofundada para construção de um modelo ainda mais preciso. No entanto, modelos mais complexos, como os modelos não-lineares, são menos eficientes em oferecer resultados de simples interpretação, em contrapartida aos modelos lineares utilizados neste trabalho.

A construção do aplicativo em linguagem R na biblioteca Shiny transforma o resultado do trabalho, os modelos 8 e 9, em um produto de simples aplicação, o que responde a uma necessidade dos pesquisadores de possuírem com facilidade o acesso à informação. O resultado foi apresentado com uma faixa de variabilidade com confiança de 95%, mas pelo modelo ter sido finamente ajustado, como demonstrado nas faixas de variabilidade dos modelos, existe razão para crer que a chance de um experimento resultar no valor previsto pela equação é alta, desde que as premissas do experimento sejam mantidas e sejam respeitadas as individualidades

de cada sal. Esse conhecimento deve ser previamente estudado pelo pesquisador antes da utilização do aplicativo em questão, como as faixas ótimas de utilização de cada sal, os efeitos adversos, possíveis transformações químicas, inversão de proporcionalidade, geometria das peças, volume do banho e metodologia de medição de taxas e temperaturas.

7. TRABALHOS FUTUROS

Algumas sugestões para trabalhos futuros que surgiram durante a elaboração desse trabalho:

1. Utilização de mesma lógica estatística para modelagem de outra variável de saída (temperatura a 700 graus, temperatura de taxa máxima de resfriamento);
2. Utilização de modelos não-lineares mais complexos para melhor modelagem dos efeitos dos sais, permitindo captar os efeitos de não-linearidade e expandir a capacidade de inferência dos modelos;
3. Aplicar regressão linear para outros bancos de dados (como óleos vegetais, óleos minerais, banhos de sais fundidos) para obter resultados similares em uma quantidade maior de fluidos de resfriamento, respeitadas as diferenças entre os tipos de fluidos e as premissas estatísticas apresentadas.
4. Estudar a rotação em fluidos que não contribuem para o rompimento da camada de vapor ou que até mesmo promovam sua estabilização, de forma a dar uma nova visão quanto a essa variável.
5. Analisar se a exclusão do NaHCO_3 do banco de dados traria diferentes resultados em relações às variáveis e aos modelos construídos.

REFERÊNCIAS

ASTM D6482 – 06, Standard Test Method for Determination of Cooling Characteristics of Aqueous Polymer Quenchants by Cooling Curve Analysis with Agitation (Tensi Method), ASTM International, West Conshohocken, PA, 2016.

ARAI, T.; FURUYA, M. **Effect of Salt Additives on Film Boiling Heat Transfer and Mechanism of Quenching Temperature Rise**, Heat Transfer — Asian Research, 2011, Vol. 40, No. 2, p. 101-113. doi. 10.1002/htj.20327

BHADESHIA, H. K. D. H.; HONEYCOMBE, S. R. **Chapter 3: The Iron-Carbon Equilibrium Diagram and Plain Carbon Steels**, Steels, (Third Edition), 2006, 39-70

CALLISTER JR., W. D.; RETHWISCH, D. G. **Materials Science and Engineering: An Introduction**, John Wiley & Sons Press, 9th ed., 2014.

CANALE, L.C.F.; TOTTEN, G.E. **Quenching Technology: A Selected Overview of the Current State-of-the-art**, Materials Research, Vol. 8, No. 4, 2005, 461-467

CHIAVERINI, V. **Aços e Ferros Fundidos**. 7a Ed. São Paulo: Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, 2008.

FOX, John. **Applied Regression Analysis and Generalized Linear Models**. 3. ed. [S. l.]: Sage Publications, 2015. 816 p.

FOX, John; WEISBERG, Sanford. **An R Companion to Applied Regression**. 3. ed. [S. l.]: Sage Publications, 2018. 608 p.

GONÇALVES, Luiz Paulo Tavares de. **Gráfico Boxplot e Identificação de Outliers com R**. [S. l.], 27 abr. 2020. Disponível em: <https://luizpaulotavaresgonalves.medium.com/gr%C3%A1fico-boxplot-e-identifica%C3%A7%C3%A3o-de-outliers-com-o-r-551912f5d120>. Acesso em: 30 nov. 2020.

HASAN, H.; KHALEEF, R.; AL HABOUBI, N.; SALMAN, R. **Effect of Agitation, Temperature, and Quenching Medium on Cooling Curve and cooling rate for Steels**, Al-Nahrain Journal for Engineering Sciences, 21(4), 2018, 473-478.

KRAUSS, George. **Principles of Heat Treatment of Steel**. Ohio: ASM International, 1980. 291 p.

LOZANO, D.; MERCADO-SOLIS, Rafael; COLÁS, Rafael; CANALE, Lauralice; TOTTEN, George. **Heat Transfer Coefficients during Quenching of Inconel and AISI 304 Stainless Steel Cylinders in NaNO₂ Aqueous Solutions**, 2012.

LOZANO, D. **Quenching: Brine and Caustic**. In *Encyclopedia of Iron, Steel, and Their Alloys*. Taylor and Francis: New York, Published online: 13 Apr 2016; 2824 – 2833

MAIA, A. S., OSORIO, V.K.L. **Decomposição Térmica do Bicarbonato de Sódio – Do Processo Solvay ao Diagrama Tipo Eillingham**, Quim. Nova, Vol. 26, No. 4, 2003, 595-601

METALS HANDBOOK, **Properties and Selection Irons Steels and High Performance Alloys**, V. 1, 10a Edição, 1990.

MILAN, Marcelo Tadeu; MALUF, Omar; SPINELLI, Dirceu; BOSE FILHO, Waldek Wladimir. **Metais: uma visão objetiva**. [S.l.: s.n.], 2004.

SILVA, A. L. V. C; MEI, P. R. **Aços e Ligas Especiais**. 2ª Edição revista e ampliada. Editora: Edgard Blücher. São Paulo, 2006. 664p.

TOTTEN, G.E.; BATES, C.E.; Clinton, N.A. **Handbook of Quenchants and Quenching Technology**, 1993, ASM International, Materials Park, OH.

ZHAO, J.C.; NOTIS, M. R. **Continuous cooling transformation kinetics versus isothermal transformation kinetics of steels: a phenomenological rationalization of experimental observations**, Materials Science and Engineering, R15, 1995, p135-208

ZORDÃO, Luís Henrique Pizetta. **Avaliação de meios de resfriamentos a base de soluções iônicas**. 2019. Dissertação (Mestrado em Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019. doi:10.11606/D.18.2019.tde-15022019-112257. Acesso em: 2020-11-30.

ANEXO A – Comparativo entre modelos estatísticos (modelos 1 a 5)

Variável Dependente: txmax					
Variável/Modelo	1	2	3	4	5
porcentagem	5.956*** (0.577)				4.057*** (0.415)
salNaSO4		58.111*** (11.591)			21.602** (10.047)
salNaCl		54.528*** (11.591)			18.019* (10.047)
salNaHCO3		-51.111*** (11.971)			-70.042*** (9.826)
salNaNO2		39.639*** (11.591)			3.130 (10.047)
salNaOH		62.833*** (11.591)			26.324*** (10.047)
graus_c35			-12.217 (8.861)		
graus_c45			-28.317*** (8.861)		
rpm500				4.317 (9.097)	
rpm800				7.600 (9.097)	
porcentagem:graus_c35					
porcentagem:graus_c45					
porcentagem:salNaCl					
porcentagem:salNaHCO3					
porcentagem:salNaNO2					
porcentagem:salNaOH					
Constante	195.639*** (5.419)	207.333*** (10.367)	256.200*** (6.266)	238.717*** (6.432)	207.333*** (8.343)
Observações	180	180	180	180	180
R2	0.375	0.618	0.055	0.004	0.754
R2 Ajustado	0.371	0.607	0.044	-0.007	0.746
Erro residual	39.366 (df = 178)	31.102 (df = 178)	48.534 (df = 174)	49.825 (df = 177)	25.030 (df = 173)
F estatístico	106.661*** (df = 1; 178)	56.410*** (df = 5; 174)	5.138*** (df = 2; 177)	0.351 (df = 2; 177)	88.526*** (df = 6; 173)

ANEXO B – Comparativo entre modelos estatísticos (modelos 5 a 9)

Variável Dependente: txmax					
Variável/Modelo	5	6	7	8	9
porcentagem	4.057*** (0.415)	4.057*** (0.368)	4.057*** (0.414)	4.057*** (0.366)	2.453*** (0.628)
salNaSO4	21.602** (10.047)	21.602** (8.906)	21.602** (10.024)	21.602** (8.865)	
salNaCl	18.019* (10.047)	18.019** (8.906)	18.019* (10.024)	18.019** (8.865)	10.917 (7.621)
salNaHCO3	-70.042*** (9.826)	-70.042*** (8.710)	-70.042*** (9.804)	-70.042*** (8.671)	-60.203*** (9.187)
salNaNO2	3.130 (10.047)	3.130 (8.906)	3.130 (10.024)	3.130 (8.865)	-69.482*** (7.621)
salNaOH	26.324*** (10.047)	26.324*** (8.906)	26.324*** (10.024)	26.324*** (8.865)	13.845* (7.621)
graus_c35		-12.217*** (4.051)		-12.217*** (4.032)	-16.846*** (5.768)
graus_c45		-28.317*** (4.051)		-28.317*** (4.032)	-48.498*** (5.768)
rpm500			4.317 (4.559)	4.317 (4.032)	4.719 (2.919)
rpm800			7.600* (4.559)	7.600* (4.032)	7.035** (2.919)
porcentagem:graus_c35					0.625 (0.598)
porcentagem:graus_c45					2.653*** (0.598)
porcentagem:salNaCl					-1.611** (0.742)
porcentagem:salNaHCO3					-7.212*** (1.551)
porcentagem:salNaNO2					5.668*** (0.742)
porcentagem:salNaOH					-1.014 (0.742)
Constante	207.333*** (8.343)	220.844*** (7.757)	203.361*** (8.730)	216.872*** (8.064)	251.400*** (6.555)
Observações	180	180	180	180	171
R2	0.754	0.809	0.758	0.813	0.911
R2 Ajustado	0.746	0.800	0.747	0.802	0.902
Erro residual	25.030 (df = 173)	22.187 (df = 171)	24.972 (df = 171)	22.085 (df = 169)	15.581 (df = 155)
F estatístico	88.526*** (df = 6; 173)	90.645*** (df = 8; 171)	67.049*** (df = 8; 171)	73.541*** (df = 10; 169)	105.481*** (df = 15; 155)