

N° 180064

Construção de modelos preditivos supervisionados para o estudo de temperabilidade do ferro fundido branco de alto cromo.

Luiza Garbin Manzutti

Leonardo Rodrigues Danninger

Felipe Moreno Siqueira Borges de Carvalho

Ana Paola Villalva

*Palestra apresentada no
CONGRESSO DE
MODELAGEM,
SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL E IA
DO IPT, 2025, São Paulo.
Pôster... 1 slide.*

“Comunicação Técnica” compreende trabalhos elaborados por técnicos do IPT, apresentados em eventos, publicados em revistas especializadas ou quando seu conteúdo apresentar relevância pública. **PROIBIDO REPRODUÇÃO**



CONSTRUÇÃO DE MODELOS PREDITIVOS SUPERVISIONADOS PARA O ESTUDO DE TEMPERABILIDADE DO FERRO FUNDIDO BRANCO DE ALTO CROMO

L. G. MANZUTTI^{1,2}, L. R. DANNINGER², F. M. S. B. CARVALHO², A. P. V. BRAGA²

¹Instituto de Física da Universidade de São Paulo (IFUSP), ²Instituto de Pesquisas Tecnológicas (IPT)

Introdução

O ferro fundido branco de alto teor de cromo possui diversas aplicações industriais que exigem uma boa combinação de propriedades relacionadas à resistência à abrasão e à resistência ao impacto. Seu desempenho pode ser aperfeiçoado pelo desenvolvimento de uma matriz martensítica, obtida através do tratamento térmico de têmpera, realizado sob uma determinada taxa de resfriamento crítica para a obtenção de uma matriz homogênea.

Na literatura, diversas equações empíricas foram desenvolvidas relacionando as porcentagens em massa de elementos químicos à taxa crítica. Entretanto, estes estudos levaram em consideração apenas a composição geral de ligas específicas, sem possibilidade de extração e sem o uso da composição da matriz.

A fim de minimizar o gasto de recursos, a quantidade de elementos e otimizar a criação de novas ligas, o presente trabalho apoiou-se em ferramentas de aprendizado de máquina e em inteligência artificial para obter a taxa de resfriamento crítica necessária para o desenvolvimento de uma microestrutura martensítica homogênea, a partir da composição química da matriz.

Objetivos

Desenvolver modelos preditivos supervisionados que generalizem a previsão da taxa de resfriamento crítica para a obtenção de uma microestrutura martensítica homogênea adotando como parâmetro de entrada a composição química da matriz, obtida pelo software Thermo-Calc®.

Metodologia / Modelagem

Utilizando a quantidade de C, Cr, Si, Mo, Mn, Cu e Ni presentes na matriz de cada liga, desenvolveram-se 4 variações de um modelo de aprendizado supervisionado, apresentadas na Figura 1, com o uso de 11 diferentes algoritmos.

Cada modelo baseou-se em dados gerados experimentalmente, no IPT, e em dados extraídos de dois atlas: "Transformation characteristics of Cr and Cr-Mo white irons", produzido pela empresa Climax Molybdenum, e "Atlas of Time-Temperature Diagrams for Irons and Steels", produzido pela ASM International.

Contendo um total de 79 linhas, o dataset foi considerado pequeno, visto os padrões da área. Por esse motivo, aplicaram-se estratégias para uma possível melhora de performance, como a criação de dados sintéticos.

Esta sintetização foi feita por meio de uma função cópula gaussiana, que aprende a estrutura de dependência entre variáveis dependentes a partir da aplicação e modelagem de suas distribuições de probabilidade acumuladas utilizando uma distribuição normal. Obtendo a função densidade de probabilidade da cópula, pode-se gerar dados sintéticos que respeitam essa estrutura.

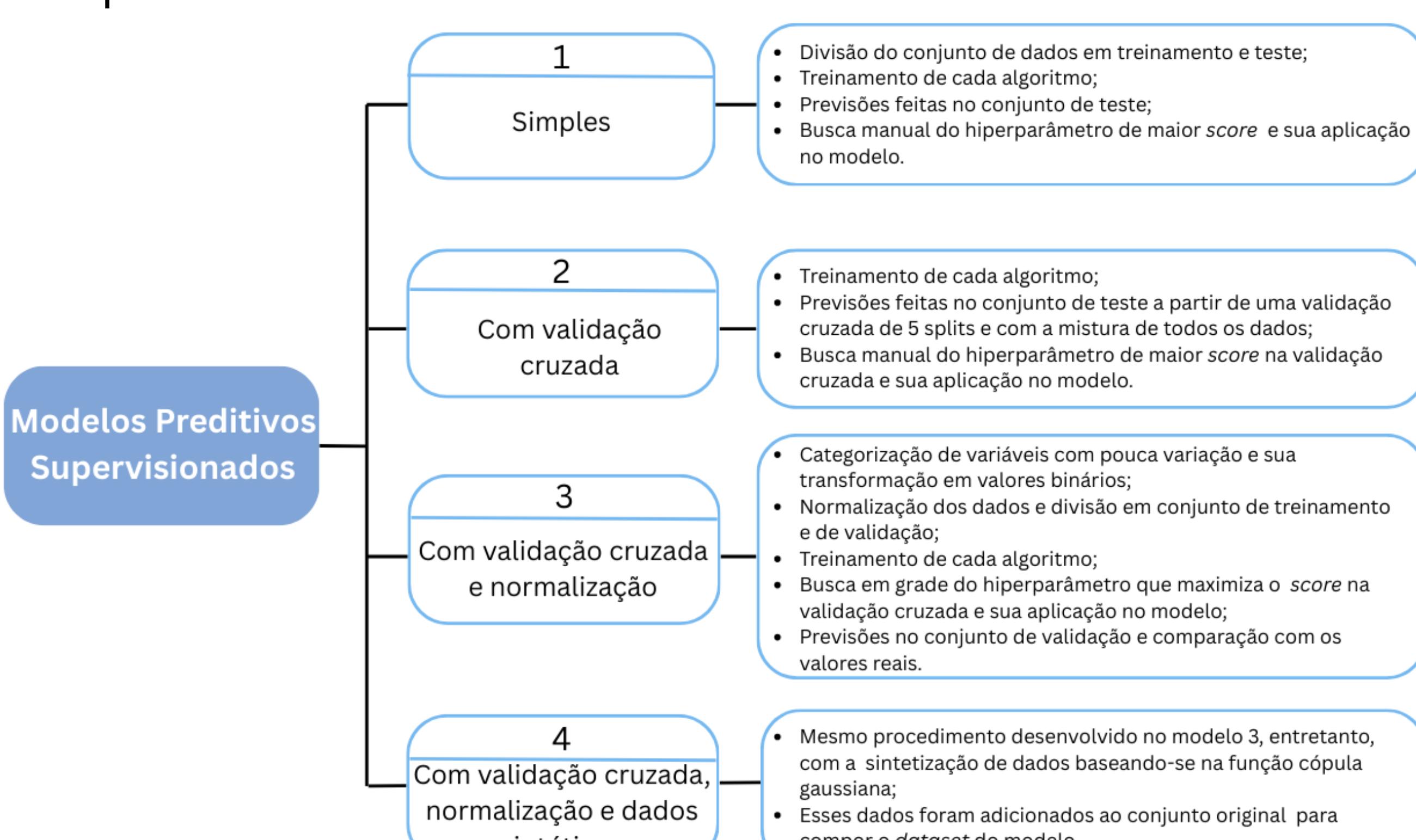


Figura 1: Mapa conceitual das variações de modelo utilizadas

Além disso, dado que os valores da taxa crítica variam em um intervalo grande e que certos elementos apresentam quantidades com pequenas variações no conjunto, classificaram-se esses dados em "baixo", "médio" e "alto" para uma posterior normalização completa do dataset.

A fim de otimizar os hiperparâmetros de cada algoritmo, realizou-se uma pesquisa em grade, conhecida como "Grid Search". Para todos os modelos, a métrica de performance utilizada foi o coeficiente de determinação, ou R^2 , que indica a concordância entre os valores reais e os valores previstos por cada uma das regressões.

Resultados e Discussão

Algoritmo	Modelo			
	1	2	3	4
KNN	0,7179	0,3684	0,6399	0,7049
Linear Regression	0,5643	0,3878	0,8918	0,9151
Ridge	0,5739	0,3865	0,8554	0,9099
Lasso	0,5898	0,3810	0,8544	0,9017
SVR	0,2151	0,1748	0,8852	0,9112
Linear SVR	0,2134	0,1750	0,7730	0,9034
Decision Tree	0,4632	0,4182	0,8397	0,9210
Random Forest	0,7144	0,5076	0,8955	0,9418
GBR	0,098	0,1761	0,8734	0,8667
Light GBM	0,5241	0,4292	0,8378	0,9255
Neural Network	0,8036	0,5425	0,9024	0,9745

Tabela 1: Valores do score para cada modelo e para cada algoritmo

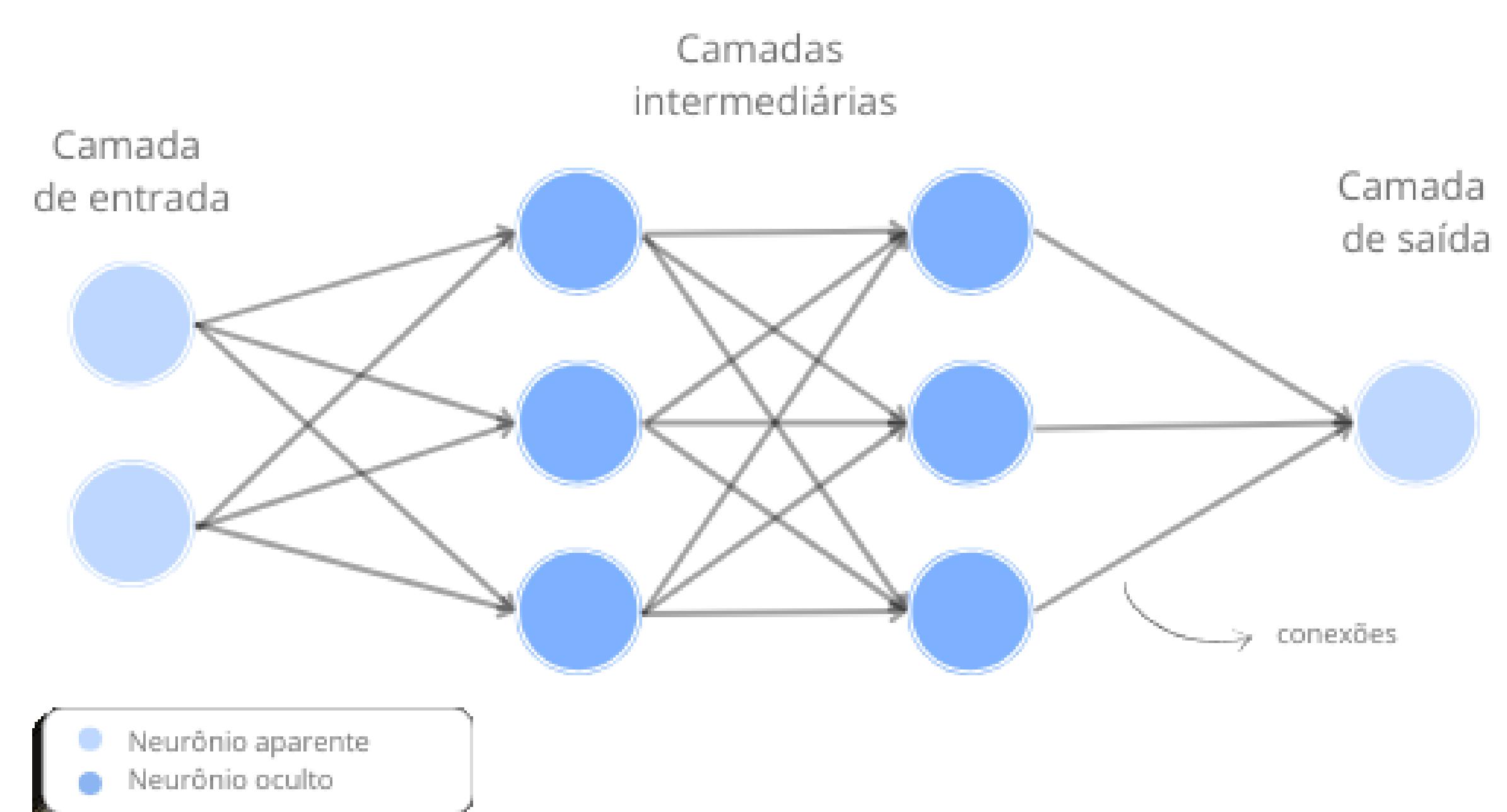


Figura 2: Esquema representativo de uma rede neural artificial

Conclusões

Com este trabalho, criaram-se 4 modelos de aprendizado de máquina e de inteligência artificial, com complexidades diferentes, para a previsão de taxas críticas de resfriamento do ferro fundido branco de alto teor de cromo. Houve um aumento significativo de R^2 ao realizar o pré-processamento dos dados, a técnica de *data augmentation* e a validação cruzada.

Referências

- [1] A. C. Müller and S. Guido, *Introduction to Machine Learning with Python: A Guide for Data Scientists*. O'Reilly Media, 2016.
- [2] F. Pedregosa et al., "Scikit-learn: Machine Learning in Python," *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 12, pp. 2825–2830, 2011.
- [3] Synthetic Data Vault, "SDV Documentation," 2023. [Online]. Disponível em: <https://sdv.dev/SDV/>
- [4] LightGBM, "LightGBM Documentation", 2023. [Online]. Disponível em: <https://lightgbm.readthedocs.io/>.
- [5] Thermo-Calc Software AB. THERMO-CALC, Version 2024a. Stockholm, Sweden, 2024.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, aos meus colegas de trabalho e de profissão, ao IPT, ao IFUSP e aos meus professores pelo apoio.