

PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS DE AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA MICROLIGADOS UTILIZANDO TÉCNICAS DE INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL¹

Hiroshi Jorge Takahashi²
Gláucio Bórtoli da Cruz Rabelo³
Roselito de Albuquerque Teixeira⁴

RESUMO

A obtenção de propriedades mecânicas especificadas para os produtos é um aspecto fundamental na siderurgia. A abordagem fenomenológica para a modelagem das propriedades mecânicas não tem apresentado resultados satisfatórios, em função da quantidade e diversidade das variáveis e processos envolvidos. Nesse contexto, pelas suas características, técnicas de inteligência computacional tem sido utilizadas como alternativas viáveis. Este trabalho apresenta o desenvolvimento e a implantação na Usiminas de uma ferramenta de apoio à decisão, baseada nas técnicas de inteligência computacional, para a predição de propriedades mecânicas de aços de alta resistência microligados, laminados a frio e revestidos por imersão a quente.

Palavras-chave: Redes neurais artificiais; Sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*; Aços microligados; Propriedades mecânicas.

MECHANICAL PROPERTIES PREDICTION OF HIGH STRENGTH LOW ALLOY STEELS – HSLA – USING COMPUTATIONAL INTELLIGENCE METHODS

Abstract

The attainment of desired mechanical properties is a crucial aspect for steel makers. Traditional physical modeling approach have not been satisfactory, due to the complicated nature of the process, very complex and multidimensional. In this context, by their characteristics, computational intelligence methods have been used and considered as a viable alternative. This paper describes the development and the implementation of a decision support tool for mechanical properties prediction of coated high strength low alloy steel at Usiminas steel works, Brazil.

Key words: Artificial neural networks; Hybrid neuro-fuzzy systems; HSLA; Mechanical properties.

¹ *Contribuição técnica ao XI Seminário de Automação de Processos, 3 a 5 de outubro, Porto Alegre-RS*

² *Membro da ABM, Analista de Sistemas de Automação, M.Sc., Superintendência de Projetos, Instrumentação e Automação da Usiminas, Ipatinga, MG.*

³ *Membro da ABM, Engenheiro Mecânico, M.Sc., CQE/CQA, Superintendência de Metalurgia e Garantia da Qualidade da Usiminas, Ipatinga, MG.*

⁴ *Engenheiro Eletricista, Dr., Professor do Departamento de Engenharia Elétrica da Unileste, Coronel Fabriciano, MG.*

1 INTRODUÇÃO

Modelos fenomenológicos formam a base para a compreensão de processos, porém a construção de tais modelos para processos multivariáveis e com relacionamentos não-lineares pode ser uma tarefa altamente complexa, além de exigir alto consumo de tempo.⁽¹⁾ Para a predição das propriedades mecânicas à tração de aços, em particular limite de escoamento, limite de resistência e alongamento total, apenas o conhecimento físico disponível dos processos, não permite a construção de modelos fenomenológicos confiáveis.⁽²⁾

Técnicas de inteligência computacional têm sido propostas como alternativas viáveis para modelagem onde abordagens convencionais têm apresentado resultados insatisfatórios. Segundo Jones et al.,⁽³⁾ entre os benefícios da utilização dessas técnicas para predição das propriedades mecânicas destacam-se: a possibilidade de se confirmar as propriedades mecânicas em tempo real em cada fase do processo e a possibilidade da otimização da composição química e dos parâmetros de processo. Myllykoski et al.⁽¹⁾ complementa com o suporte para realização de ações de *feed-forward* nos diversos processos da cadeia de produção e Golodnikov et al.⁽⁴⁾ comenta a redução do tempo e volume de produção experimental envolvidos no projeto de aços.

Uma rede neural do tipo *Multilayer Perceptron* (MLP) com algoritmo de aprendizado *backpropagation* se mostrou capaz de realizar com precisão a predição de propriedades mecânicas de tiras de aço.⁽⁵⁾ O efeito da composição química e dos parâmetros de processo no limite de escoamento de aços de alta resistência microligados – HSLA (*High Strength Low Alloy*), foram modelados através de um sistema de inferência nebulosa por Datta e Banerjee.⁽⁶⁾

Este artigo detalha um caso de aplicação de Redes Neurais Artificiais (RNAs) e sistemas híbridos *Neuro-fuzzy* para a predição das propriedades mecânicas de aços HSLA, laminados a frio e revestidos por imersão a quente na Usiminas.

2 PROCESSO DE PRODUÇÃO DE TIRAS DE AÇO EM UMA USINA INTEGRADA A COQUE

Em uma usina siderúrgica integrada a coque o fluxo de produção pode ser dividido em quatro etapas básicas: preparação do minério e do carvão; redução do minério de ferro; refino do aço e laminação.

As propriedades mecânicas dos aços são influenciadas em várias destas etapas, como no refino (composição química), na laminação a quente (aquecimento, laminação e resfriamento) e na laminação a frio (laminação, recozimento e encruamento). A grande quantidade de variáveis envolvidas dificulta a modelagem fenomenológica, enquanto a realização de produção experimental apresenta custo elevado. A Figura 1 apresenta o fluxo de produção de tiras de aço laminadas a frio e revestidas por imersão a quente da Usiminas.

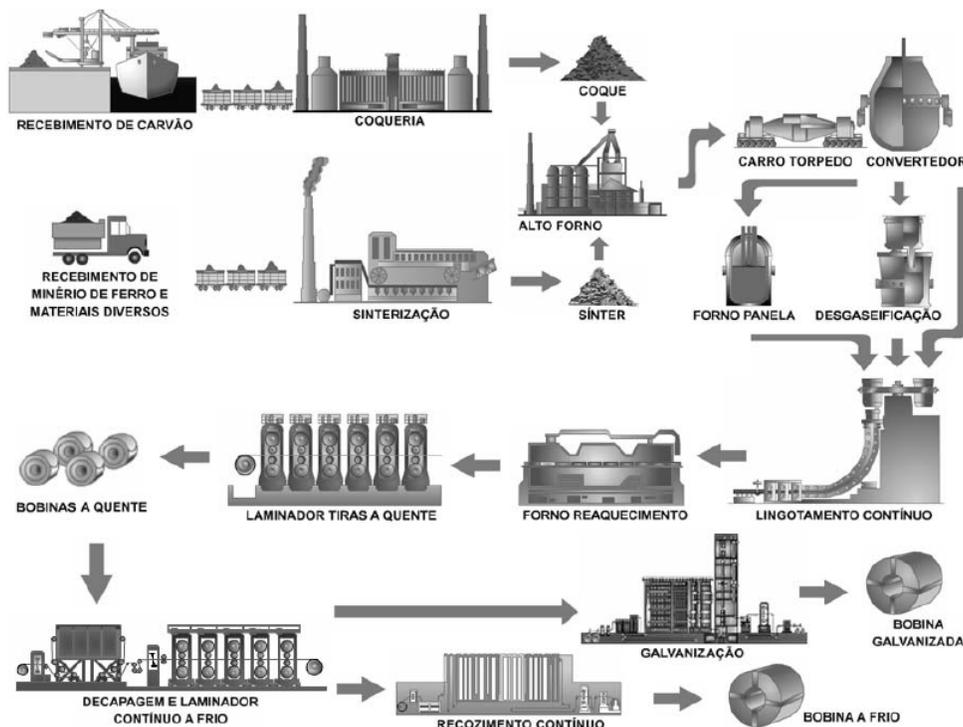


Figura 1 - Fluxo de produção da Usiminas.

3 PROPRIEDADES MECÂNICAS DE AÇOS

As propriedades mecânicas à tração: limite de escoamento, limite de resistência e alongamento total; constituem características importantes para qualquer tipo de aço e são obtidas através do ensaio de tração.

Durante a realização do ensaio é registrada a força (que pode ser convertida em tensão, σ_c) versus a variação de comprimento do corpo-de-prova (que se converte em deformação, ϵ_c) até a ruptura do mesmo.

Ao final do ensaio é obtida a curva de tensão versus deformação do corpo-de-prova, conforme apresentado na figura 2.

Limite de escoamento (LE) – Segundo Askeland⁽⁷⁾, é a tensão na qual a deformação plástica se torna aparente, ou também, a tensão que divide o comportamento do material entre plástico e elástico.

Limite de resistência (LR) – Ainda segundo Askeland⁽⁷⁾, é a máxima força aplicada no ensaio de tração, ou também, a maior tensão presente na curva tensão-deformação.

Ductilidade (ALO) – Askeland⁽⁷⁾ define ductilidade como sendo uma medida da quantidade de deformação que um corpo-de-prova resiste sem se romper. Na figura 2, F corresponde a essa deformação do material. Essa propriedade pode ser expressa em termos do alongamento total do corpo-de-prova e calculada de acordo com a equação 1. Pelo fato da ductilidade ser mensurada pelo alongamento total percentual, este é o termo mais comumente usado tanto na literatura quanto na siderurgia e na indústria.

$$ALO = \frac{l_f - l_0}{l_0} 100\%, \quad (1)$$

sendo l_0 o comprimento inicial e l_f o comprimento final do corpo-de-prova.

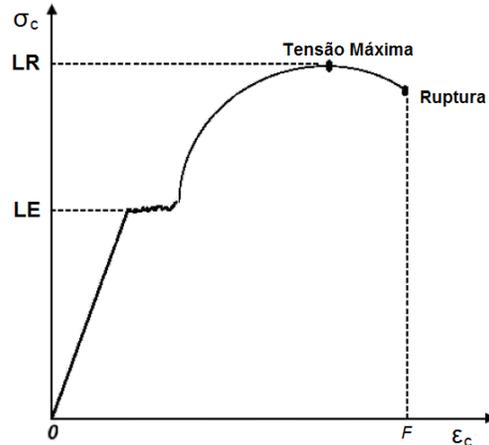


Figura 2 - Diagrama tensão versus deformação típico.

4 AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA MICROLIGADOS

Os aços HSLA apresentam, usualmente, limite de escoamento entre 350 MPa e 550 MPa, desenvolvidos a partir da adição de microligantes, onde se destacam o Nb, Ti e V, que têm a finalidade de elevar o nível de resistência. Vários mecanismos são utilizados para se produzir este efeito. Os normalmente utilizados, neste tipo de aço, são o endurecimento por solução sólida, por precipitação e por refino microestrutural⁽⁸⁾. A obtenção de propriedades mecânicas adequadas aos aços de alta resistência depende tanto da composição química quanto das condições de processamento industrial.⁽⁸⁾

5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS E SISTEMAS HÍBRIDOS NEURO-FUZZY

As redes neurais são modelos matemáticos inspirados no cérebro humano e constituem um sistema de processamento paralelo e distribuído, composto de unidades de processamento simples (neurônios) que têm a capacidade de armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para o uso.⁽⁹⁾

Segundo Haykin,⁽⁹⁾ as RNAs se assemelham ao funcionamento do cérebro humano nos seguintes aspectos: o conhecimento é adquirido pela RNA a partir de seu ambiente, através de um processo de aprendizagem; forças de conexão entre neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

O método de aprendizado supervisionado, assim chamado em função da existência de um supervisor externo que fornece as entradas e as saídas desejadas, é o mais comum no treinamento das RNAs.⁽¹⁰⁾

Os exemplos mais conhecidos de algoritmos para aprendizado supervisionado são a regra delta⁽¹¹⁾ e a sua generalização para RNAs de múltiplas camadas, o algoritmo de retropropagação do erro,⁽¹²⁾ implementado neste trabalho.

A escolha da arquitetura do modelo neural adequada à complexidade do problema é um dos maiores desafios no projeto de RNAs. Quando a complexidade do modelo é maior que a necessária para modelar o problema, a rede fica super-ajustada aos dados de treinamento, respondendo inadequadamente aos padrões de validação. Este fenômeno é comumente chamado de *overfitting* e, reduz a capacidade de um modelo generalizar. Porém se a complexidade do problema supera a complexidade do modelo, este não é capaz de descrever e representar o domínio do problema, caracterizando assim o fenômeno de sub-ajuste ou *underfitting*.

Existem na literatura várias estratégias que objetivam soluções com elevada capacidade de generalização. Neste trabalho foram aplicadas as técnicas *Early Stopping*,⁽¹⁴⁾ Regularização Bayesiana,⁽¹⁵⁾ algoritmo de *Pruning Optimal Brain Surgeon*⁽¹⁶⁾ e o método *Ensemble Modelling*.⁽¹⁷⁾

Apesar da técnica de modelagem *Fuzzy*, baseada na teoria de conjuntos nebulosos proposta por Zadeh⁽¹⁸⁾ ser largamente aplicada ela apresenta algumas desvantagens⁽¹⁹⁾. As RNAs também apresentam limitações, como por exemplo, a maneira pela qual o conhecimento é representado.

Com a perspectiva de superar as limitações apresentadas pelos sistemas *Fuzzy* e pelas RNAs, várias propostas têm sido realizadas.⁽²⁰⁾ Os sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*, segundo Jang et al.,⁽²¹⁾ combinam as vantagens das duas técnicas; a representação explícita do conhecimento e a capacidade de tratar informações linguísticas da lógica *Fuzzy* com a capacidade de aprendizagem das RNAs.

6 DESENVOLVIMENTO DOS MODELOS

Para a seleção das variáveis de entrada para a predição das propriedades mecânicas foram levados em consideração os trabalhos de Myllykoski et al.,⁽¹⁾ Chen e Linkens⁽²²⁾, Tenner et al.,⁽²³⁾ Yang e Linkens⁽²⁴⁾ e Golodnikov et al.⁽⁴⁾

Foram selecionadas 20 variáveis de dois grupos distintos: composição química e parâmetros dos processos. A Tabela 1 apresenta estas variáveis.

A coleta de dados para criação do modelo foi realizada através de consultas ao banco de dados de processo de forma a se ter um conjunto de padrões contendo todas as variáveis de entrada e saída num único arquivo.

Tenner et al.⁽²²⁾ faz algumas considerações para a construção de modelos baseados em dados reais de processos industriais. Para localizar os dados inconsistentes foram empregadas a análise estatística e técnicas para detecção automática de *outliers*, distância de Mahalanobis e Replicator neural network (RNN).

O próximo passo foi a definição da arquitetura da RNA. Segundo Cybenko⁽²⁵⁾ uma RNA com uma camada intermediária, sem restrição no número de neurônios nesta camada, é capaz de aproximar qualquer função contínua. Neste trabalho optou-se pelo desenvolvimento de RNAs com apenas uma camada intermediária.

Na tentativa de se buscar a melhor arquitetura para as RNAs desenvolvidas, em relação ao número de neurônios da camada intermediária, foi implementado um algoritmo variando o número de neurônios da camada intermediária de $n/2$ até $2n + 1$,

sendo n o número de entradas. O valor limite de $2n+1$ neurônios foi definido com base no teorema de Kolmogorov citado em Gorni,⁽²⁶⁾ Mazzatorta et al.⁽²⁷⁾ e Jones et al.⁽³⁾

No treinamento das RNAs, pela rapidez na convergência, foi utilizado o algoritmo de otimização proposto por Levenberg Marquardt (LM)⁽³⁾ e no caso do *ensemble* utilizou-se um conjunto com as 10 RNAs que apresentaram melhor desempenho. A tabela 2 apresenta um resumo dos resultados de Erro médio quadrático (MSE) obtidos nas implementações de RNAs para predição das propriedades mecânicas e as respectivas configurações da camada intermediária das RNAs.

Os sistemas híbridos *Neuro-fuzzy* foram desenvolvidos utilizando o *Fuzzy Toolbox* do MATLAB através da função *genfis2*, a fim de ser realizado o agrupamento dos dados objetivando a redução do número de regras. A tabela 3 apresenta um resumo dos resultados, erro médio quadrático (MSE), obtidos nas implementações dos sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*.

Tabela 1 - Variáveis de entrada.

Grupo	Variável	Unidade
Composição química	C	% em massa
	Mn	
	Nb	
	P	
	S	
	Al	
	N	
Dados de processo	Ti	
	Espessura a quente	mm
	Temperatura de acabamento	°C
	Temperatura de bobinamento	°C
	Espessura a frio	mm
	Largura da bobina a frio	mm
	Temperatura do forno RTF	°C
	Temperatura do forno SF	°C
	Temperatura do forno SCF	°C
	Temperatura do forno JCF	°C
	Carga de laminação	tf
Alongamento no encruamento	%	
Velocidade da tira	m/min	

Tabela 2 - Resumo dos resultados das implementações de RNAs.

Algoritmo	Neurônios	MSE (LE-MPa)	MSE (LR-MPa)	MSE (ALO-%)
LM – <i>Early Stopping</i>	36	185,42	106,71	4,02
LM – Reg. Bayesiana	41	184,43	102,55	4,08
<i>Pruning</i> - OBS	41 ^a	194,90	106,96	4,22
<i>Ensemble</i>	-	162,87	89,26	3,49

^a O treinamento foi iniciado com 41 neurônios na camada intermediária.

Tabela 3 - Resumo dos resultados das implementações de sistemas *Neuro-fuzzy*.

Propriedade	MSE
LE	213,22 MPa
LR	104,93 MPa
ALO	4,16 %

7 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

A Tabela 4 apresenta um resumo dos resultados, erro médio quadrático (MSE) e coeficiente de correlação (R), obtidos na predição das propriedades mecânicas dos aços HSLA, laminados a frio e revestidos, através de RNAs (única e *ensemble*) e sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*.

Tabela 4 - Resumo dos resultados obtidos na predição de propriedades mecânicas usando RNAs e sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*.

Propriedade	Técnica	Algoritmo	MSE	R
LE	RNA	Regularização	184,43 MPa	0,94
	RNA	<i>Ensemble</i>	162,87 MPa	0,94
	<i>Neuro-fuzzy</i>	-	213,22 MPa	0,93
LR	RNA	Regularização	102,55 MPa	0,97
	RNA	<i>Ensemble</i>	89,26 MPa	0,97
	<i>Neuro-fuzzy</i>	-	104,93 MPa	0,97
ALO	RNA	Regularização	4,08 %	0,81
	RNA	<i>Ensemble</i>	3,49 %	0,84
	<i>Neuro-fuzzy</i>	-	4,16 %	0,80

Observa-se na Tabela 4 que, de maneira geral, os modelos apresentaram melhor desempenho na predição do LR quando comparado com o desempenho na predição do LE. Estes resultados são compatíveis com os resultados obtidos por Yang e Linkens⁽²⁴⁾, que explicam o desempenho inferior na modelagem do LE em função da dificuldade de medição precisa desta propriedade durante o ensaio de tração. Essa tendência é verificada na maioria dos modelos derivados de dados reais.

Resultados decrescentes de desempenho na predição do LR, seguido pelo LE e pelo ALO também foram obtidos por Jones et al.⁽³⁾

8 FERRAMENTA OFF-LINE PARA PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS E PARÂMETROS DE PROCESSO

Em função dos bons resultados obtidos com a aplicação das técnicas de inteligência computacional, foi desenvolvida em ambiente *Windows* uma ferramenta de apoio à decisão para predição de propriedades mecânicas e auxílio ao desenvolvimento ou ajustes em projetos de aços.

Essa ferramenta permite, através de uma interface gráfica, realizar a predição das propriedades mecânicas de aços HSLA dados a composição química e os parâmetros de processo, ou ainda, definir os parâmetros de processo, de forma a permitir que um material inicialmente previsto para ser processado na linha de recozimento contínuo, seja processado na linha de galvanização por imersão a quente.

A Figura 3 apresenta as interfaces gráficas da ferramenta de predição de propriedades mecânicas para aços HSLA e de predição de parâmetros de processo, para a integração das linhas de recozimento contínuo e galvanização por imersão a quente.

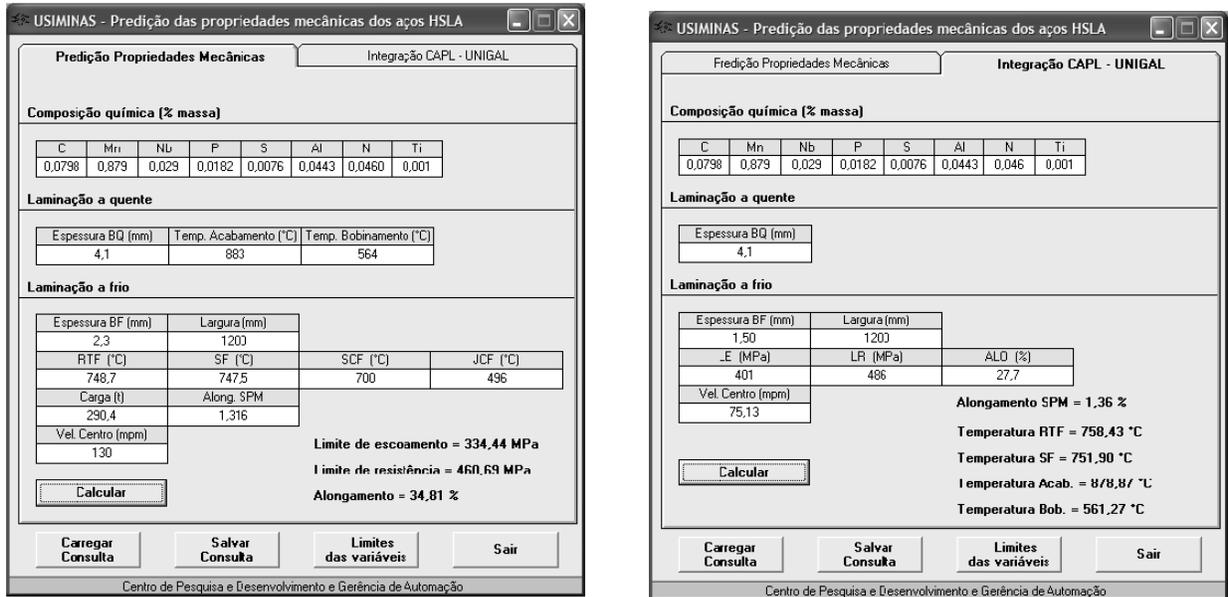


Figura 3 - Interface gráfica da ferramenta de predição de propriedades mecânicas e parâmetros de processo.

9 CONCLUSÃO

Em função dos resultados obtidos as técnicas de inteligência computacional investigadas se mostraram alternativas viáveis para a implantação em ambiente de produção.

A utilização da ferramenta *off-line* para predição de propriedades mecânicas permite vislumbrar os seguintes benefícios:

- agilidade nas respostas às consultas de produtos não padronizados e no desenvolvimento de novas ligas e condições de processo;
- otimização dos projetos metalúrgicos existentes através de simulações que não envolverão os custos e prazos de experiências conduzidas em escala industrial;
- suporte para definição de ações de *feed forward*, a partir do conhecimento da composição química real. A ferramenta será útil para auxiliar na definição de novos parâmetros de processamento subsequentes;
- Aumento da flexibilidade operacional ao permitir a integração das linhas de produção recozimento contínuo e galvanização por imersão a quente.

REFERÊNCIAS

- 1 Myllykoski, P.; Larkiola, J.; Nylander, J. Development of prediction model for mechanical properties of batch annealed thin steel strip by using artificial neural network modelling. *Journal of Materials Processing Technology*, 60:399–404. 1996.

- 2 Mahfouf, M.; Chen, M.; Linkens, D. A. Design of heat-treated alloy steels using intelligent multi-objective optimization. *ISIJ International*, 45(5):694–699. 2005.
- 3 Jones, D. M.; Watton, J.; Brown, K. J. Comparison of hot rolled steel mechanical property prediction models using linear multiple regression, non-linear multiple regression and non-linear artificial neural networks. *Ironmaking and Steelmaking*, 32(5):435–442. 2005.
- 4 Golodnikov, A.; Macheret, Y.; Trindade, A. A.; Uryasev, S.; Zrazhevsky, G. Modeling composition and processing parameters for the development of steel alloys: A statistical approach. Technical report, University of Florida. 2005.
- 5 Myllykoski, P. A study on the causes of deviation in mechanical properties of thin steel sheets. *Journal of Materials Processing Technology*, 79:9–13. 1997.
- 6 Datta, S.; Banerjee, M. K. Fuzzy modelling of strength-composition-process parameter relationships of hsla steels. *Materials and Manufacturing Processes*, 20:761–776. 2005.
- 7 Askeland, D. R. *The Science and Engineering of Materials*. Wadsworth Publishing Company. 1994.
- 8 Barbosa, A. H. A.; Alves, H. A.; Araújo, I. L.; Ribeiro, C. F. Estudo da influência dos parâmetros de recozimento contínuo nas propriedades mecânicas de aços de alta resistência baixa liga laminados a frio. Technical report, USIMINAS. 2004.
- 9 Haykin, S. *Neural Networks. A Comprehensive Foundation*. Prentice Hall, New Jersey, 2a edição. 1999.
- 10 Braga, A. P.; Ludermir, T. B.; Carvalho, A. C. *Redes Neurais: Teoria e Aplicações*. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, RJ, 1a edição. 2000.
- 11 Widrow, B.; Hoff, M. E. Adaptive switching circuits. Em 1960 IRE WESCON Convention Record, pp. 96–104. 1960.
- 12 Rumelhart, D. E.; Hinton, G. E.; Williams, R. J. Learning representations by backpropagation errors. *Nature*, 323:533–536. 1986.
- 13 Geman, S.; Bienenstock, E.; Doursat, R. Neural networks and the bias/variance dilemma. *Neural Computation*, 4(1):1–58. 1992.
- 14 Weigend, A. S.; Huberman, B.; Rumelhart, D. E. Predicting the future: a connectionist approach. *International Journal of Neural Systems*, 3:193–209. 1990.
- 15 Mackay, D. J. C. Bayesian interpolation. *Neural Computation*, 4(3):415–447. 1992.
- 16 Hassibi, B.; Stork, D. G.; Wolff, G. J. Optimal brain surgeon and general network pruning. Em *Proceedings of the 1993 IEEE International Conference on Neural Networks*, pp. 293–299. 1993.
- 17 Perrone, M. P.; Cooper, L. N. When networks disagree: Ensemble methods for hybrid neural networks. Em Mammone, R. J., editor, *Neural Networks for Speech and Image Processing*, pp. 126–142. Chapman-Hall. 1993.
- 18 Zadeh, L. A. Fuzzy sets. *Information and Control*, 8(3):338–353. 1965.
- 19 Jang, R. J. Anfis: Adaptive-network-based fuzzy inference system. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 23:665–685. 1993.
- 20 Abraham, A. *Neuro fuzzy systems: State-of-the-art modeling techniques*. Lecture Notes in Computer Science, 2084:269–276. 2001.
- 21 Jang, R. J.; Sun, C.; Mizutani, E. *Neuro-fuzzy and Soft Computing*. Prentice Hall, New Jersey, 1a edição. 1997.

- 22 Chen, M.; Linkens, D. A. Hybrid fuzzy modelling using simulated annealing and application to materials property prediction. Em Proceedings of the Second International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials, volume 1, pp. 109–114. 1999.
- 23 Tenner, J.; Linkens, D. A.; Morris, P. F.; Bailey, T. J. Prediction of mechanical properties in steel heat treatment process using neural networks. *Ironmaking and Steelmaking*, 28(1):15–22. 2001.
- 24 Yang, Y. Y.; Linkens, D. A. Steel yield strength prediction using ensemble model - performance improvement over single neural network model. Em IPMM 2001 Intelligent Processing and Manufacturing of Materials, volume 1, pp. 335–346. 2001.
- 25 Cybenko, G. Continuous valued neural networks with two hidden layers are sufficient. Technical report, Department of Computer Science, Tufts University. 1988.
- 26 Gorni, A. A. The application of neural networks in the modeling of plate mill processes. *Journal of the Minerals, Metals & Material Society*, 4(49):252–260. 1997.
- 27 Mazzatorta, P.; Benfenati, E.; Neagu, C. D.; Gini, G. Tuning neural and fuzzy-neural networks for toxicity modeling. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 43:513–518. 2003.