

ESTUDO DA CINÉTICA DA RECRISTALIZAÇÃO APLICANDO REDES NEURAIIS¹

Gerson Alves Inácio²
Éder Reis³
Phablo Ramos Carvalho⁴
Adauto Martins de Assis⁵
José Flávio Silveira Feiteira⁵
Gláucio Soares da Fonseca⁶

Resumo

As redes neurais estão sendo utilizadas nos dias de hoje como uma excelente ferramenta para estudo de problemas e fenômenos complexos. Neste trabalho, a idéia principal foi construir redes neurais para comparação da cinética de recristalização de três materiais específicos: alumínio, ferro puro e aço IF (Interstitial Free) com base em dados experimentais já realizados em outras pesquisas e que serviram para orientação e treinamento. Com as redes configuradas e treinadas, a cinética de recristalização foi simulada. Os resultados obtidos pelas redes neurais para a determinação da cinética de recristalização foram analisados e apresentaram bons resultados de validação.

Palavras-chave: Cinética; Recristalização; Redes neurais.

THE RECRYSTALLIZATION KINETICS STUDY APPLYING NEURAL NETWORKS

Abstract

Neural networks are being used today as an excellent tool to study complex phenomena and problems. In this work, the main idea was to build neural networks to compare the kinetics of recrystallization of three specific materials: aluminum, pure iron and steel IF (Interstitial Free) based on experimental data already made in other studies and served for orientation and training. With the networks set up and trained, the recrystallization kinetics was simulated. The results obtained by the neural network for determining the recrystallization kinetics were analyzed and showed good results of the validation.

Key words: Kinetics; Recrystallization; Neural networks.

¹ Contribuição técnica ao 67º Congresso ABM - Internacional, 31 de julho a 3 de agosto de 2012, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

² Engenheiro Especialista - Laminação à Frio da CSN, Mestrando da UFF.

³ Estudante de Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense - UFF.

⁴ Estudante de Engenharia Mecânica da Universidade Federal Fluminense - UFF.

⁵ Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Mecânica e do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal Fluminense - UFF.

⁶ Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Mecânica e do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense - UFF.

1 INTRODUÇÃO

Para utilização de materiais metálicos, geralmente é necessário que o material sofra algum tipo de processo mecânico para obter propriedades mecânicas desejáveis para sua aplicação. Um desses processos de grande interesse industrial é a laminação a frio. Os materiais são processados em laminador a frio para se buscar a redução de espessura e o aumento do encruamento da tira, garantindo que o material laminado tenha as características necessárias para melhoria da resistência mecânica e conformabilidade. Durante o processo de laminação a frio, o aço encrua melhorando a resistência mecânica, mas com baixa conformabilidade, sendo necessário ocorrer o processo de recozimento que reduz este encruamento e permite que fique mais conformável.

Durante o recozimento ocorre o fenômeno da recristalização, que é uma transformação microestrutural que envolve a formação de novos grãos livres de deformação em certas partes do material e o crescimento destes grãos até consumir a microestrutura deformada, ocorrendo através da eliminação de defeitos cristalinos por migração de contornos de grãos. A cinética da recristalização geralmente é apresentada pela evolução da fração recristalizada em função do tempo, e representada com uma curva em formato sigmoidal (Figura 1), que mostra o aspecto de transformações ocorridas por nucleação e crescimento.⁽¹⁾ Uma maneira de estudar a cinética de recristalização é pela equação de JMAK.

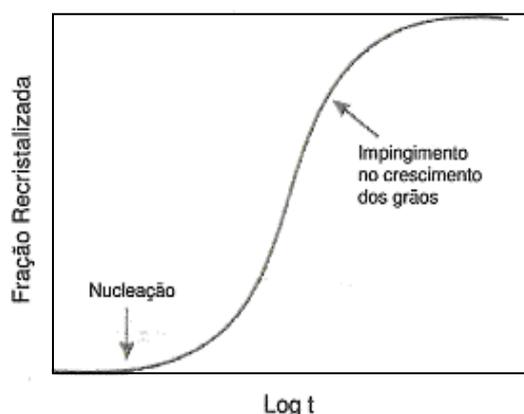


Figura 1. Curva típica da cinética de recristalização durante recozimento isotérmico.⁽¹⁾

Este modelo analítico conhecido como modelo de Johnson, Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK), representada na Equação 1, considera as seguintes hipóteses simplificadoras: a taxa de nucleação de novos grãos é constante, a taxa de crescimento dos novos grãos é linear, os novos grãos são considerados esféricos e o crescimento é isotrópico, e a amostra recristalizada é infinita e a nucleação ocorre de forma aleatória e homogênea.⁽²⁾

$$V_v = 1 - \exp(-kt^n) \quad (1)$$

Onde, n e k são constantes, estando k relacionado com a velocidade e dependente da temperatura e “ n ” indica o tipo de nucleação, e se o processo é controlado pela interface ou por difusão.

Dentro dos sistemas de automação de processos aplicados hoje em dia, as redes neurais artificiais (RNA) estão sendo muito utilizadas para melhorar a performance dos sistemas. Com as bases da neurocomputação introduzidas pelos pesquisadores McCullough e Pitts, em 1943, estes princípios foram baseados no funcionamento do

cérebro humano. A construção de redes neurais artificiais (RNAs) tem inspiração nos neurônios biológicos e nos sistemas nervosos, onde cada neurônio é uma unidade independente de processamento de informações que está conectada a diversos outros neurônios através dos terminais do axônio. Estes terminais se conectam aos dendritos de outros neurônios, onde a região de passagem dos sinais entre um neurônio e outro denomina-se sinapse. Este modelo simples tinha como intenção imitar a realidade biológica, preocupação não compartilhada por muitos pesquisadores atuais, pois é importante compreender que atualmente as RNA's estão muito distantes das redes neurais naturais. São ferramentas de grande versatilidade e aplicabilidade, especialmente na indústria, tanto para reconhecimento de padrões, como para controle e previsão de variáveis, em problemas complexos, de caráter não linear, oferecendo uma maneira alternativa e eficiente para resolver estes problemas complexos e são tolerantes a informações falhas em termos de que elas conseguem manusear informações (dados de entrada) incompletas e não-lineares.

As redes neurais artificiais (Figura 2), são um conjunto de equações de transferência que recebem entradas (informações), com as respectivas ponderações ("pesos") que são otimizados visando minimizar o erro entre os valores previstos e os experimentais, transformando-as em resultados (saídas numéricas), sendo uma tentativa de criar um modelo matemático capaz de apresentar algumas características de inteligência e cumprir a função de prever o valor da variável resposta através de treinamento com base na quantidade de dados analisadas.

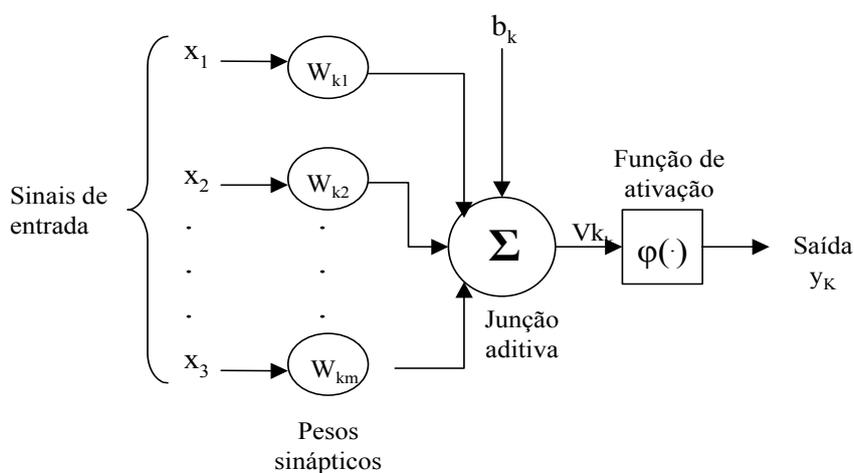


Figura 2 Modelo não-linear de um neurônio.⁽³⁾

Uma rede neural aprende acerca do seu ambiente através de um processo iterativo de ajustes aplicados a seus pesos sinápticos. A rede se torna mais instruída sobre o seu ambiente após cada iteração do processo de aprendizagem.⁽³⁾ A conexão torna-se cada vez mais forte entre os elementos processados, através da re-análise dos pesos (w), associados a cada informação de entrada (x), os quais vão se ajustando, no sentido de fornecer resultados cada vez mais próximos dos resultados objetivados, contidos nos dados iniciais, com isto, comportamentos complexos podem ser reproduzidos por um modelo resultante de treinamento de uma rede neural.

Este trabalho consiste em se criar e aplicar redes neurais para prever a cinética de recristalização estática. Primeiramente foi construída uma rede baseada em dados experimentais do artigo de Raghunathan, Zaidi e Sheppard,⁽⁴⁾ onde os autores

trabalharam com uma liga de alumínio (AA 5056) e uma segunda rede foi criada baseada no trabalho de Vandermeer e Rath,⁽⁵⁾ que pesquisaram o ferro puro. Por fim, uma terceira rede foi construída com base no trabalho Tse e Duggan,⁽⁶⁾ que estudaram a textura do aço IF (*Interstitial Free*), muito empregado para fins automobilísticos e que apresentam alta resistência mecânica e uma excelente conformabilidade. Os resultados das redes visam mostrar a boa performance desta ferramenta apresentando uma boa correlação com os dados experimentais utilizados em artigos tratados com materiais diferentes.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Na elaboração deste estudo foram realizadas simulações utilizando o Matlab, que é uma ferramenta de programação numa linguagem de alto nível e utiliza pacotes específicos (*toolboxes*) para determinadas áreas do conhecimento; incluindo redes neurais. O tipo de rede utilizada foi *Multilayer Perceptron*, com uma camada de entrada e quatro a cinco camadas intermediárias e uma camada de saída. A quantidade de dados coletados foi treinada, testada e validada em 100%.

A primeira rede neural foi construída baseada nos dados do artigo de Raghunathan, Zaidi e Sheppard,⁽⁴⁾ que mostra o volume de fração recristalizada obtido na variação do tempo durante experimentos de recozimento isotérmico, onde foi produzido uma curva sigmoidal para alumínio liga AA 5056 variando-se as temperaturas de 300°C a 450°C, conforme exemplo apresentado na Figura 3.

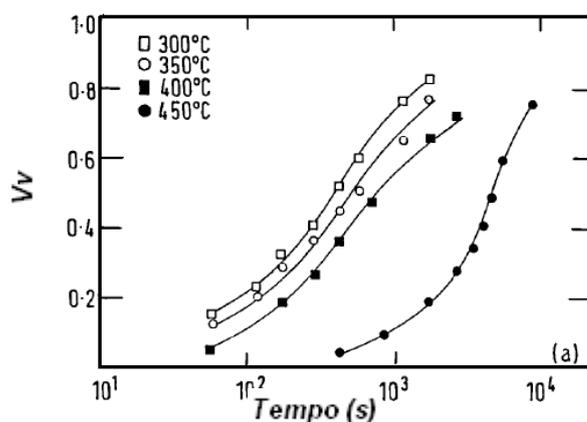


Figura 3. Curva (a) de recristalização isotérmica após recozimento, considerando 4 temperaturas.⁽⁴⁾

Para o material AA5056 foi utilizado camada de entrada com 4 neurônios (um para cada classe de dados de entrada – temperatura, tempo, diâmetro inicial de grão e deformação equivalente) e camada de saída com um neurônio (correspondente ao valor de saída, ou seja, a fração volumétrica). Para as camadas ocultas foram consideradas quatro camadas: a primeira camada com 13 neurônios usando como função de aprendizado o logaritmo (*logsig*); para a segunda camada com 10 neurônios, usando como função de aprendizado o logaritmo (*logsig*); para a terceira camada, foram utilizados 10 neurônios usando como função de aprendizado a tangente hiperbólica (*tansig*) e na quarta camada, 9 neurônios, usando como função de aprendizado o logaritmo (*logsig*). O número de repetições consideradas foi de 2.000, com erro admitido de 0,001%. Foi utilizada a função de transferência – *trainlm* – para treinamento de neurônios por *backpropagation*.

A segunda rede neural foi baseada no artigo de Vandermeer e Rath⁽⁵⁾ e que apresenta o estudo da cinética de recristalização do ferro puro com 70% de

deformação em um processo de laminação, nas temperaturas de 500°C, 525°C, 550°C, 575°C e 600°C (Figura 4).

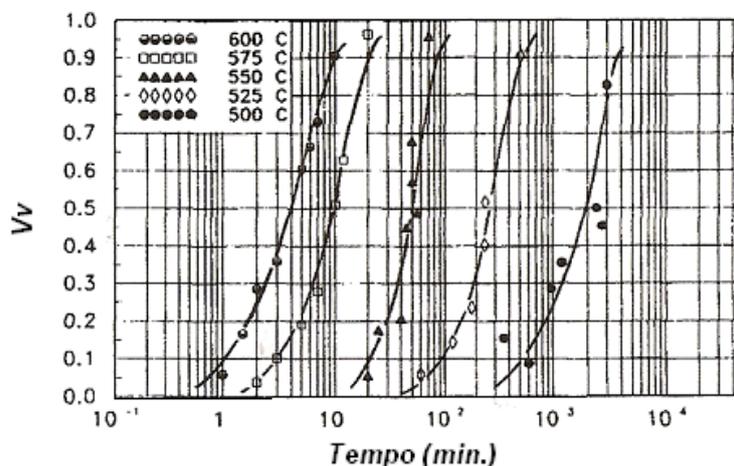


Figura 4. Fração volumétrica recristalizada em função do tempo de recozimento para cinco diferentes temperaturas, representando um típico comportamento sigmoidal.⁽⁵⁾

Para o ferro puro foi utilizado uma camada de entrada com 4 neurônios (um para cada classe de dados de entrada – temperatura, tempo, diâmetro inicial de grão e deformação equivalente) e camada de saída com um neurônio (correspondente ao valor de saída, ou seja, a fração volumétrica) com a função *purelin* (linear). Para as camadas ocultas foram consideradas com cinco camadas: a primeira camada com 8 neurônios, usando como função de aprendizado o tangente hiperbólica (*tansig*); a segunda camada com 10 neurônios, usando como função de aprendizado o logaritmo (*logsig*); a terceira camada com 10 neurônios, usando como função de aprendizado a tangente hiperbólica (*tansig*); a quarta camada com 8 neurônios, usando como função de aprendizado o logaritmo (*logsig*) e a quinta camada 6 neurônios, usando como função de aprendizado o tangente hiperbólica (*tansig*). O número de repetições consideradas foi de 2.000 e o erro admitido foi de 0,0001%. Foi utilizada a função de transferência *trainlm* para treinamento de neurônios por *backpropagation*.

Com base nas duas redes desenvolvidas, foi criada a terceira rede neural, baseada no artigo de Tse e Duggan,⁽⁶⁾ que realizou um trabalho sobre textura cristalográfica de recristalização em aço livre de intersticial (IF), laminado a frio com 85% de deformação, nas temperaturas de 700°C e 800°C (Figura 5).

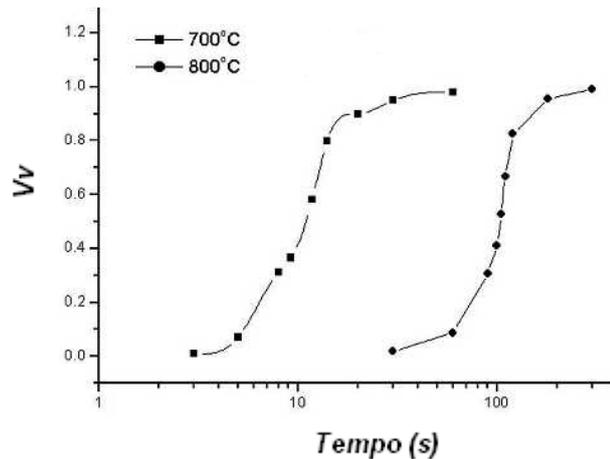


Figura 5. Fração volumétrica recristalizada em função do tempo de recozimento sob diferentes condições de recozimento.⁽⁶⁾

Para esta rede foi utilizada uma camada de entrada com 4 neurônios (temperatura, tempo, diâmetro inicial de grão, deformação equivalente) e uma camada de saída com um neurônio (correspondente ao valor de saída, ou seja, a fração volumétrica). As camadas ocultas foram consideradas com seis camadas: a primeira camada com 8 neurônios, usando a função *tansig*; a segunda camada com 10 neurônios e com a função *logsig*; a terceira camada com 10 neurônios, usando a função *tansig*; a quarta camada com 8 neurônios, usando a função *logsig*; a quinta camada com 6 neurônios, usando a função *tansig* e a sexta camada 1 neurônio usando a função *purelin*. Como parâmetros de treinamento foram consideradas 2.000 repetições e um erro aceitável de 0,0001%, sendo utilizada a função de transferência *trainlm* para treinamento de neurônios por backpropagation.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com base nos dados das Figuras 3, 4 e 5 apresentadas foram implementadas as redes neurais que permitiram gerar o aprendizado do modelo para os materiais alumínio AA5056, ferro puro e aço IF apresentados nas curvas abaixo.

A rede neural relativa ao material AA5056 apresentou uma boa correlação dos valores utilizados no treinamento, teste e validação realizada (Figura 6). A validação ocorreu após 141 repetições (Figura 7).

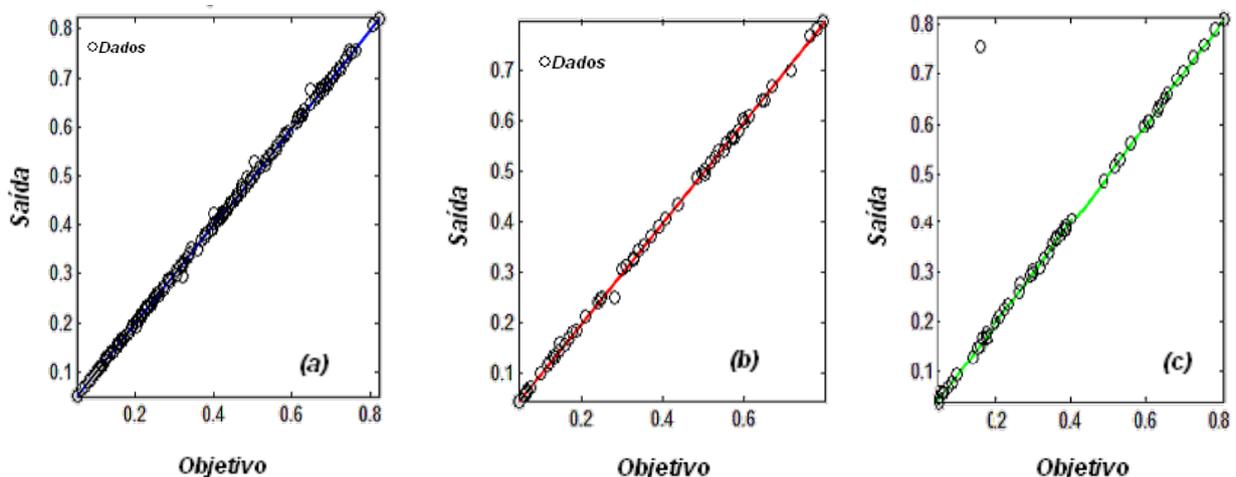


Figura 6. Treinamento(a), teste (b) e validação (c) da rede neural para análise do material AA5056.

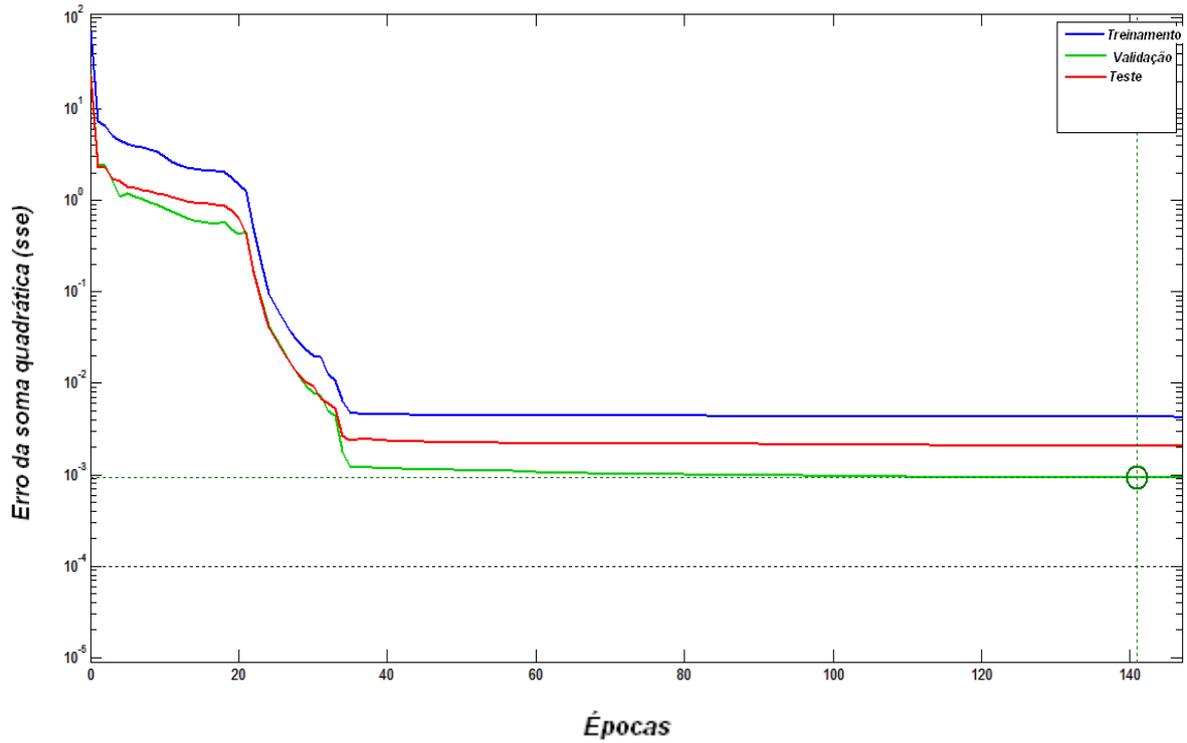


Figura 7. Gráfico mostrando o início da validação da proposta na época 141.

No gráfico mostrado na Figura 8, mostra o resultado obtido com a rede neural e apresenta uma boa concordância comparada com a Figura 3.

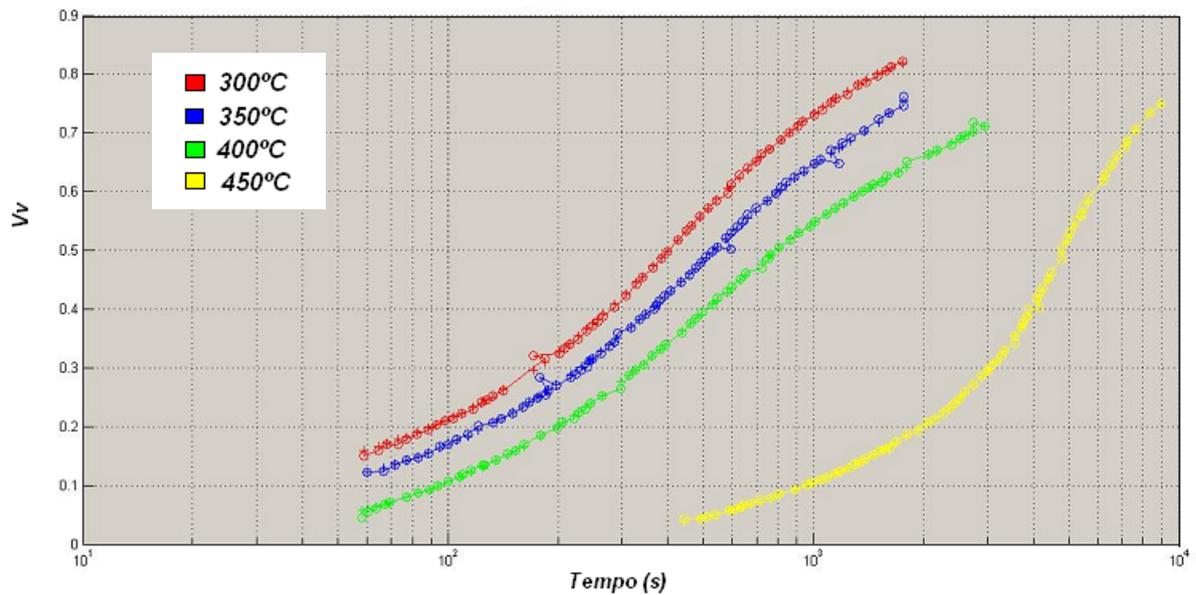


Figura 8. Curvas isotérmicas do material AA5056, com a validação da rede neural, mostrando a fração volumétrica em função do tempo.

A rede neural relativa ao ferro puro apesar de ter alguns pontos que estão fora da reta, ainda assim, apresentou uma boa correlação com os valores utilizados no treinamento, teste e validação realizada (Figuras 9).

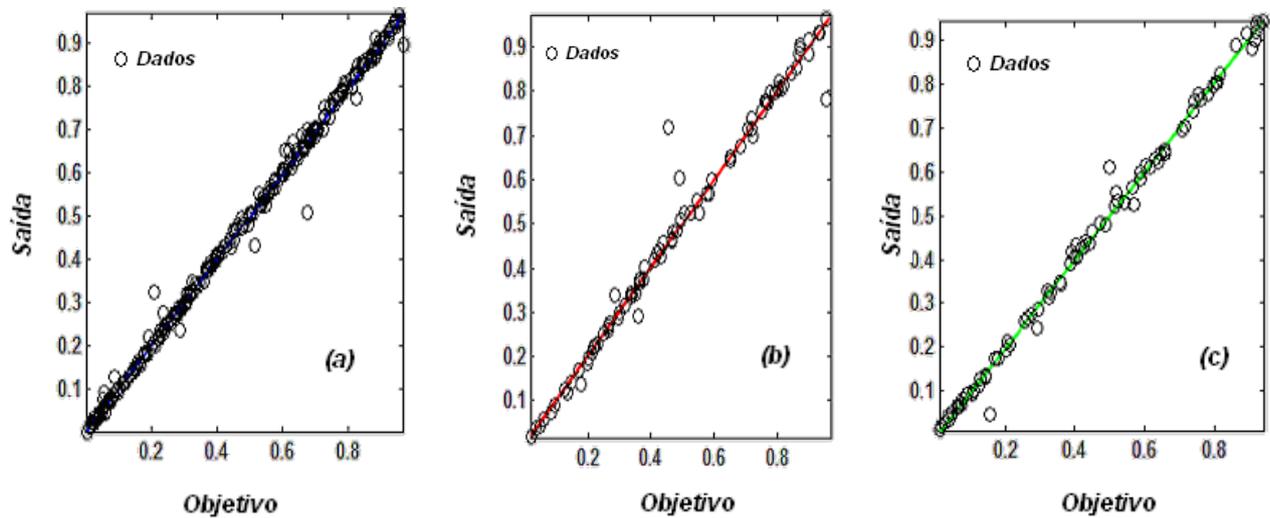


Figura 9. (a) Treinamento; (b) teste; e (c) validação da rede neural para análise do material ferro puro.

A validação ocorreu após 123 repetições, como pode ser visto na Figura 10.

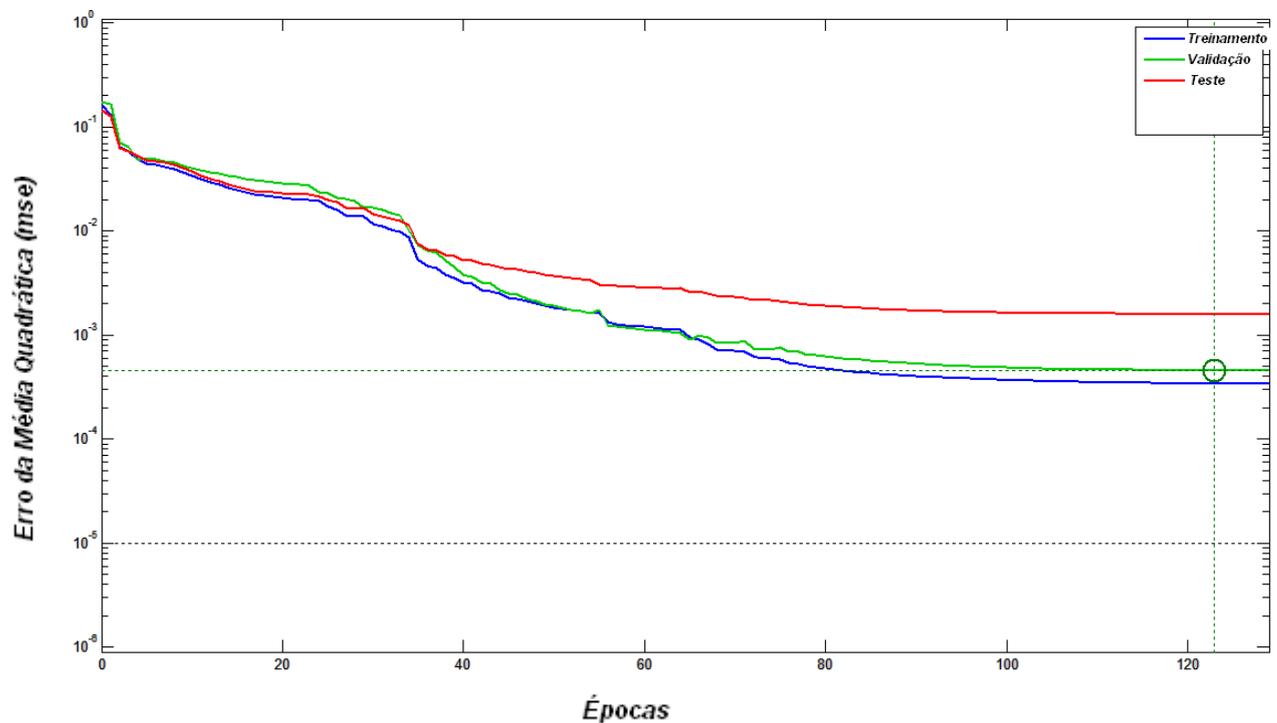


Figura 10. Gráfico mostrando o início da validação da proposta na época 123.

O gráfico da Figura 11 mostra o resultado obtido com a rede neural, onde existe uma boa correlação com a Figura 4, inclusive, com dados fora das curvas nas duas Figuras 4 e 11.

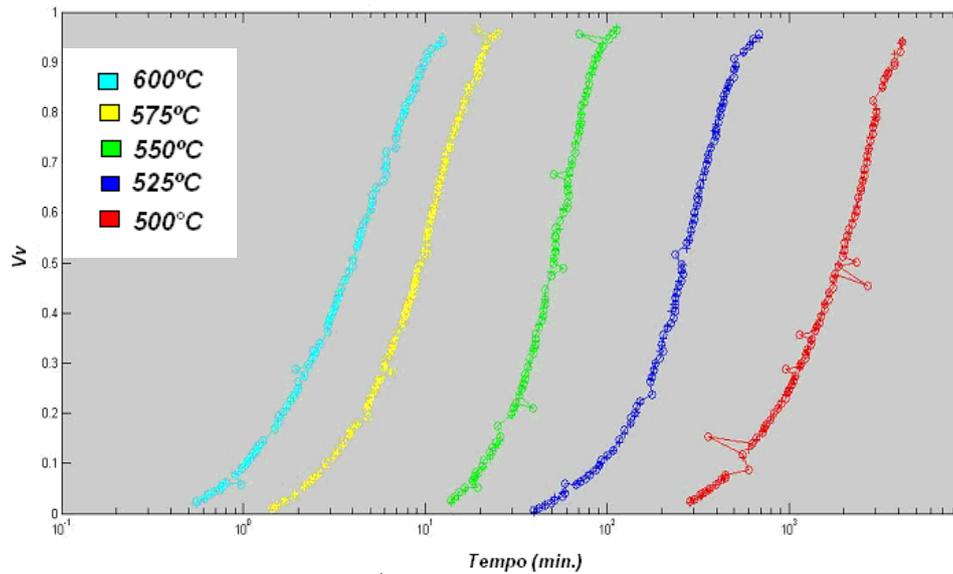


Figura 11. Curvas isotérmicas do ferro puro, com a validação da rede neural, mostrando a fração volumétrica em função do tempo.

A rede neural relativa ao aço IF apresentou uma boa correlação na rede criada (Figura 12), num tempo de processamento de dados para treinamento de 0,4 segundos com a validação ocorrendo após 96 repetições como o que pode ser observado na Figura 13.

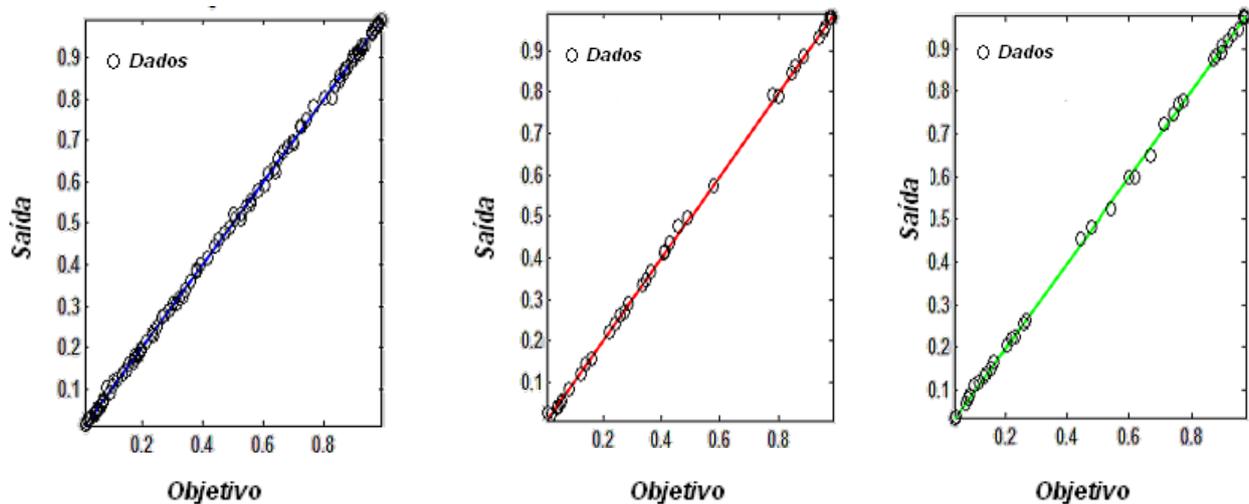


Figura 12. (a) Treinamento; (b) teste; e (c) validação da rede neural para análise do aço IF.

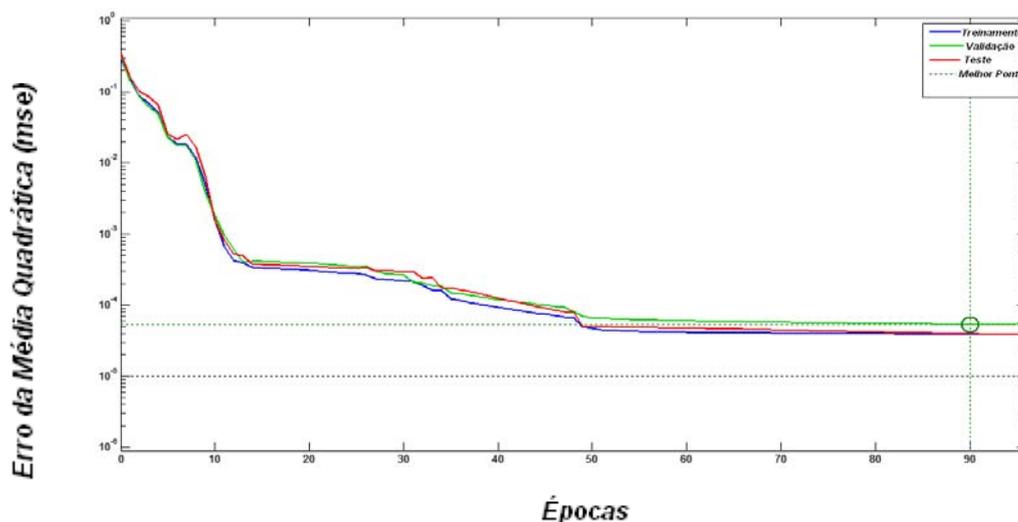


Figura 13. Gráfico mostrando o início da validação da proposta na época 96.

O gráfico da Figura 14 mostra o resultado obtido com a rede neural e tem uma ótima concordância com a Figura 5.

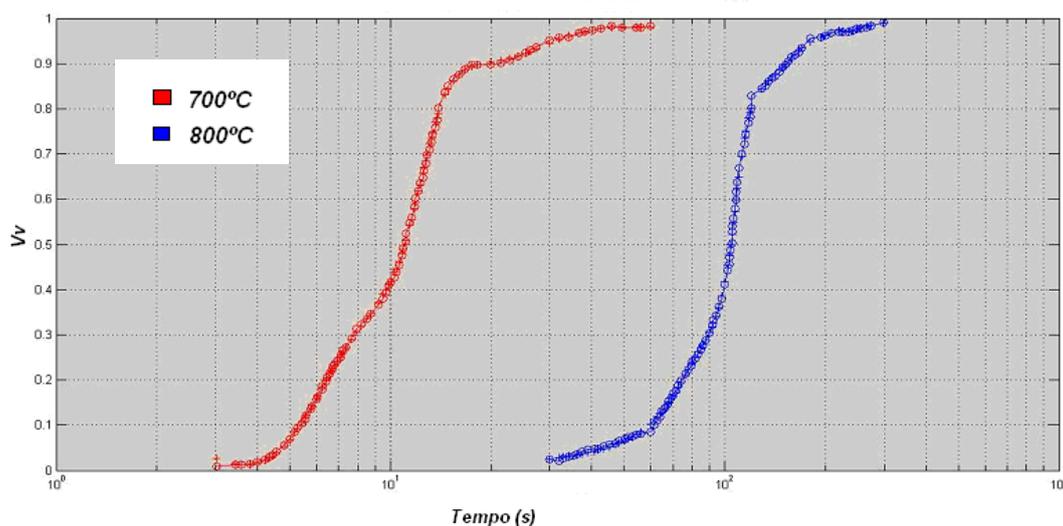


Figura 14. Curvas isotérmicas do aço IF, com a validação da rede neural, mostrando a fração volumétrica em função do tempo.

4 CONCLUSÃO

Os resultados obtidos para este estudo demonstram que o uso de uma rede neural é uma ferramenta possível para se fazer a simulação da fração recristalizada em função do tempo. O próximo passo que está sendo implementado é aplicação de uma RN aos dados da fração volumétrica recristalizada em função do tempo para um aço IF (*Interstitial Free*), após a laminação a frio e posterior ao recozimento. O Laminador de Tiras a Frio nº3 da Companhia Siderúrgica Nacional servirá como base de estudo e fonte de dados. Os modelos construídos servirão de referência para a construção desta nova rede que permitirá uma previsão dos parâmetros ótimos do processo necessários para produzir uma microestrutura recristalizada,

Agradecimentos

Agradecemos aos órgãos: Faperj, CNPQ e a Capes, pelo grande apoio no desenvolvimento deste trabalho e no incentivo a pesquisa.

REFERÊNCIAS

- 1 CARVALHO, C. R. G.; “Estudo da Cinética de Recristalização num Aço IF Estabilizado ao Titânio com Adição e Silício.” – Dissertação de Mestrado, FAENQUIL, Lorena, 2004 pp. 28-33.
- 2 SILVA FILHO, M. C.; LINS, J. F. C.; RIOS, P. R.; BOTT, I. S.; BALDAM, C. A.; Estudo da Cinética de Recristalização de um aço microligado processado via ARB, Tecnologia em Metalurgia e Materiais, 2009, p. 114.
- 3 HAYKIN, Simon, Redes Neurais Princípios e Práticas. São Paulo, Editora Bookman – 2007.
- 4 RAGHUNATHAN, N.; ZAIDI, M. A.; SHEPPARD, T.; Materials Science and Technology 2, pp. 938-945, 1986;
- 5 VANDERMEER, R. A.; RATH B. B. Microstructural Modeling of Recrystallization in Deformed Iron Single Crystals, Metallurgical Transactions, Volume 20A, 1989, pp.1933-1935.
- 6 TSE Y. Y.; DUGGAN B. J. Orientation Imaging Microscopy Studies of Recrystallization in Interstitial-Free Steel, Metallurgical and Materials Transactions, Volume 37A, 2006, pp. 1055-1057.