

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL PARA PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS DE AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA MICROLIGADOS

Hiroshi Jorge Takahashi ¹
Gláucio Bórtoli da Cruz Rabelo ²
Roselito de Albuquerque Teixeira ³

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, as técnicas de inteligência computacional têm 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: Rede neural artificial; Sistema híbrido; Aço microligado; Propriedades mecânicas.

USING OF COMPUTATIONAL INTELLIGENCE METHODS FOR MECHANICAL PROPERTIES PREDICTION OF HSLA STEELS

Abstract

The attainment of desired mechanical properties is a crucial aspect for steelmaking industries. Traditional physical modeling approaches have not been satisfactory, due to the complicated nature of the processes, very complex and multidimensional ones. 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 steelworks in Brazil.

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

I 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 árdua.⁽¹⁾ Para a predição das propriedades mecânicas à tração de aços, em particular limite de escoamento (LE), limite de resistência (LR) e alongamento total (ALO), apenas o conhecimento físico disponível dos processos não permite a construção de modelos fenomenológicos confiáveis.⁽²⁾

Dessa forma, técnicas de inteligência computacional têm sido propostas como alternativas viáveis. Uma rede neural do tipo *Multilayer Perceptron* (MLP) mostrou-se capaz de realizar com precisão a predição de propriedades mecânicas de tiras de aço⁽³⁾ e 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 por meio de um sistema de inferência nebulosa por Datta e Banerjee.⁽⁴⁾

Segundo Jones, Watton e Brown,⁽⁵⁾ 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 também a possibilidade da otimização da composição química e dos parâmetros de processo. Myllykoski, Larkiola e Nylander⁽¹⁾ complementam ainda com o suporte para realização de ações de feed forward nos diversos processos da cadeia de produção e Golodnikov et al.⁽⁶⁾ comenta a redução do tempo e volume de produção experimental envolvidos no projeto de aços.

¹Membro da ABM, Engenheiro Eletricista, M.C. Unileste, Superintendência de Instrumentação e Automação da Usiminas, Av. Pedro Linhares Gomes, 5431, Bairro Usiminas, CEP 35160-900, Ipatinga, MG, Brasil, e-mail: htakahashi@usiminas.com.br

²Membro da ABM, Engenheiro Mecânico, M.C., UFMG, CQE/CQA, Superintendência de Metalurgia e Garantia da Qualidade da Usiminas, Av. Pedro Linhares Gomes, 5431, Bairro Usiminas, CEP 35160-900, Ipatinga, MG, Brasil, e-mail: grabelo@usiminas.com.br

³Engenheiro Eletricista, Dr., Professor do Departamento de Engenharia Elétrica da Unileste, Coronel Fabriciano, Av. Presidente Tancredo de Almeida Neves, 3500, Bairro Caladinho, CEP 35170-056, e-mail: roselito@unilestemg.br

1.1 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.

1.2 Redes Neurais Artificiais e Sistemas Híbridos Neuro-Fuzzy

As redes neurais artificiais 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.⁽⁷⁾

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 superajustada 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 subajuste ou *underfitting*. Existem na literatura várias estratégias que objetivam soluções com elevada capacidade de generalização.^(8,10,11)

As RNAs apresentam limitações, por exemplo, a maneira pela qual o conhecimento é representado.

A modelagem *Fuzzy*, baseada na teoria de conjuntos nebulosos proposta por Zadeh,⁽¹²⁾ apesar de largamente aplicada também apresenta algumas desvantagens.⁽¹³⁾

Com a perspectiva de superar as limitações apresentadas pelos sistemas *Fuzzy* e pelas RNAs, várias propostas têm sido realizadas.⁽¹⁴⁾ Os sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*, segundo Jang, Sun e Mizutani⁽¹⁵⁾ 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.

2 MATERIAL E MÉTODOS

Os aços HSLA foram selecionados, para este trabalho, em função da alta disponibilidade de dados e do sólido conhecimento dos metalurgistas em relação a este tipo de aço.

Na seleção das variáveis de entrada foram levados em consideração os trabalhos de Myllykoski, Larkiola, e Nylander;⁽¹⁾ Chen e Linkens,⁽¹⁶⁾ Tenner et al.,⁽¹⁷⁾ Yang e Linkens⁽¹⁸⁾ e Golodnikov et al.⁽⁶⁾ Foram selecionadas 20 variáveis de dois grupos distintos: composição química e parâmetros dos processos. A Tabela I apresenta estas variáveis.

Para localizar e expurgar os dados inconsistentes foram empregadas a análise estatística e as técnicas para detecção automática de outliers distância de Mahalanobis⁽¹⁹⁾ e *Replicator neural network* (RNN).⁽²⁰⁾

Foram desenvolvidas RNAs com uma camada intermediária, utilizando o algoritmo de treinamento por retropropagação do erro⁽⁷⁾ e objetivando soluções com alta capacidade de generalização foram aplicadas as técnicas de *Early Stopping*,⁽⁸⁾ Regularização Bayesiana,⁽⁹⁾ algoritmo de *Pruning Optimal Brain Surgeon*⁽¹⁰⁾ e o método *Ensemble Modelling*.⁽¹¹⁾

Os sistemas híbridos *Neuro-fuzzy* desenvolvidos foram baseados na arquitetura ANFIS (*Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System*) proposta por Jang,⁽¹³⁾ que mantém as características básicas dos sistemas *fuzzy* mas têm incorporadas as propriedades de adaptação das RNAs.

2.1 Aços de Alta Resistência Microligados

Os aços HSLA apresentam, usualmente, limite de escoamento entre 250 MPa e 650 MPa, desenvolvidos a partir da adição de microligantes, onde se destacam o Nb, o Ti e o V, que têm a finalidade de elevar o nível de resistência mecânica.⁽²¹⁾

As propriedades mecânicas dos aços HSLA laminados a frio e recozidos são determinadas não só pela composição química, mas também pelos parâmetros de processamento tais como a redução a frio, temperatura de recristalização no recozimento e deformações no passe de encruamento. Estes principais parâmetros influenciam diretamente na microestrutura e nas propriedades mecânicas destes aços.⁽²¹⁾

2.2 Desenvolvimento dos Modelos

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

Tabela 1. Variáveis de entrada.

Grupo	Variável	Unidade
Composição química	C	% em massa
	Mn	
	Nb	
	P	
	S	
	Al	
	N	
	Ti	
Dados de processo	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 de aquecimento - RTF	°C
	Temperatura do forno de encharque - SF	°C
	Temperatura do forno de resfriamento lento - SCF	°C
	Temperatura do forno de resfriamento a jato - JCF	°C
	Carga de laminação	tf
	Alongamento no encruamento	%
	Velocidade da tira	m/min

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 Mazzatorta et al.⁽²²⁾ e Jones, Watton, e Brown.⁽⁵⁾

No treinamento das RNAs, pela rapidez na convergência, foi utilizado o algoritmo de otimização proposto por Levenberg Marquardt (LM)⁽⁵⁾ 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.

Tabela 2. Resumo dos resultados das implementações de RNAs.

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

^aO treinamento foi iniciado com 41 neurônios na camada intermediária.

Os sistemas híbridos *Neuro-fuzzy* foram gerados a partir da função *genfis2*, que realiza o agrupamento dos dados, visando 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*.

3 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, por meio de RNAs (*única* e *ensemble*) e sistemas híbridos *Neuro-fuzzy*.

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

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

Observa-se na Tabela 4 que, de maneira geral, os modelos apresentam 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,⁽¹⁸⁾ 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, Watton, e Brown.⁽⁵⁾

3.1 Ferramenta *Off-line* para Predição de Propriedades Mecânicas

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, por meio de uma interface gráfica, realizar a predição das propriedades mecânicas de aços HSLA dados a composição química e os parâmetros de processo.

A Figura 1 apresenta a interface da ferramenta de predição de propriedades mecânicas para aços HSLA.

Figura 1. Interface gráfica da ferramenta de predição de propriedades mecânicas.

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	Ensemble	162,87 MPa	0,94
	Neuro-fuzzy	-	213,22 MPa	0,93
LR	RNA	Regularização	102,55 MPa	0,97
	RNA	Ensemble	89,26 MPa	0,97
	Neuro-fuzzy	-	104,93 MPa	0,97
ALO	RNA	Regularização	4,08%	0,81
	RNA	Ensemble	3,49%	0,84
	Neuro-fuzzy	-	4,16%	0,80

4 CONCLUSÃO

As técnicas de inteligência computacional investigadas para a predição de propriedades mecânicas mostraram-se 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 por simulações que não envolverão os custos e prazos de experiências conduzidas em escala industrial e suporte para definição de ações de *feed forward*, a partir do conhecimento da composição química real.

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**, v. 60, n. 1, p. 399-404, June 1996.
- 2 MAHFOUF, M.; CHEN, M.; LINKENS, D.A. Design of heat-treated alloy steels using intelligent multi-objective optimization. **ISIJ International**, v. 45, n. 5, p. 694-9, Jan. 2005.
- 3 MYLLYKOSKI, P. A study on the causes of deviation in mechanical properties of thin steel sheets. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 79, n. 1, p. 9-13, July 1998.
- 4 DATTA, S.; BANERJEE, M.K. Fuzzy modelling of strength-composition-process parameter relationships of HSLA steels. **Materials and Manufacturing Processes**, v. 20, n. 5, p.761-776. September 2005.
- 5 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**, v. 32, n. 5, p.435-42, Oct. 2005.
- 6 GOLODNIKOV, A.; MACHERET, Y.; TRINDADE, A. A.; URYASEV, S.; ZRAZHEVSKY, G. Statistical modelling of composition and processing parameters for alloy development. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, v. 13, no. 4, p. 633-44, June 2005.
- 7 Haykin, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*. 2. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1999.
- 8 WEIGEND, A.S.; HUBERMAN, B.; RUMELHART, D.E. Predicting the future: a connectionist approach. **International Journal of Neural Systems**, v. 1, n. 3, p. 193-209, 1990.
- 9 Mackay, D.J.C. Bayesian interpolation. **Neural Computation**, v. 4, n. 3, p. 415-47, May 1992.
- 10 HASSIBI, B.; STORK, D.G.; WOLFF, G.J. Optimal brain surgeon and general network pruning. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEURAL NETWORKS, 1993, San Francisco, CA. **Proceedings...** San Francisco, CA., IEEE Press, 1993. p. 293-9.
- 11 PERRONE, M.P.; COOPER, L.N. When networks disagree: Ensemble methods for hybrid neural networks. In: MAMMONE, J. (editor). **Artificial neural networks for speech and vision**. London: Chapman and Hall, 1993. p. 126-42
- 12 ZADEH, L.A. Fuzzy sets. **Information and Control**, v. 8, n. 3, p. 338-53, June 1965.
- 13 JANG, R.J. Anfis: adaptive-network-based fuzzy inference system. **IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics**, v. 23, n. 3, p. 665-85, May/June 1993.
- 14 ABRAHAM, A. Neuro fuzzy systems: state-of-the-art modeling techniques. **Lecture Notes in Computer Science**, v. 2084, p. 269-76, 2001.
- 15 JANG, R.J.; SUN, C.; MIZUTANI, E. *Neuro-fuzzy and soft computing*. New Jersey: Prentice Hall, 1997.
- 16 CHEN, M. Y.; LINKENS, D.A. Hybrid fuzzy modelling using simulated annealing and application to materials property prediction. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON INTELLIGENT PROCESSING AND MANUFACTURING MATERIALS, 2., Honolulu, 1999. **Proceedings...** New York: IEEE Press, 1999. v. 1, p. 395-400.

- 17 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**, v. 28, n. 1, p. 15-22, Feb. 2001.
- 18 YANG, Y.; LINKENS, D.A. Steel yield strength prediction using ensemble model - performance improvement over single neural network model. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON INTELLIGENT PROCESSING AND MANUFACTURING OF MATERIALS, 3., Richmond, 2001. **Proceedings...** [S.l.]: CRC Press, 2001. v. 1, p. 335-46.
- 19 JARREL, M.G. A comparison of two procedures, the Mahalanobis distance and the Andrews-Pregibon statistic, for identifying multivariate outliers. **Research in the Schools**, v. 1, n. 1, p. 49-58, 1994.
- 20 HAWKINS, S.; HE, H.; WILLIAMS, G.J.; BAXTER, R.A. Outlier detection using replicator neural networks. **Lecture Notes in Computer Science**, v. 2454, p. 170-80, Sept. 2002.
- 21 FERNANDES, R.C. O efeito da temperatura de encharque no recozimento contínuo e das deformações na laminação de encruamento sobre as propriedades mecânicas de um aço microligado laminado a frio. 2007. 93 p. (Dissertação de Mestrado - Engenharia Metalúrgica e de Minas) – Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2007.
- 22 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**, v. 43, n. 2, p.513-8. Mar. 2003.

Recebido em: 12/05/08

Aceito em: 14/10/2008

Proveniente de: SEMINÁRIO DE AUTOMAÇÃO DE PROCESSOS, 11., 2007, Porto Alegre, RS. São Paulo: ABM, 2007.