

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
Escola de Engenharia

Departamento de Metalurgia

APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA PARA A PREVISÃO DE DUREZA  
EM LIGAS FERROSAS SUBMETIDAS AO TRATAMENTO  
TÉRMICO DE REVENIMENTO

**Róger Schütz Sauer**

Trabalho de Diplomação

Orientador: Professor Dr. Antonio Shigueaki Takimi

Coorientador: Professor Dr. Luan Fonseca Garcia

Porto Alegre

2023

### CIP - Catalogação na Publicação

Sauer, Róger  
APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA PARA A PREVISÃO  
DE DUREZA EM LIGAS FERROSAS SUBMETIDAS AO TRATAMENTO  
TÉRMICO DE REVENIMENTO / Róger Sauer. -- 2023.  
83 f.  
Orientador: Antonio Shigueaki Takimi.

Coorientador: Luan Fonseca Garcia.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) --  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de  
Engenharia, Curso de Engenharia Metalúrgica, Porto  
Alegre, BR-RS, 2023.

1. revenimento. 2. dureza. 3. aço. 4. ferro  
fundido. 5. aprendizado de máquina. I. Shigueaki  
Takimi, Antonio, orient. II. Fonseca Garcia, Luan,  
coorient. III. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UFRGS com os  
dados fornecidos pelo(a) autor(a).



Dedico este meu trabalho de conclusão de curso a toda a minha família. Especialmente ao meu pai, Mauro Antônio Sauer, e à minha mãe, Nícias Dória Martins Schütz Sauer, de quem aprendi os valores morais mais importantes para a minha vida.

## AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador neste trabalho de conclusão de curso, o Professor Doutor Antônio Takimi, pela sua disponibilidade incansável comigo.

Ao meu coorientador neste trabalho, o Professor Doutor Luan Fonseca Garcia, e grande especialista da área de inteligência artificial.

À empresa GREFORTEC Fornos Industriais e Tratamento Térmico Ltda. pelas amostras de aço e de ferro fundido fornecidas e ao seu diretor de operações, o Engenheiro Alexandre Pinto Trindade, pelo apoio junto à equipe da GREFORTEC na realização dos ensaios de revenimento e de dureza no laboratório da empresa.

Ao laboratório LAMEF da UFRGS pelas análises de composições químicas realizadas nas amostras de aço ensaiadas no presente trabalho.

Aos cidadãos brasileiros que financiaram com o pagamento dos seus impostos a minha graduação.

Em deferência a isso, a elaboração deste meu trabalho de conclusão de curso representa minha maneira pessoal de tentar enriquecer o nosso país e retribuir o seu investimento público dedicado à educação com o ensino superior.

Desejo que este meu trabalho de conclusão de curso incite novas ideias e com elas traga soluções inovadoras para a pesquisa, para a indústria e para o mercado brasileiro.

Sinto-me honrado de ter trilhado este caminho de graduação em engenharia metalúrgica dentro da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Por fim, tenho profunda gratidão a todos que fizeram parte dessa história de muitas conquistas da UFRGS e que foram fundamentais para eu chegar até aqui com este meu trabalho de conclusão de curso.

Meu “muito obrigada”, da fundura do meu coração, a todos vocês!

Com carinho,  
Róger Schütz Sauer

## SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	VIII
LISTA DE TABELAS	IX
RESUMO	X
ABSTRACT	XI
1.0 INTRODUÇÃO.....	1
2.0 OBJETIVO.....	5
2.1 Objetivo geral.....	5
2.2 Objetivos específicos.....	5
3.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
3.1 Tratamentos térmicos.....	6
3.1.1 Tratamento térmico de têmpera para aços.....	6
3.1.1.1 Têmpera em soluções aquosas poliméricas.....	7
3.1.2 Tratamento térmico de revenimento para aços.....	8
3.1.2.1 Efeito nas propriedades mecânicas.....	8
3.1.2.2 Efeito do carbono no revenido.....	9
3.1.2.3 Efeito dos elementos de liga no revenido.....	10
3.1.2.4 Endurecimento secundário no revenido.....	11
3.1.2.5 Microestrutura e transformações no revenido de aços temperados: uma análise detalhada.....	11
3.1.2.6 Fragilização de aços temperados e revenidos.....	12
3.1.3 Tratamento térmico de têmpera e revenido para ferros fundidos.....	13
3.2 Ensaio de dureza.....	14
3.3 Ensaio de espectrometria por emissão óptica por centelha.....	15
3.4 Inteligência artificial e aprendizado de máquina.....	15
3.4.1 Aprendizado de máquina supervisionado e não supervisionado.....	16
3.4.2 O <i>trade-off</i> entre precisão de previsão e interpretabilidade do modelo no aprendizado de máquina.....	16
3.4.3 Avaliação de algoritmos de aprendizado de máquina de previsão numérica.....	18
3.4.4 <i>K-fold cross-validation</i> : uma técnica essencial para estimar o erro de previsão em modelos de aprendizado de máquina.....	20
3.4.5 O <i>trade-off</i> entre viés e variância no aprendizado de máquina.....	21
3.4.6 Plataforma de mineração de dados WEKA.....	22

4.0 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL.....	24
4.1 Seleção e preparação das amostras das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50.....	24
4.2 Realização do tratamento térmico de têmpera e revenido nas amostras das ligas ferrosas.....	24
4.3 Medição da dureza obtida nas amostras das ligas ferrosas.....	25
4.4 Medição e estimativa da composição química das amostras das ligas ferrosas.....	25
4.5 Compilação dos dados experimentais de revenimento da literatura.....	26
4.6 Aplicação de algoritmos de aprendizado de máquina para a previsão de dureza em ligas ferrosas após o tratamento térmico de revenimento.....	29
5.0 RESULTADOS.....	40
6.0 DISCUSSÕES.....	48
7.0 CONCLUSÕES.....	56
8.0 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	57
9.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	58
ANEXO A - 22 regras ( <i>rules</i> ) geradas pelo algoritmo M5.Rules para o cálculo da dureza final utilizando a abordagem 1 no seu treinamento.....	60
ANEXO B - 14 regras ( <i>rules</i> ) geradas pelo algoritmo M5.Rules para o cálculo da dureza final utilizando a abordagem 2 no seu treinamento.....	68

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Efeito do revenido nas propriedades mecânicas do aço SAE 4330.	8
Figura 3.2	Mudanças de dureza durante o revenido em aços ao carbono com até 0,4% em massa de carbono.	10
Figura 3.3	Ciclos típicos de têmpera e revenido para os ferros fundidos cinzento e nodular.	14
Figura 3.4	Uma representação da compensação entre flexibilidade e interpretabilidade, utilizando diferentes algoritmos de aprendizado de máquina.	17
Figura 3.5	Medidas de erro para avaliar o sucesso de um algoritmo de predição numérica.	18
Figura 3.6	Medidas de desempenho para quatro modelos de previsão numérica.	20
Figura 3.7	Técnica de validação cruzada <i>5-fold cross-validation</i> em que os dados foram divididos em 5 partes de tamanhos aproximadamente iguais.	21
Figura 4.1	Interface de entrada do software WEKA.	32
Figura 4.2	Seção “Weka Explorer”.	32
Figura 4.3	Importação da base de dados no formato .csv para a plataforma da WEKA.	33
Figura 4.4	Remoção dos atributos “Fonte” e “Tipo do aço” da base de dados importada para a plataforma da WEKA.	34
Figura 4.5	Nomes dos 16 atributos utilizados no conjunto de dados para a abordagem N° 2 de treinamento dos modelos na plataforma da WEKA.	35
Figura 4.6	Aba <i>Classify</i> da seção “Weka Explorer”.	35
Figura 4.7	Resultado do desempenho do algoritmo rules.M5Rules no conjunto de dados de treinamento na WEKA.	36
Figura 4.8	Seleção da opção <i>Supplied test set</i> para aferir o desempenho do algoritmo no conjunto de dados de teste na WEKA.	37
Figura 4.9	Seleção do arquivo do conjunto de dados de teste em formato .csv na WEKA.	37
Figura 4.10	Seleção da opção <i>Re-evaluate model on current test set</i> na WEKA.	38
Figura 4.11	Resultado do desempenho do algoritmo rules.M5Rules no conjunto de dados de teste na WEKA.	39
Figura 5.1	Parâmetros utilizados no algoritmo rules.M5Rules no presente estudo.	47



## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Estimativa da composição química da liga de ferro fundido nodular DIN GGG50 ensaiada no presente trabalho (% em massa).	26
Tabela 5.1	Dureza média das amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após a têmpera e após o revenimento.	40
Tabela 5.2	Medidas de composição química dos aços SAE 1045 e SAE 4140 produzidas em laboratório através do ensaio de espectrometria por emissão óptica (% em massa).	40
Tabela 5.3	Atributos contidos na base de dados utilizada na presente pesquisa com seus respectivos valores máximo, mínimo, médio e desvio padrão.	41
Tabela 5.4	Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados de treinamento.	42
Tabela 5.5	Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste da liga de aço SAE 1045.	44
Tabela 5.6	Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste da liga de aço SAE 4140.	45
Tabela 5.7	Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste da liga de ferro fundido DIN GGG50.	46
Tabela 6.1	Predições de dureza do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 2 (conjunto de dados com 16 atributos) para as amostras da liga SAE 1045 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45 min.	48
Tabela 6.2	Predições de dureza do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos) para as amostras da liga SAE 4140 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45 min.	49
Tabela 6.3	Predições de dureza do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos) para as amostras da liga DIN GGG50 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45 min.	50
Tabela 6.4	Influência dos atributos para o cálculo da previsão da dureza final realizado pelo algoritmo M5.Rules.	52

## RESUMO

Os resultados dos processos de alívio de tensões e revenimento estão condicionados à temperatura e ao tempo do procedimento, os quais podem ser relacionados através de parâmetros como o de Holloman-Jaffe ou o de Larson-Miller. Esses parâmetros quantificam o efeito térmico do processo na transformação metalúrgica do aço durante o revenimento. Processos que compartilham o mesmo valor do parâmetro de revenimento são esperados para produzir efeitos semelhantes, como na dureza do material. Ao se sustentar nas limitações desses parâmetros de revenido vigentes, esta pesquisa tem por objetivo investigar na plataforma de mineração de dados WEKA o algoritmo de aprendizado de máquina com o melhor desempenho para a previsão da propriedade mecânica de dureza das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 submetidas a um tratamento térmico de revenimento. Para atingir este objetivo uma base de dados foi montada, contendo um total de 21.041 registros de dados experimentais de revenimento compilados da literatura metalúrgica, obtidos de aços ao carbono e de aços de baixo teor em liga, envolvendo tempo e temperatura de revenido, composição química dos aços (em % de massa dos elementos químicos C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al e Cu) e suas durezas pós têmpera e pós revenido. Foram avaliadas a aplicabilidade de 28 algoritmos de aprendizado de máquina em suas capacidades de previsões de dureza em ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após o tratamento térmico de revenimento. Para isso, foram empregadas 2 metodologias de ajuste dos modelos (algoritmos de aprendizado de máquina), no que resultou em 56 testes de validação para cada uma das 3 ligas ferrosas ensaiadas no presente trabalho. Por fim, o algoritmo de aprendizado de máquina M5.Rules despontou como destaque dentre os 28 algoritmos da WEKA aplicados nesta pesquisa para a previsão da propriedade mecânica de dureza das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após o tratamento térmico de revenimento.

**Palavras-chave:** revenimento, dureza, aço, ferro fundido, aprendizado de máquina

## ABSTRACT

The results of stress relief and tempering processes are conditioned to the temperature and time of the procedure, which can be related through parameters such as Holloman-Jaffe or Larson-Miller. These parameters quantify the thermal effect of the process on the metallurgical transformation of steel during tempering. Processes that share the same tempering parameter value are expected to produce similar effects, such as on material hardness. Based on the limitations of these current tempering parameters, this research aims to investigate, on the WEKA data mining platform, the machine learning algorithm with the best performance for predicting the mechanical property of hardness of ferrous alloys SAE 1045, SAE 4140 and DIN GGG50 subjected to a tempering heat treatment. To achieve this objective, a database was set up, containing a total of 21,041 records of experimental tempering data compiled from the metallurgical literature, obtained from carbon steels and low-alloy steels, involving tempering time and temperature, chemical composition of steels (in weight % of chemical elements C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al and Cu) and their hardness after quenching and after tempering. The applicability of 28 machine learning algorithms in their ability to predict hardness in ferrous alloys SAE 1045, SAE 4140 and DIN GGG50 after tempering heat treatment was evaluated. For this, 2 model adjustment methodologies (machine learning algorithms) were used, which resulted in 56 validation tests for each of the 3 ferrous alloys tested in this work. Finally, the M5.Rules machine learning algorithm emerged as a highlight among the 28 WEKA algorithms applied in this research to predict the mechanical hardness property of ferrous alloys SAE 1045, SAE 4140 and DIN GGG50 after tempering heat treatment.

**Keywords:** tempering, hardness, steel, cast iron, machine learning

## 1.0 INTRODUÇÃO

Os tratamentos térmicos são procedimentos industriais destinados à alteração das propriedades mecânicas de ligas ferrosas, como o aço e o ferro fundido. Essas operações envolvem o aquecimento do componente metálico a uma temperatura específica, a manutenção nessa temperatura por um período determinado e, subsequentemente, o resfriamento sob condições apropriadas. A finalidade primordial dessa técnica é promover mudanças nas propriedades mecânicas do material por meio de transformações em sua microestrutura (PENHA, 2010).

Na especificação do tratamento de revenimento necessário para uma determinada peça de aço, por exemplo, é vantajoso não ter que a revenir em várias temperaturas pelo desperdício do tempo, que deve ser reduzido nas operações comerciais. Ter a capacidade de calcular o tempo necessário para atingir a dureza desejada sem a necessidade de testes práticos seria extremamente conveniente.

A ausência de testes práticos poderia resultar em significativa redução de custos para as empresas. Isso englobaria a economia de energia térmica que seria consumida durante tais testes, a eliminação da necessidade de mão de obra para a inspeção dos ensaios e a redução dos desperdícios de material empregado nessas avaliações. Além disso, a ausência de ensaios práticos poderia viabilizar o aumento da receita financeira das empresas, também, que dedicariam mais do seu tempo às suas operações comerciais de revenimento, notadamente.

Na literatura metalúrgica, é comum encontrar gráficos de revenimento que estabelecem uma correlação entre a dureza e a temperatura de revenido para um único intervalo de tempo, normalmente de 1 hora. Entretanto, na prática, os tempos de revenido frequentemente variam, destacando a necessidade de um método para converter as curvas de revenimento de um determinado tempo para outro.

Diante desse desafio, Hollomon e Jaffe propuseram uma abordagem crucial ao unir os efeitos da temperatura e do tempo de revenido em um único parâmetro funcional denominado de "parâmetro de revenido". Essa simplificação se mostrou essencial e foi aplicada para criar uma análise abrangente dos efeitos da relação tempo-temperatura no processo de revenimento do aço.

Consequentemente, tornou-se viável ajustar tanto o tempo quanto a temperatura de revenido no processo de revenimento do aço utilizando o parâmetro de revenido, expresso como  $T \times (c + \log t)$ , em que “T” representa a temperatura em Kelvin, “t” é o tempo em horas para uma condição isotérmica e “c” denota uma constante específica do material. Isso implica que, em uma dada liga de aço, é possível escolher tratamentos de revenido com tempos diferentes de 1 hora para alcançar uma dureza específica. É importante notar que, embora o parâmetro de revenido possa ser aplicado com êxito a aços ao carbono, é preciso agir com cautela ao utilizá-lo em aços que apresentam endurecimento secundário (REGULY et al., 2014).

Além disso, o artigo “Uma visão geral histórica dos parâmetros de revenido” de Totten et al. (2008) discorre sobre outros parâmetros de revenido além da clássica equação de Holloman-Jaffe, como por exemplo o parâmetro de Larson-Miller. Nessa pesquisa são apresentadas algumas limitações desses parâmetros. Conceitualmente é enfatizado que esses parâmetros são uma medida do efeito térmico do processo na transformação metalúrgica do aço durante o revenimento e espera-se que os processos que exibem o mesmo parâmetro de revenimento exibam o mesmo efeito (como dureza). No entanto, essas expressões numéricas assumem que o processo de revenimento é isotérmico, o que raramente acontece nos fornos de produção, devido ao período de aquecimento anterior ao encharcamento na temperatura de revenimento desejada. Além disso, na pesquisa são discutidos trabalhos recentes que visam desenvolver relações numéricas mais precisas para descrever o processo de revenimento.

Penha (2010) na tese de doutorado “Modelagem do processo de revenimento por redes neurais”, por exemplo, teve como um dos seus objetivos projetar redes neurais, um determinado algoritmo de aprendizado de máquina, capazes de prever a dureza para aços revenidos em diversas condições de tempo e temperatura. A base de dados utilizada para construir a rede neural de dureza foi composta por dados obtidos experimentalmente durante o trabalho (247 instâncias de dados, em que cada instância de dado representa um ensaio de revenimento) juntamente com parte dos dados experimentais (266 instâncias de dados) obtidos por Grange (1956), totalizando um conjunto de dados de 513 instâncias e com uma variabilidade de 10 classes distintas de aços com composição química diferente entre si. Assim, visto que o conjunto de dados utilizado por Penha (2010) continha 11 atributos analisados (em que cada atributo representa um parâmetro do processo de revenimento ou uma característica do material tratado termicamente), a estimativa é que o conjunto de dados aplicado nessa pesquisa tenha sido composto por um total de 5.643 registros de dados (513 ensaios de revenimento x 11 atributos analisados em cada ensaio de revenimento).

O primeiro obstáculo na modelagem dos processos de aços é a obtenção de uma base de dados substancial. As variáveis nos processos de manufatura em metalurgia são intrincadas e frequentemente desafiadoras de coletar. Além disso, é extremamente complicado obter um conjunto de dados ou informações que abranjam minúcias como micro-inclusões ou trincas, sendo essencial destacar que certas propriedades são afetadas por fatores intrínsecos, como inclusões, segregações e tamanho de grão, que podem variar de corrida para corrida numa liga metálica (PENHA, 2010).

Em outro estudo mais recente intitulado “Previsão da dureza da martensita revenida incorporando o parâmetro de revenimento dependente da composição em aços de baixa liga” de Kang (2014), foi investigado um parâmetro de revenimento dependente da composição química para prever a dureza da martensita revenida em aços de baixa liga com maior precisão. A base de dados utilizada para essa investigação foi composta por 1.926 instâncias de dados (ensaios de revenimento), todos obtidos de referências bibliográficas metalúrgicas. Assim, visto que o conjunto de dados utilizado nessa pesquisa continha 9 atributos analisados (em que cada atributo representa um parâmetro do processo de revenimento ou uma característica do material tratado termicamente), a estimativa é que ele tenha sido composto por um total de 17.334 registros de dados (1926 ensaios de revenimento x 9 atributos analisados em cada ensaio de revenimento).

Apesar do conjunto de dados dessa pesquisa de Kang (2014) ser mais robusto em quantidade de dados registrados e com uma variabilidade maior de classes distintas de aços em relação ao de Penha (2010), é importante ressaltar outra característica essencial na construção de um conjunto de dados para ser empregado no modelamento de algoritmos de aprendizado de máquina sobre a qual a base de dados de Kang (2014) poderia ser questionada: a exatidão dos dados registrados.

Outra melhoria na composição do conjunto de dados utilizado na pesquisa de Kang (2014) poderia ser a inclusão dos dados obtidos experimentalmente por Penha (2010), com 247 instâncias de dados (ensaios de revenimento) que possuem informações detalhadas de composição química das ligas de aço ensaiadas e os valores absolutos das durezas medidas na forma de tabelas. Além disso, na tese de Penha (2010), ainda, na seção “Sugestões para trabalhos futuros” ela indica a ideia de desenvolver um modelo de aprendizado de máquina que considerasse a dureza como temperada como um dado de entrada, o que não foi levado em conta na pesquisa de Kang (2014).

Dentro desse contexto, com o intuito de investigar, em um novo conjunto de dados otimizado em robustez e exatidão de dados em relação ao estado da arte mencionado

composto por Penha (2010) e Kang (2014) aliado a técnicas de aprendizado de máquina para si adequadas, o desempenho de algoritmos de aprendizado de máquina para a previsão da propriedade mecânica de dureza, abrangendo não apenas aços, mas ligas de ferro fundido também, e considerando as limitações existentes dos parâmetros de revenido utilizados na indústria de tratamento térmico, com destaques à ineficácia de sua aplicação para aços que apresentam endurecimento secundário (REGULY et al., 2014) e às condições não isotérmicas encontradas nos fornos de produção (TOTTEN et al., 2008), se justifica a busca por novas soluções para ampliar a compreensão dos fenômenos metalúrgicos envolvidos no processo de revenimento de ligas ferrosas e melhorar o controle do processo.

## 2.0 OBJETIVO

### 2.1 Objetivo geral

Investigar na plataforma de mineração de dados WEKA o algoritmo de aprendizado de máquina com o melhor desempenho para a previsão da propriedade mecânica de dureza das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 submetidas a um tratamento térmico de revenimento.

### 2.2 Objetivos específicos

- Montar uma base de dados, contendo registros de dados experimentais de revenimento de ligas ferrosas compilados da literatura metalúrgica.
- Estudar e avaliar a aplicabilidade de algoritmos de aprendizado de máquina em suas capacidades de predições de dureza em ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após o tratamento térmico de revenimento.



### 3.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1 Tratamentos térmicos

Os tratamentos térmicos são procedimentos industriais destinados à alteração das propriedades mecânicas de ligas ferrosas, como o aço e o ferro fundido. Essas operações envolvem o aquecimento do componente metálico a uma temperatura específica, a manutenção nessa temperatura por um período determinado e, subsequentemente, o resfriamento sob condições apropriadas. A finalidade primordial dessa técnica é promover mudanças nas propriedades mecânicas do material por meio de transformações em sua microestrutura (PENHA, 2010).

Os tratamentos térmicos aplicados em aços abrangem uma ampla faixa de temperaturas, desde tratamentos subzero, que envolvem temperaturas abaixo de 0°C para estabilização, até austenitização de aços rápidos, atingindo temperaturas de até 1280°C (SILVA; MEI, 1988).

Os ferros fundidos, assim como os aços, também podem ser tratados termicamente com o objetivo de melhorar as suas propriedades. O comportamento desses materiais quando submetidos a tais processos é, de um modo geral, idêntico ao que ocorre com os aços, dos quais se distingue pela presença de carbono livre (grafita) (CHIAVERINI, 1990).

##### 3.1.1 Tratamento térmico de têmpera para aços

O tratamento térmico de têmpera em aços visa obter uma microestrutura martensítica, a mais dura possível, requerendo um resfriamento rápido para evitar a formação de ferrita e cementita a partir da austenita. Elementos de liga podem ser incorporados para permitir taxas de resfriamento menos abruptas, especialmente em cenários onde um resfriamento severo possa causar distorção ou fissuração. Essa transformação martensítica envolve o aprisionamento de átomos de carbono em posições intersticiais, causando distorções no retículo cristalino que contribuem para a alta resistência mecânica da martensita (REGULY et al., 2014).

A resposta de um aço à têmpera varia de acordo com sua temperabilidade, que é a suscetibilidade ao endurecimento por resfriamento rápido. Fatores como a habilidade do calor em se difundir na peça e a capacidade do meio de têmpera em remover calor da superfície influenciam as taxas de resfriamento. A seleção adequada do meio de têmpera desempenha um papel crucial no controle da taxa de resfriamento, pois a difusividade térmica dos aços é geralmente independente de sua composição química. O resfriamento diferencial, que envolve variações nas taxas de resfriamento entre a superfície e o centro das peças, pode gerar tensões e distorções, sendo necessário adotar precauções para mitigar essas tensões térmicas (REGULY et al., 2014).

Com relação aos meios de têmpera, Chandler (1995) cita 8 diferentes técnicas convencionais de têmpera para aços: têmpera ao ar, têmpera em água, têmpera em óleo, têmpera em soluções aquosas poliméricas, têmpera com sal fundido, têmpera em salmoura, têmpera em cáustica e têmpera em gás.

### **3.1.1.1 Têmpera em soluções aquosas poliméricas**

Os polímeros aquosos são usados em diversas aplicações, como têmpera de aços, têmpera por indução e têmpera por pulverização, sendo a concentração de polímero determinada pela necessidade de endurecimento da peça. A seleção do polímero depende de fatores como composição do material, tamanho da peça, tipo de forno, sistema de têmpera, método de têmpera e controle de distorção (CHANDLER, 1995).

Cerca de 20 polímeros aquosos diferentes já foram usados em aços para têmpera conforme reportado por Totten et al. (1993). Entre eles, podem ser citados: o álcool polivinílico (PVA), o poliacrilato de sódio (ACR), o polivinilpirrolidona (PVP), o poletil oxazolina (PEO) e o polialquilenoglicol (PAG) que é o mais utilizado hoje.

Esses polímeros têm a característica de solubilidade inversa em água, o que modifica o processo de têmpera convencional, permitindo o controle da taxa de resfriamento. Eles são solúveis em água em temperatura ambiente, mas insolúveis em temperaturas elevadas, formando um filme polimérico ao redor da peça quando ela é mergulhada no banho de têmpera. Esse filme atua como um isolante, retardando o resfriamento. Posteriormente, o filme colapsa, e a peça é resfriada rapidamente. A concentração do polímero, a temperatura do banho e a agitação podem ser ajustadas para controlar a taxa de resfriamento (CHANDLER, 1995).

### 3.1.2 Tratamento térmico de revenimento para aços

Quase todos os aços que foram endurecidos por têmpera são submetidos a um tratamento térmico subcrítico, chamado de revenido ou revenimento, realizado a temperaturas abaixo da temperatura crítica do aço ( $727^{\circ}\text{C}$ ). O resultado desse tratamento é uma estrutura conhecida como martensita revenida, mas que na prática consiste em partículas finas de carbonetos dispersas em uma matriz ferrítica (AMERICAN SOCIETY FOR METALS, 1991).

#### 3.1.2.1 Efeito nas propriedades mecânicas

A seleção das condições de revenido é determinada pelo equilíbrio desejado entre a dureza (resistência) e a tenacidade exigida durante o serviço do aço. A figura 3.1 mostra o efeito da temperatura de revenido na dureza, nas resistências à tração e ao escoamento, no alongamento e na redução na área de um aço SAE 4330 mantido à temperatura por 1 h. Pode-se observar que tanto a dureza quanto a resistência diminuem à medida que a temperatura de revenido aumenta. A ductilidade, medida pelo alongamento ou redução da área, por sua vez, aumenta com a temperatura de revenido. Os aços ao carbono apresentam uma resposta semelhante a essa do aço de baixa teor em liga SAE 4330. (AMERICAN SOCIETY FOR METALS, 1991)

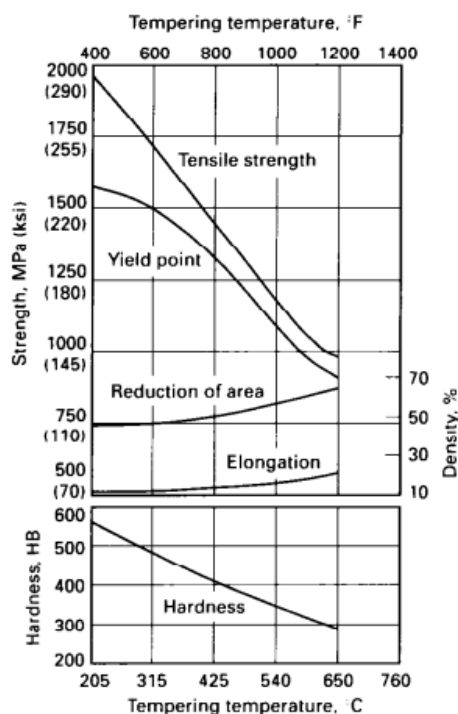


Figura 3.1 Efeito do revenido nas propriedades mecânicas do aço SAE 4330.

Fonte: AMERICAN SOCIETY FOR METALS, 1991.

### 3.1.2.2 Efeito do carbono no revenido

O carbono tem um efeito profundo no comportamento dos aços durante o revenido, por um conjunto de fatores. Primeiramente, a dureza da martensita temperada é amplamente influenciada pelo teor de carbono. A morfologia das ripas de martensita também é afetada, apresentando um plano de hábito  $\{111\}_\gamma$  até teores de carbono até 0,3% em massa, mudando para  $\{225\}_\gamma$  em teores de carbono mais elevados. O aumento do teor de carbono também reduz a temperatura  $M_s$ , diminuindo a probabilidade de ocorrência do auto-revenimento. Durante a têmpera rápida em ligas com menos de 0,2% em massa de carbono, a maior parte (até 90%) do carbono segrega para discordâncias e limites das ripas de martensita, mas com uma têmpera mais lenta ocorre alguma precipitação de cementita. No revenimento subsequente de aços com baixo teor de carbono a temperaturas de até 200°C, ocorre uma maior segregação de carbono, mas nenhuma precipitação é observada. Em circunstâncias normais é difícil detectar tetragonalidade na martensita em aços com menos de 0,2% em massa de carbono, o que pode ser explicado pela rápida segregação do carbono durante a têmpera ou porque  $M_s$  excede a temperatura de ordem Zener (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

As mudanças de dureza durante o revenido também são muito dependentes do teor de carbono, em destaque como mostrado na figura 3.2 para aços ao carbono com até 0,4% em massa de carbono. Acima dessa concentração, um aumento na dureza foi observado na faixa de temperatura de 50 a 150°C, conforme a precipitação de  $\epsilon$ -carboneto fortalece a martensita. No entanto, a tendência geral é um amolecimento (redução da dureza) à medida que a temperatura de revenido aumenta. A figura indica também os principais processos físicos que contribuem para a mudança nas propriedades mecânicas dos aços ao carbono no revenido (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

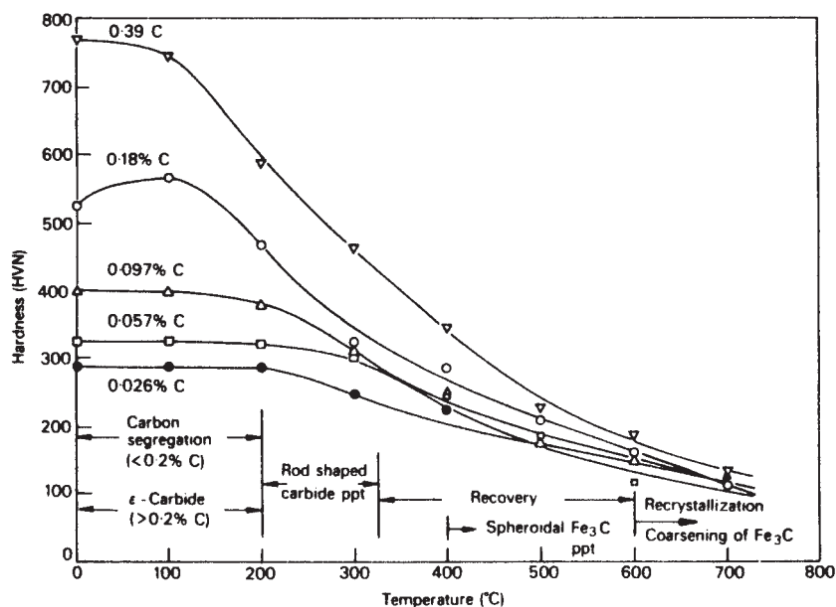


Figura 3.2 Mudanças de dureza durante o revenido em aços ao carbono com até 0,4% em massa de carbono.

Fonte: BHADESHIA, 2006.

### 3.1.2.3 Efeito dos elementos de liga no revenido

A adição de elementos de liga ao aço tem como principal objetivo aumentar a capacidade de endurecimento (capacidade de formação de martensita após o resfriamento acima de sua temperatura crítica). Esses elementos de liga têm o efeito geral de retardar a taxa de amolecimento durante o revenimento, especialmente em temperaturas mais elevadas. Portanto, para atingir uma determinada dureza em um período de tempo específico, os aços de liga exigem temperaturas de revenimento mais altas do que os aços carbono (CHANDLER, 1995).

Elementos de liga podem ser classificados como formadores de carbonetos ou não formadores de carbonetos, com alguns deles, como níquel, silício, alumínio e manganês, permanecendo em solução na ferrita e tendo apenas um efeito menor na dureza temperada. Outros elementos formadores de carbonetos, como cromo, molibdênio e vanádio, retardam o processo de amolecimento através da formação de carbonetos de liga. Além disso, elementos como fósforo, níquel e silício contribuem para o fortalecimento por solução sólida. O manganês é o mais eficaz em aumentar a dureza em temperaturas de revenimento mais altas. E finalmente, elementos de liga afetam o alívio de tensões residuais, a resistência à fratura durante o resfriamento e a ductilidade e tenacidade do aço. Elementos residuais como estanho, fósforo, antimônio e arsênio são conhecidos por causar fragilização (CHANDLER, 1995).

### **3.1.2.4 Endurecimento secundário no revenido**

O endurecimento secundário no revenido é um processo no qual certos elementos de liga formam carbonetos de liga em aços, resultando em um aumento significativo na resistência do aço quando revenidos a temperaturas específicas. Esse fenômeno é fundamental para o desenvolvimento de aços de alta resistência em várias aplicações (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

Alguns elementos de liga comuns em aços, como cromo, molibdênio, vanádio, tungstênio e titânio, têm a capacidade de formar carbonetos que são termodinamicamente mais estáveis do que a cementita, que é o carboneto de ferro. Isso significa que esses elementos de liga têm maior afinidade por carbono e podem formar carbonetos em aços (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

No entanto, a formação de carbonetos de liga não ocorre até que a temperatura alcance a faixa de 500°C a 600°C, pois, abaixo dessa temperatura, os elementos de liga metálicos não podem se difundir rapidamente o suficiente para permitir a nucleação e o crescimento dos carbonetos de liga. Isso ocorre porque o carbono e o nitrogênio se difundem intersticialmente na matriz de ferro, enquanto os elementos de liga metálicos se difundem de forma substitucional, o que é menos eficiente (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

O processo de endurecimento secundário é uma reação de endurecimento por envelhecimento, na qual uma dispersão grosseira de cementita existente é substituída por uma nova e muito mais fina dispersão de carbonetos de liga. Isso resulta em um aumento marcante na resistência do aço, muitas vezes superior à resistência da martensita quando temperada. Esse aumento de resistência é conhecido como endurecimento secundário (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

É importante observar que nem todos os elementos de liga causam endurecimento secundário. Elementos como níquel, cobalto e silício não contribuem significativamente para o endurecimento secundário, mas podem desempenhar outros papéis na microestrutura e nas propriedades do aço (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006).

### **3.1.2.5 Microestrutura e transformações no revenido de aços temperados: uma análise detalhada**

A estrutura de um aço temperado martensítico é altamente instável devido a vários fatores, incluindo a supersaturação de átomos de carbono na martensita, a energia de deformação associada às discordâncias e maclas, a energia interfacial de contornos e a presença de austenita retida. Esses fatores desempenham papéis cruciais nas alterações

microestruturais e, conseqüentemente, nas propriedades mecânicas durante o revenido, mesmo sem a influência de elementos de liga (REGULY et al., 2014).

O processo de revenido é comumente dividido em três estágios, seguindo a seguinte sequência: estágio I - formação dos carbonetos de transição e redução do teor de carbono na matriz martensítica para cerca de 0,25%; estágio II - transformação da austenita retida em ferrita e cementita; e estágio III - substituição dos carbonetos de transição e da martensita de baixo teor de carbono por ferrita e cementita (AMERICAN SOCIETY FOR METALS, 1991).

As faixas de temperatura dos três estágios de revenido se sobrepõem, dependendo dos tempos de tratamento utilizados, mas geralmente são aceitos os intervalos de 100 a 250°C, 200 a 300°C e 250 a 350°C para o primeiro, segundo e início do terceiro estágio, respectivamente (REGULY et al., 2014). Acima de 350°C, as partículas de cementita engrossam (aumentam de tamanho) e perdem essencialmente sua morfologia cristalográfica, tornando-se esferoidais (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006). Além disso, com relação à recristalização de ferrita que ocorre acima de 350°C, também, Bhadeshia (2006) discorre que os limites originais das ripas de martensita permanecem estáveis até cerca de 600°C, mas na faixa de 350 a 600°C, há um rearranjo considerável das discordâncias dentro das ripas e nos limites das ripas que são essencialmente de ângulo baixo. Isso leva a uma redução acentuada na densidade de discordâncias e à formação de grãos ferríticos em forma de ripas intimamente relacionadas com os pacotes de ripas orientadas de forma similar a da martensita original. Esse processo, que é essencialmente um processo de recuperação, é substituído entre 600°C e 700°C pela recristalização que resulta na formação de grãos de ferrita equiaxiais com partículas esferoidais de  $Fe_3C$  nos limites e dentro dos grãos. Esse processo ocorre mais facilmente em aços de baixo carbono. Com teores mais elevados de carbono, o aumento da densidade das partículas de  $Fe_3C$  é muito mais eficaz na fixação dos limites dos grãos da ferrita, de modo que a recristalização é muito mais lenta. O processo final é o engrossamento contínuo das partículas de  $Fe_3C$  e o crescimento gradual dos grãos de ferrita.

Com relação aos estágios do revenido, ainda, a formação de carbonetos de liga, responsáveis pelo endurecimento secundário, é ocasionalmente considerada como um quarto estágio do revenido (AMERICAN SOCIETY FOR METALS, 1991).

### **3.1.2.6 Fragilização de aços temperados e revenidos**

Aços de alta resistência submetidos a tratamentos térmicos de têmpera e revenimento podem sofrer diversos tipos de fragilização, como a fragilização da martensita revenida (FMR), a fragilização do revenimento (FR) e a fragilização por hidrogênio. A FMR ocorre

durante o revenimento na faixa de 260 a 370°C, enquanto a FR acontece após o revenimento entre 375 e 575°C, ou durante o resfriamento nessa faixa. A FMR é um processo mais rápido, enquanto a FR é mais lenta e afeta especialmente seções espessas em altas temperaturas de revenimento. O silício pode retardar a formação de cementita e reduzir a FMR. Além disso, elementos como fósforo, antimônio, estanho e arsênio podem causar FR, sendo que o molibdênio ajuda a minimizar esse efeito. O hidrogênio também pode fragilizar aços de alta resistência, reduzindo a tenacidade e promovendo modos de fratura frágeis. Portanto, o controle de elementos e condições de processamento é essencial para evitar essas fragilizações em aços temperados e revenidos de alta resistência (REGULY et al., 2014).

### 3.1.3 Tratamento térmico de têmpera e revenido para ferros fundidos

Conforme Chiaverini (1990) o tratamento térmico de têmpera e revenido usualmente é aplicado somente para o ferro fundido cinzento e para o ferro fundido nodular. O material é austenitizado pelo aquecimento, segue-se com o resfriamento para a têmpera e revine-se até a dureza desejada. As estruturas resultantes correspondem à da martensita revenida.

A metalurgia física do processo de têmpera e revenido no ferro fundido tem como objetivo principal aumentar a resistência mecânica e a dureza, melhorando a resistência ao desgaste. O tratamento térmico de têmpera e revenido pode aumentar a resistência ao desgaste do ferro fundido cinzento martensítico em até cinco vezes quando comparado ao ferro fundido cinzento perlítico. O aquecimento pode ser realizado em fornos, banhos de sal, por chama ou indução, sendo que as condições variam dependendo da composição química do material (CHIAVERINI, 1990).

A temperatura de aquecimento deve ser escolhida de acordo com a temperatura de transformação específica de cada tipo de ferro fundido, e o tempo de permanência à temperatura é crucial para garantir um aquecimento uniforme em toda a peça. Elementos como silício, manganês e carbono têm um impacto significativo na endurecibilidade do ferro fundido, e a seleção das condições de têmpera depende desses fatores. Geralmente, recomenda-se um tempo de cerca de 10 minutos por centímetro de espessura da peça para garantir um tratamento térmico eficaz (CHIAVERINI, 1990).

Face aos elevados teores de carbono e silício em massa presentes nos ferros fundidos, as temperaturas de austenitização são mais elevadas e os tempos de permanência nestas temperaturas mais longos em relação aos aços, para que haja completa dissolução na austenita (USP, 2023).



Ferros fundidos de estrutura inteiramente perlítica reagem melhor a têmpera do que os de estrutura ferrítica, requerendo menores tempos para obtenção de uma estrutura austenítica capaz de, após resfriamento, resultar numa estrutura final de maior dureza. Os ferros fundidos de matriz ferrítica exigem tempos muito longos à temperatura de encharque para permitir a dissolução do carbono livre (grafita) na austenita (USP, 2023).

Na figura 3.3 são resumidos os ciclos típicos de têmpera e revenido para os ferros fundidos cinzento e nodular.

Objetivo	Temperatura e tempo de austenitização	Meio de resfriamento (a)	Ciclo de revenido
Ferro fundido cinzento com máxima dureza	Pré-aquecimento a 560°C Aquecimento a 870°C, uma hora por pol. de secção	Óleo em agitação Resfriar até 120°C	200°C, uma hora Resfriar em ar tranquilo
Ferro fundido cinzento com ótimas resistência e tenacidade	Pré-aquecimento a 650°C Aquecimento a 870°C, uma hora por pol. de secção	Óleo em agitação Resfriar até 120°C	400°C, uma hora Resfriar em ar tranquilo
Para obter ferro nodular 120-90-02	900°C, uma hora por pol. de secção	Óleo em agitação	480°C, 2 horas; resfriar no forno até 345°C; resfriar no ar
Para obter ferro nodular 100-70-03	900°C, uma hora por pol. de secção	Óleo em agitação	480°C, 2 horas; resfriar no forno até 345°C; resfriar ao ar
Alternativa para tipo 100-70-03	900°C, uma hora por pol. de secção	Ar até 425°C (b)	595°C, 2 horas
Preparo de ferro nodular para têmpera por chama	900°C, uma hora por pol. de secção	Óleo em agitação	650°C, 2 horas; resfriar no forno até 345°C; resfriar ao ar

(a) A temperatura do óleo deve ser controlada numa faixa de 55 a 85°C; (b) dispositivos ou ventiladores especiais de ar comprimido

Figura 3.3 Ciclos típicos de têmpera e revenido para os ferros fundidos cinzento e nodular.

Fonte: CHIAVERINI, 1990.

Apesar dos resultados positivos que se pode alcançar na têmpera e revenido nos ferros fundidos, esses tratamentos não são ainda muito aplicados nesses materiais. Devido aos seus característicos estruturais e alto teor de carbono, os ferros fundidos podem apresentar vários problemas durante a têmpera, porém sua elevada endurecibilidade permite a utilização de meios brandos de resfriamento, o que atenua algumas das dificuldades que podem surgir no resfriamento após a têmpera, como empenamento ou fissuração (CHIAVERINI, 1990).

### 3.2 Ensaio de dureza

Existem vários métodos para medir ou avaliar os resultados obtidos no tratamento térmico - teste de tensão, teste de impacto, teste de dobra e vários tipos de teste de cisalhamento, para citar alguns. Porém, via de regra, os tipos de ensaios citados acima são restritos a aplicações especiais. O teste de dureza é, de longe, o ensaio mais utilizado universalmente para medir os resultados do tratamento térmico por diversas razões - o teste de dureza é simples de realizar; não costuma prejudicar a utilidade da peça testada; e testes de

dureza feitos com precisão e devidamente interpretados podem ser usados para avaliar (ou pelo menos estimar) outras propriedades mecânicas. Por exemplo, a dureza varia diretamente com a resistência e inversamente com a ductilidade (DOSSETT; BOYER, 2006).

Tanto na metalurgia ferrosa quanto na não ferrosa, a dureza é definida e medida com base em: um teste estático no qual um penetrante padrão é pressionado na amostra, usando uma carga padrão, e a resistência do metal à penetração é a medida da dureza; e um teste dinâmico em que um pequeno martelo é lançado contra a superfície do material a partir de uma altura fixa e a dureza é expressa em termos da altura em que o martelo ricocheteia (DOSSETT; BOYER, 2006).

Muitos sistemas diferentes foram concebidos para testar a dureza dos metais, mas apenas alguns alcançaram importância comercial. Eles são Brinell, Rockwell, Vickers, Scleroscope e vários testadores de microdureza que empregam identificadores Vickers ou Knoop. Todos esses sistemas, exceto o Escleroscópio, dependem estritamente do princípio da identificação para medição (DOSSETT; BOYER, 2006).

### 3.3 Ensaio de espectrometria por emissão óptica por centelha

A espectrometria de emissão óptica é um ensaio de análise química amplamente empregado na indústria de metais, incluindo fabricação, fundições e manufatura, sendo especialmente aplicável a amostras sólidas de metais puros e ligas metálicas (Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais, 2023).

A espectrometria de emissão óptica por centelha (S-OES) é uma técnica de análise química multielementar que fornece resultados rapidamente. Ela utiliza uma centelha elétrica para gerar altas temperaturas, excitando átomos e produzindo íons para a análise de vários elementos. A identificação dos elementos químicos é feita pelo comprimento de onda emitido por cada um. Essa técnica segue normas como a ASTM E415, a ASTM A751, a ASTM E1086, a ASTM E1251 e a ASTM E2994 (Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais, 2023).

### 3.4 Inteligência artificial e aprendizado de máquina

No século XXI o aumento da disponibilidade de grandes volumes de dados e o aumento da capacidade computacional viabilizaram progressos marcantes na esfera da inteligência artificial. A área de inteligência artificial e aprendizado de máquina (*machine learning*) foi criada visando desenvolver sistemas que possam resolver problemas complexos

de forma eficiente e autônoma. Dentro desse contexto, a área de aprendizado de máquina, que é uma subárea da inteligência artificial, concentra-se na criação de algoritmos e técnicas que permitem às máquinas a capacidade de aprender com dados e melhorar seu desempenho progressivamente (Alura, 2023).

#### 3.4.1 Aprendizado de máquina supervisionado e não supervisionado

Aprendizado supervisionado é um paradigma de aprendizado de máquina em que o modelo (algoritmo) é treinado usando um conjunto de dados que contém tanto as entradas (ou características) quanto as saídas desejadas (ou rótulos) associadas a essas entradas. O objetivo principal é que o modelo aprenda uma relação entre as entradas e as saídas de modo a fazer previsões precisas ou classificações para novos dados não vistos. A ênfase principal está na capacidade do modelo de fazer previsões precisas (HASTIE et al., 2021).

O aprendizado não supervisionado, por outro lado, é um paradigma de aprendizado de máquina em que o modelo é treinado apenas com as entradas (ou características) dos dados, sem ter informações sobre as saídas desejadas ou rótulos correspondentes. O objetivo principal é explorar a estrutura ou padrões ocultos nos dados, como agrupamentos naturais ou relações entre as variáveis de entrada, sem a orientação de prever ou classificar dados específicos. A ênfase principal está na descoberta de insights ou estruturas nos dados (HASTIE et al., 2021).

Em resumo, no aprendizado supervisionado, o modelo é treinado com base em pares de entrada-saída para fazer previsões ou classificações, enquanto no aprendizado não supervisionado, o modelo é treinado apenas com as entradas para descobrir estruturas ou padrões nos dados. Existem também cenários intermediários, como o aprendizado semi-supervisionado, onde algumas observações possuem saídas conhecidas e outras não, que misturam elementos de ambos os paradigmas (HASTIE et al., 2021).

#### 3.4.2 O *trade-off* entre precisão de previsão e interpretabilidade do modelo no aprendizado de máquina

A precisão de previsão se refere à quão bem um modelo (algoritmo) de aprendizado de máquina é capaz de fazer previsões precisas com base nos dados de treinamento e, conseqüentemente, em dados não vistos. Em outras palavras, é a capacidade de um modelo em fornecer estimativas próximas ou corretas para as saídas desejadas ou alvo, com base nas

entradas disponíveis. Quanto maior a precisão de previsão de um modelo, mais confiável ele é na geração de resultados exatos ou próximos aos valores reais (HASTIE et al., 2021).

A interpretabilidade do modelo, por outro lado, está relacionada à facilidade com que um modelo pode ser compreendido e explicado pelos seres humanos. Envolve a capacidade de traduzir as relações entre as variáveis de entrada e saída em termos que sejam compreensíveis e interpretações claras. Modelos interpretáveis são mais simples de serem analisados, o que facilita a identificação de quais variáveis são importantes e como elas contribuem para as previsões do modelo. Isso é particularmente útil quando o objetivo é entender os mecanismos subjacentes ou fazer inferências sobre o processo que está sendo modelado (HASTIE et al., 2021).

O *trade-off* entre precisão de previsão e interpretabilidade do modelo refere-se ao equilíbrio entre a capacidade de um modelo em fornecer previsões precisas e sua facilidade de interpretação. Em alguns casos, modelos mais complexos e flexíveis podem oferecer maior precisão de previsão, mas podem ser menos interpretáveis. Por outro lado, modelos mais simples e restritos podem ser mais interpretáveis, mas às vezes podem sacrificar a precisão de previsão. Isso está ilustrado na figura 3.4, em que é possível observar os diferentes algoritmos de aprendizado máquina com seus respectivos níveis de precisão de previsão e de interpretabilidade do modelo. A escolha entre esses dois aspectos depende dos objetivos específicos do problema em questão: se o foco for principalmente em previsões precisas, a precisão da previsão pode ser priorizada; se o foco for na compreensão do processo ou na interpretação do modelo, a interpretabilidade pode ser mais importante. Esse é um equilíbrio delicado a ser considerado ao escolher o método de aprendizado estatístico adequado para um problema específico (HASTIE et al., 2021).

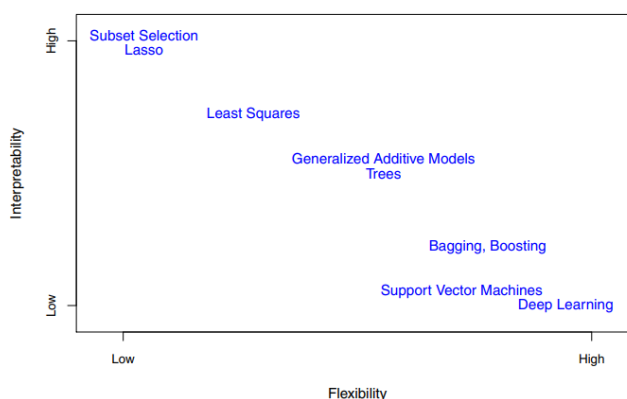


Figura 3.4 Uma representação da compensação entre flexibilidade e interpretabilidade, utilizando diferentes algoritmos de aprendizado de máquina.

Fonte: HASTIE et al., 2021.

### 3.4.3 Avaliação de algoritmos de aprendizado de máquina de predição numérica

Várias medidas podem ser usadas para avaliar o sucesso de um algoritmo de predição numérica, algumas delas estão resumidas na figura 3.5. Os valores previstos nas instâncias de teste são denominados  $p_1, p_2, \dots, p_n$ ; os valores reais são denominados  $a_1, a_2, \dots, a_n$ .

Mean-squared error	$\frac{(p_1 - a_1)^2 + \dots + (p_n - a_n)^2}{n}$
Root mean-squared error	$\sqrt{\frac{(p_1 - a_1)^2 + \dots + (p_n - a_n)^2}{n}}$
Mean absolute error	$\frac{ p_1 - a_1  + \dots +  p_n - a_n }{n}$
Relative squared error	$\frac{(p_1 - a_1)^2 + \dots + (p_n - a_n)^2}{(a_1 - \bar{a})^2 + \dots + (a_n - \bar{a})^2}$
	(in this formula and the following two, $\bar{a}$ is the mean value over the training data)
Root relative squared error	$\sqrt{\frac{(p_1 - a_1)^2 + \dots + (p_n - a_n)^2}{(a_1 - \bar{a})^2 + \dots + (a_n - \bar{a})^2}}$
Relative absolute error	$\frac{ p_1 - a_1  + \dots +  p_n - a_n }{ a_1 - \bar{a}  + \dots +  a_n - \bar{a} }$
Correlation coefficient	$\frac{S_{PA}}{\sqrt{S_P S_A}}, \text{ where } S_{PA} = \frac{\sum_i (p_i - \bar{p})(a_i - \bar{a})}{n - 1}, S_P = \frac{\sum_i (p_i - \bar{p})^2}{n - 1},$ $S_A = \frac{\sum_i (a_i - \bar{a})^2}{n - 1} \text{ (here, } \bar{a} \text{ is the mean value over the test data)}$

Figura 3.5 Medidas de erro para avaliar o sucesso de um algoritmo de predição numérica. Fonte: WITTEN et al., 2017.

O erro médio quadrático (*mean-squared error*) é a medida principal e mais comumente usada, que pode ser simplificada usando a raiz quadrada (*root mean-squared error*) para ter as mesmas dimensões que o valor previsto. Essa medida é amplamente utilizada devido à sua facilidade de manipulação matemática. No entanto, nem sempre é a medida mais apropriada, pois tende a ser sensível a valores extremos (WITTEN et al., 2017).

O erro médio absoluto (*mean absolute error*) é uma alternativa que calcula a média das magnitudes dos erros individuais, sem levar em conta seu sinal. Diferentemente do erro médio quadrático citado anteriormente, o erro médio absoluto não é sensível a valores extremos, tratando todos os erros igualmente com base em sua magnitude (WITTEN et al., 2017).

Às vezes, são mais relevantes os valores de erro relativos em vez de absolutos. Isso ocorre quando um erro de 10% é igualmente importante, independentemente de ser um erro de 50 em uma previsão de 500 ou um erro de 0,2 em uma previsão de 2. Nesses casos, as

médias de erro absoluto se tornam irrelevantes, e as medidas de erro relativo são mais apropriadas. Nesses casos, por exemplo, são utilizadas as medidas do erro relativo quadrático (*relative squared error*) ou da raiz do erro relativo quadrático (*root relative squared error*) que segue o mesmo princípio (WITTEN et al., 2017).

A próxima medida de erro na tabela 3.5 é chamada de erro absoluto relativo (*relative absolute error*) e é obtida normalizando o erro absoluto total da mesma maneira que o erro relativo quadrático (WITTEN et al., 2017).

Já a medida final é o coeficiente de correlação (*correlation coefficient*), que mede a correlação estatística entre os valores reais e os valores previstos. O coeficiente de correlação varia de 1 (correlação perfeita positiva) a -1 (correlação perfeita negativa), com 0 indicando nenhuma correlação. O coeficiente de correlação é independente de escala, o que significa que não é afetado por mudanças nas unidades de medida. Valores maiores indicam melhor desempenho, ao contrário das outras medidas que buscam minimizar o erro (WITTEN et al., 2017).

A escolha da medida apropriada na modelagem de uma aplicação de inteligência artificial depende da aplicação específica e dos objetivos do problema, levando em consideração o impacto de diferentes tipos de erros e a natureza dos dados. Cada medida tem suas próprias vantagens e desvantagens, e a escolha deve ser baseada na compreensão do problema em questão (WITTEN et al., 2017).

Na maioria das situações práticas o melhor método de previsão numérica ainda é o melhor, não importando qual medida de erro seja utilizada. Por exemplo, a figura 3.6 mostra o resultado de quatro técnicas de previsão numérica diferentes em um determinado conjunto de dados, avaliadas usando validação cruzada. O Método D é o melhor de acordo com todas as cinco métricas: ele possui o menor valor para cada medida de erro e o maior coeficiente de correlação. O Método C é o segundo melhor em todas as cinco métricas. O desempenho de A e B é motivo de debate: eles têm o mesmo coeficiente de correlação, A é melhor do que B de acordo com os erros médios quadráticos e relativos quadráticos, e o oposto é verdadeiro para o erro absoluto e erro absoluto relativo (WITTEN et al., 2017).

	A	B	C	D
Root mean-squared error	67.8	91.7	63.3	57.4
Mean absolute error	41.3	38.5	33.4	29.2
Root relative squared error	42.2%	57.2%	39.4%	35.8%
Relative absolute error	43.1%	40.1%	34.8%	30.4%
Correlation coefficient	0.88	0.88	0.89	0.91

Figura 3.6 Medidas de desempenho para quatro modelos de previsão numérica.

Fonte: WITTEN et al., 2017.

#### 3.4.4 *K-fold cross-validation*: uma técnica essencial para estimar o erro de previsão em modelos de aprendizado de máquina

Quando um vasto suprimento de dados está disponível, a capacidade das máquinas aprenderem com eles e melhorarem seu desempenho progressivamente não é um problema: basta criar um modelo baseado em um grande conjunto de treinamento e testá-lo em outro grande conjunto de testes. Mas embora a mineração de dados por vezes envolva *big data* – particularmente em aplicações de marketing, vendas e suporte ao cliente em que há vasto suprimento de dados disponível – é frequente que dados rotulados e dados de qualidade sejam escassos (WITTEN et al., 2017).

A questão de prever o desempenho com base em dados limitados é interessante. É possível encontrar muitas técnicas diferentes, das quais a validação cruzada repetida (*k-fold cross validation*) é provavelmente o método de escolha na maioria das situações práticas de dados limitados (WITTEN et al., 2017).

A validação cruzada repetida (*k-fold cross validation*) é um método amplamente utilizado para estimar o erro de previsão em modelos de aprendizado de máquina. Nessa técnica, os dados são divididos em K partes aproximadamente iguais. Em cada iteração, um dos K conjuntos de dados é usado como conjunto de teste, enquanto os outros K-1 conjuntos são usados como conjunto de treinamento. O modelo é ajustado aos dados de treinamento e testado nos dados de teste. Isso é repetido K vezes, cada vez usando um conjunto de teste diferente. Por exemplo, quando  $K = 5$ , o cenário pode ser explicitado com a ajuda da figura 3.7. Os dados foram divididos em 5 partes de tamanhos aproximadamente iguais (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2017).

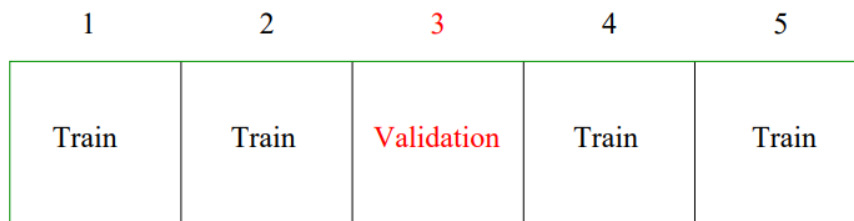


Figura 3.7 Técnica de validação cruzada *5-fold cross-validation* em que os dados foram divididos em 5 partes de tamanhos aproximadamente iguais.

Fonte: HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2017.

Para a  $k$ -ésima parte (no exemplo da figura 3.7, com  $k = 3$ ), o modelo de aprendizado de máquina é treinado com os dados das outras  $K-1$  partes (que nesse exemplo seriam a primeira, a segunda, a quarta e a quinta partes da figura 3.7) e é calculado o erro de predição do modelo ao prever a  $k$ -ésima ( $k = 3$ ) parte dos dados. Isso é feito para  $k = 1, 2, \dots, K$ , em que  $K = 5$  nesse exemplo (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2017).

O resultado final é uma estimativa do erro de previsão médio, calculado a partir das  $K$  iterações. O valor típico para  $K$  é 5 ou 10. A escolha de  $K$  depende das características dos dados e que, em geral, *k-fold cross-validation* é recomendado como um bom compromisso entre viés e variância na estimativa do erro de previsão (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2017).

#### 3.4.5 O *trade-off* entre viés e variância no aprendizado de máquina

O viés se relaciona ao erro introduzido ao simplificar um problema complexo por meio de um modelo mais simples. Por exemplo, ao usar a regressão linear, que assume uma relação linear entre as variáveis, está sendo introduzido um viés, já que é improvável que problemas da vida real tenham relacionamentos tão simples. O viés é a tendência do modelo em fazer aproximações simplistas que podem não se adequar bem aos dados reais. Em resumo, o viés mede o quão distante a estimativa do modelo está da verdadeira relação subjacente (HASTIE et al., 2021).

A variância, por outro lado, se refere à sensibilidade do modelo a variações nos dados de treinamento. Modelos de algoritmos mais flexíveis, como redes neurais profundas, tendem a ter maior variância, o que significa que pequenas variações nos dados de treinamento podem levar a grandes variações nas previsões do modelo. Isso indica que o modelo é altamente sensível aos dados específicos usados para treiná-lo. Em resumo, a variância mede o quão



instável ou sensível o modelo é às flutuações nos dados de treinamento (HASTIE et al., 2021).

O *trade-off* entre viés e variância é uma consideração importante ao escolher métodos de aprendizado estatístico. Encontrar um equilíbrio é fundamental, pois métodos com baixo viés frequentemente têm alta variância, e vice-versa. O objetivo é selecionar um método que tenha tanto baixa variância quanto baixo viés para minimizar o erro de teste esperado. Isso é conhecido como o *trade-off* viés-variância e é uma preocupação fundamental em métodos de aprendizado estatístico (HASTIE et al., 2021).

#### 3.4.6 Plataforma de mineração de dados WEKA

A WEKA é uma plataforma de mineração de dados abrangente e robusta. Ela oferece uma implementação completa de técnicas de aprendizado de máquina, disponível em código-fonte Java. A WEKA inclui desde implementações simples para facilitar a compreensão até implementações avançadas de esquemas de aprendizado populares. Além disso, oferece um ambiente de trabalho completo com uma biblioteca de classes Java para suportar a incorporação de aprendizado de máquina em aplicativos e até a criação de novos esquemas de aprendizado, sendo uma plataforma valiosa tanto para fins práticos de mineração de dados quanto para pesquisa em aprendizado de máquina (WITTEN et al., 2017).

A WEKA oferece amplo suporte para todo o processo de mineração de dados experimental, desde a preparação dos dados de entrada até a avaliação estatística dos esquemas de aprendizado e a visualização dos dados de entrada e dos resultados do aprendizado (WITTEN et al., 2017).

Além dos algoritmos de aprendizado, a plataforma também oferece diversas ferramentas de pré-processamento de dados. Todos esses recursos são acessados por meio de uma interface comum, permitindo que os usuários comparem diferentes métodos e escolham os mais adequados para seus problemas (WITTEN et al., 2017).

A WEKA foi desenvolvida pela Universidade de Waikato, na Nova Zelândia, e está disponível sob os termos da Licença Pública Geral GNU. Ela é escrita em Java, é executada em várias plataformas, incluindo Linux, Windows e MacOS (WITTEN et al., 2017).

Os principais recursos da WEKA incluem implementações de algoritmos de aprendizado de máquina, ferramentas para transformação de conjuntos de dados, visualizações de dados e suporte para resolver problemas de mineração de dados, como regressão, classificação, clustering, mineração de regras de associação e seleção de atributos.

A plataforma também é flexível, permitindo que os usuários personalizem os parâmetros dos algoritmos e realizem experimentos para escolher a melhor abordagem para seus problemas. Além disso, a WEKA oferece uma interface gráfica amigável que facilita a utilização, especialmente para iniciantes, mas também permite interações avançadas por meio de comandos de texto. Adicionalmente, na plataforma também é introduzido um sistema de gerenciamento de pacotes para facilitar a instalação de novos recursos e contribuições da comunidade. Isso torna a plataforma mais expansível e acessível para desenvolvedores e usuários avançados (WITTEN et al., 2017).

## 4.0 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

### 4.1 Seleção e preparação das amostras das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50

Foram selecionadas na empresa GREFORTEC Fornos Industriais e Tratamento Térmico Ltda. 3 ligas ferrosas para serem analisadas no presente trabalho: o aço ao carbono SAE 1045, o aço de baixa liga SAE 4140 e o ferro fundido nodular DIN GGG50. Foram cortadas e lixadas 4 amostras das ligas SAE 1045 e SAE 4140 e 3 amostras da liga DIN GGG50 nos equipamentos da empresa.

### 4.2 Realização do tratamento térmico de têmpera e revenido nas amostras das ligas ferrosas

Para a realização do tratamento térmico de têmpera foi utilizado um forno mufla, sem atmosfera protetora. Para as ligas SAE 1045 e DIN GGG50 empregou-se uma temperatura de encharcamento de 880°C e para a liga SAE 4140 uma temperatura de 850°C. O tempo de encharcamento foi de 10min para todas as ligas. Posteriormente, as amostras das ligas foram resfriadas em água concentrada com 10% de polímero (polialquilenoglicol - PAG) (CHANDLER, 1995).

Já para a realização do tratamento térmico de revenimento seguinte à têmpera foi utilizado um forno box R8, também sem atmosfera protetora. Para todas as ligas ferrosas empregou-se uma temperatura de revenido de 300°C. O tempo de revenido foi de 45 min para todas as amostras ensaiadas. Em seguida, as amostras foram resfriadas ao ar livre.

Para medir a capacidade de generalização dos modelos de aprendizado de máquina - avaliados na presente pesquisa - para novos dados, o tempo de revenido de 45 min (2700 s) realizado no ensaio das ligas foi proposto justamente para se diferenciar dos tempos de revenido contidos na base de dados montada no presente trabalho (que contém os seguintes tempos de revenido: 10, 40, 90, 120, 300, 600, 900, 3.600, 7.200, 9.000, 14.400, 28.800, 57.600, 79.200, 86.400 e 115.200 s), obtidos de ensaios experimentais de revenimento registrados na literatura. Portanto, considerando que já haviam inclusive dados experimentais

de revenimento das classes de aço SAE 1045 e SAE 4140 na base de dados montada, ainda que com composições químicas em níveis de teores diferentes das ligas ensaiadas no presente trabalho, o tempo de revenido de 45 min foi propositadamente realizado no ensaio das ligas ferrosas uma vez que o objetivo de qualquer modelo de aprendizado de máquina é ser capaz de generalizar bem para novos dados, nesse caso em exemplo, primordialmente, o tempo de 45 min.

#### 4.3 Medição da dureza obtida nas amostras das ligas ferrosas

As medições de dureza das amostras foram realizadas num durômetro utilizando o sistema Rockwell C de teste de dureza. As medidas foram realizadas tanto após a têmpera quanto após o revenimento das amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50.

Conforme Penha (2010), foi feita uma média de 5 medidas de dureza efetuadas na superfície das amostras. Os valores de dureza obtidos nas ligas ferrosas ensaiadas foram resumidos na tabela 5.1 apresentada na seção “Resultados”.

#### 4.4 Medição e estimativa da composição química das amostras das ligas ferrosas

A composição química das ligas de aço SAE 1045 e SAE 4140 foram examinadas em laboratório através do ensaio de espectrometria por emissão óptica. Os resultados dos valores de composição química dessas ligas de aço estão mostrados na tabela 5.2 apresentada na seção “Resultados”.

Para a liga de ferro fundido nodular DIN GGG50 (ABNT FE 50007) foi feita uma estimativa usando a média dos valores da faixa de composição de cada um dos elementos químicos permitida pela norma NBR 8650 (Emprego de ferro fundido nodular para produtos automotivos - Procedimentos, 2015), visto que as normas de classificação de ferro fundido utilizam apenas dados correspondentes a suas propriedades mecânicas como a resistência à tração, o limite de escoamento e ou o alongamento para a sua designação, vide as normas NBR 6916 (Ferro fundido nodular ou ferro fundido com grafita esferoidal, 1981) e DIN 1693 (*Cast iron with nodular graphite: unalloyed and low alloy grades*, 1973) que não detalham as faixas de composição química para o ferro fundido nodular.

Assim os valores de composição química considerados para a liga DIN GGG50 no presente trabalho estão indicados na tabela 4.1.

Tabela 4.1 Estimativa da composição química da liga de ferro fundido nodular DIN GGG50 ensaiada no presente trabalho (% em massa).

	C	Si	Mn	P	S	Cu	Mg
DIN GGG50	3.6	2.55	0.25	0.045	0.01	0.45	0.05

Fonte: SAUER, 2023.

#### 4.5 Compilação dos dados experimentais de revenimento da literatura

Uma base de dados para o ajuste (treinamento) dos modelos (algoritmos) de aprendizado de máquina avaliados no presente trabalho foi montada a partir de 3 referências bibliográficas da literatura metalúrgica: Hollomon (1945), Grange (1956) e Penha (2010), totalizando um conjunto de dados com 1466 instâncias (ensaios de revenimento) e com uma variabilidade de 34 classes distintas de aços, em que dentre elas a classe de aço ao carbono SAE 1065 está contida duas vezes por duas ligas com composições químicas diferentes entre si. Assim visto que neste trabalho há 15 atributos analisados (em que cada atributo representa um parâmetro do processo de revenimento ou uma característica do material tratado termicamente) e que com relação ao estado da arte prévio de Penha (2010) e de Kang (2014) há a adição do atributo de dureza inicial (dureza pós têmpera), ele está composto por um total de 21.041 registros de dados.

Porém com uma ressalva, das 1466 instâncias de dados (ensaios de revenimento) contidas no conjunto de dados de treinamento dos modelos, apenas 517 delas possuem dados de dureza inicial (247 instâncias de dados extraídas de Penha, 2010; e 270 instâncias de dados extraídas de Hollomon, 1945). As demais 949 instâncias de dados, extraídas de Grange (1956), não possuem informações especificadas dos valores de dureza inicial (dureza pós têmpera) dos aços ensaiados experimentalmente.

As três referências bibliográficas Hollomon (1945), Grange (1956) e Penha (2010) possuem dados detalhados de composição química das ligas de aços ensaiados e os valores absolutos das medidas de dureza registradas em tabela ou outro formato que não em gráficos, um ponto fundamental para a otimização da base de dados montada quanto à exatidão dos dados registrados em relação ao estado da arte de Kang (2014). Das 18 referências bibliográficas metalúrgicas citadas na pesquisa de Kang (2014) que foram utilizadas para a obtenção dos dados do processo de revenimento na construção do seu conjunto de dados com aproximadamente 17.334 registros de dados, 15 delas foram consultadas no presente trabalho

e apenas 2 delas (Hollomon, 1945 e Grange, 1956) continham as informações detalhadas da composição química das ligas de aços ensaiados e os valores absolutos das medidas de dureza registradas em tabela ou outro formato que não em gráficos.

O processo de extração de dados a partir de gráficos pode ser impreciso, sendo um procedimento que incorre riscos quanto à exatidão dos dados obtidos. Outro fator preponderante é a falta de exatidão das informações de composição química das ligas de aço ensaiadas no processo de revenimento: a maioria dos dados presentes na literatura metalúrgica não revelam a composição química detalhada dos aços, sendo na maioria das vezes identificada apenas a classe do aço e, por vezes, as faixas de composição química de cada elemento químico presente no aço. Embora seja importante reconhecer, também, que o ensaio de composição química para a obtenção das informações detalhadas da quantidade de cada elemento químico presente numa liga ferrosa possa ser impreciso e não refletir com exatidão a sua realidade, uma vez que não é uma medida representativa de todo o material mas sim de uma pequena parte dele.

Como os dados experimentais de Penha (2010), desconsiderados na pesquisa de Kang (2014), apresentavam a mesma característica benéfica dos dados de Hollomon (1945) e Grange (1956) quanto a sua exatidão, eles foram incrementados na base de dados do presente trabalho também.

Como no estado da arte de Penha (2010) e Kang (2014), a atual base de dados contém dados experimentais de revenimento obtidos apenas de aços ao carbono ou de aços de baixo teor em liga, logo, não incluindo dados das ligas ferrosas de ferro fundido nem de aços de médio ou alto teor em liga. Não foram localizadas, durante a realização da presente pesquisa, referências bibliográficas com dados experimentais de revenimento para estas ligas com as informações detalhadas da sua composição química e com os valores absolutos das medidas de dureza registradas em tabela ou outro formato que não em gráficos. O conjunto de dados resultante foi disponibilizado na plataforma de dados da Kaggle e pode ser acessado em sua íntegra (Kaggle, 2023). É possível observar na tabela 5.3 apresentada na seção “Resultados” os atributos contidos no conjunto de dados resultante e os seus respectivos valores máximo, mínimo, médio e desvio padrão. Os valores máximo e mínimo foram extraídos da base de dados utilizada na presente pesquisa e portanto a caracterizam. Notando-se, também, que cada atributo representa um parâmetro do processo de revenimento ou uma característica do material tratado termicamente.

Além disso, é importante notar outras 3 observações com relação às informações do conjunto de dados montado na presente pesquisa, citadas abaixo em sequência:

- Em 82 instâncias de dados (ensaios de revenimento) com valores de dureza final da liga ensaiada inferior a 238 HV foram convertidos para dureza Rockwell C (72 instâncias extraídas de Grange, 1956; e 10 instâncias extraídas de Penha, 2010) utilizando a fórmula de conversão citada pela norma ASTM E140-12b (*Standard Hardness Conversion Tables for Metals Relationship Among Brinell Hardness, Vickers Hardness, Rockwell Hardness, Superficial Hardness, Knoop Hardness, Scleroscope Hardness, and Leeb Hardness*), que reitera sua aplicação apenas para números contidos dentro da faixa de dureza indicada na Tabela 1 (de 238 HV até 940 HV).
- No artigo de Grange (1956), na descrição detalhada da composição química dos aços ensaiados é apresentado um aço da classe SAE 6145; já na tabela III, no mesmo artigo, nos resultados dos dados dureza o aço em questão é indicado como da classe SAE 6140. Assim, como o teor do carbono do aço na descrição detalhada da composição química no artigo consta como 0,43%, no presente conjunto de dados o aço em foco foi definido como da classe SAE 6145 por aproximação.
- Com relação aos métodos empregados para as medições de dureza, em cada uma das três referências bibliográficas Hollomon (1945), Grange (1956), Penha (2010) foram apresentados métodos distintos. Hollomon (1945) utilizou uma média de 4 medições por amostra, sendo que em 8 ensaios de revenimento do aço ao carbono simples com 1,15%C foram consideradas duas amostras. Todos os demais 262 ensaios apresentados no estudo foram considerados utilizando apenas uma amostra. Grange (1956) utilizou uma média de 10 medições por amostra, sendo destacado que as impressões de dureza foram localizadas a meio caminho entre a superfície e o centro da seção transversal para minimizar qualquer possível efeito de segregação. E por último, Penha (2010) utilizou uma média de 5 medidas efetuadas na superfície plana do corpo de prova de tração, sendo destacada conformidade com o que a literatura preconiza.

Ainda, cabe destacar que para a construção da base de dados do presente trabalho não foi realizado qualquer pré-processamento de remoção de dados. Isso difere da abordagem adotada por Kang (2014), por exemplo, em que os dados dos elementos químicos P (fósforo) e S (enxofre) em % de massa foram desconsiderados.

O objetivo principal da abordagem adotada para a construção da base de dados do presente trabalho foi compilar todos os dados disponíveis nas referências bibliográficas consultadas que atenderam os requisitos estabelecidos para a exatidão dos dados registrados, resultando em um conjunto de dados abrangente para que esse pudesse ser compartilhado com a comunidade científica, visando a agilização de pesquisas futuras no tema: permitindo que novos pesquisadores possam explorar esse conjunto de dados, apresentado no presente trabalho, completo em volume de dados, para formular novas suposições e testar hipóteses sem a necessidade de adicionar novas informações a ele. A presente abordagem permite que os pesquisadores conduzam novas análises de forma simples, usando o conjunto de dados existente, em vez de se envolver em uma complicada compilação manual de novos dados para expandir o conjunto.

#### 4.6 Aplicação de algoritmos de aprendizado de máquina para a previsão de dureza em ligas ferrosas após o tratamento térmico de revenimento

No presente trabalho foi utilizada a versão 3.8.6 do software WEKA (*Waikato Environment for Knowledge Analysis*) para avaliar a aplicabilidade de algoritmos de aprendizado de máquina em suas capacidades de previsões de dureza para as amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após o tratamento térmico de revenimento. Além disso, a técnica escolhida de aprendizado de máquina para ser aplicada na presente pesquisa foi a de aprendizado supervisionado conforme Hastie et al. (2021).

O software WEKA é extensivamente empregado devido à sua vasta gama de algoritmos incorporados, abrangendo desde técnicas de pré-processamento até algoritmos para tarefas de associação, classificação, regressão e agrupamento. Além disso, a escolha pela plataforma WEKA para essa atividade proposta nessa pesquisa eliminou a necessidade de desenvolver códigos de programação e de aplicar ferramentas de aprendizado de máquina, como por exemplo a ferramenta *scikit-learn* que é uma biblioteca de aprendizado de máquina de código aberto para a linguagem de programação Python. Essa definição de metodologia teve como um dos seus objetivos principais tangibilizar a aplicação de inteligência artificial através de testes práticos de algoritmos de aprendizado de máquina na plataforma da WEKA (utilizando dados em formato numérico), sendo uma pesquisa propulsora para pesquisadores entrantes na área de inteligência artificial.

Para a característica da base de dados montada no presente trabalho, com todos os seus dados em formato numérico, haviam 28 algoritmos disponíveis na plataforma da WEKA para



aplicação. O resultado do ajuste (treinamento) de cada um desses algoritmos utilizando a atual base de dados para a previsão da propriedade mecânica de dureza final (pós revenido) pode ser visualizado na tabela 5.4 apresentada na seção “Resultados”. O ajuste (treinamento) dos modelos (algoritmos) foi realizado considerando duas abordagens listadas abaixo, em ambas foi empregado o modo teste por validação cruzada (*cross-validation 5 folds*) conforme Witten et al. (2017):

- Abordagem de treinamento N° 1: para o ajuste dos 28 algoritmos disponíveis na plataforma WEKA foi utilizado o conjunto de dados apresentado na seção 4.5 com exatamente os seus 15 atributos mencionados anteriormente.
- Abordagem de treinamento N° 2: para o ajuste dos 28 algoritmos disponíveis na plataforma WEKA foi utilizado o conjunto de dados apresentado na seção 4.5 com a adição de um 16° atributo de dados nele, o atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)”.

A abordagem de treinamento N° 2 descrita acima contempla uma técnica adotada em aprendizado de máquina denominada *feature engineering*, que utiliza dados já presentes num conjunto de dados para a construção de novos atributos. Nesse caso, o atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)” da abordagem de treinamento N° 2 é resultante da soma dos teores em porcentagem de massa dos 10 elementos químicos Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al e Cu contidos em 10 dos 15 atributos do conjunto de dados prévio utilizado na abordagem 1.

Nos 35 aços com composição química distintas entre si contidos na base de dados apresentada na seção 4.6 do presente trabalho, é possível notar que o valor do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)” varia entre um mínimo de 0,713 a um máximo de 4,385 % em massa nesses aços, configurando-se de fato como um conjunto de dados experimentais de revenimento obtidos de aços ao carbono e de aços de baixo teor em liga.

Os 28 algoritmos disponíveis na plataforma WEKA com as 2 diferentes abordagens de treinamento propostas, com ou sem o atributo de “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)”, resultam em 56 cenários diferentes combinando aplicação de um determinado algoritmo (1 entre 28 possíveis) com um conjunto específico de dados de treinamento (1 entre 2 possíveis - o conjunto de dados com 15 atributos ou o com 16 atributos).

Para as validações dos algoritmos, após o ajuste deles na plataforma WEKA através das abordagens 1 e 2 mencionadas, verificou-se o seu desempenho em dados de conjunto teste

(obtidos através dos ensaios práticos das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 realizados na empresa Grefortec).

Cabe notar aqui que no conjunto de dados de treinamento foram considerados 11 elementos químicos: C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al e Cu para o ajuste dos modelos. Dessa forma, para a compatibilidade dos dados do conjunto de treinamento e de teste na execução das atividades na plataforma WEKA, o elemento químico Mg presente em 0,05% em massa na liga DIN GGG50 de forma estimada, conforme explicado na seção 4.4 do presente trabalho, e os elementos químicos Ti e B presentes nas ligas de aço SAE 1045 e SAE 4140, juntamente com os demais elementos químicos Co, Nb, V e Sn presentes na liga SAE 4140 em quantidades evidenciadas pelo ensaio de espectrometria por emissão óptica na seção “Resultados”, foram desconsiderados do conjunto de dados de teste para o cálculo da dureza final realizado pelos 28 algoritmos avaliados na presente pesquisa. Sendo portanto considerados apenas os 11 elementos químicos C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al e Cu nesse cálculo.

O resultado dos 56 testes de validação dos algoritmos para cada um dos 3 materiais ensaiados no presente trabalho para a previsão da propriedade mecânica de dureza final (pós revenido) foram compilados em tabelas apresentadas na seção “Resultados”.

Para a realização do ajuste dos modelos de aprendizado de máquina, conforme a Abordagem N° 1 e N° 2 descritas anteriormente, e dos seus testes de validação para cada uma das 3 ligas ferrosas foram adotados os seguintes passos na plataforma WEKA, eles foram descritos abaixo apenas como exemplo e não reproduzem os resultados finais obtidos com a presente pesquisa. Com a instalação do software WEKA concluída no computador, ao acessá-lo clicou-se na opção *Explorer* destacada no retângulo amarelo da figura 4.1.

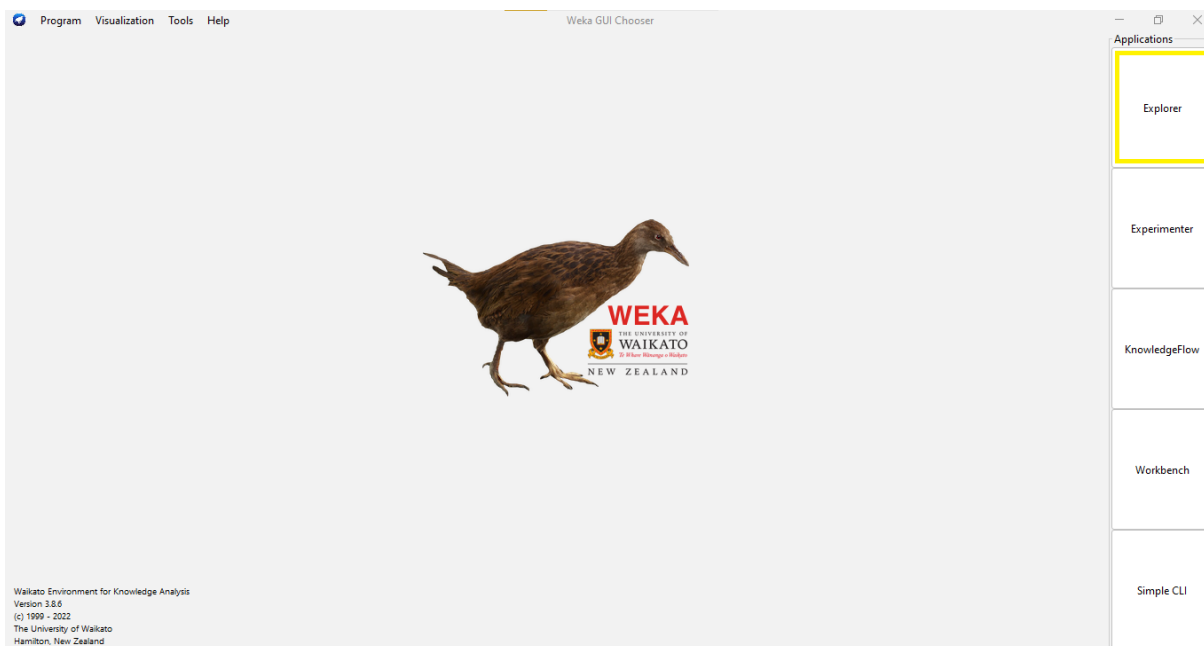


Figura 4.1 Interface de entrada do software WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

Acessada a seção “Weka Explorer”, clicou-se na opção *Open file* destacada no retângulo amarelo da figura 4.2.

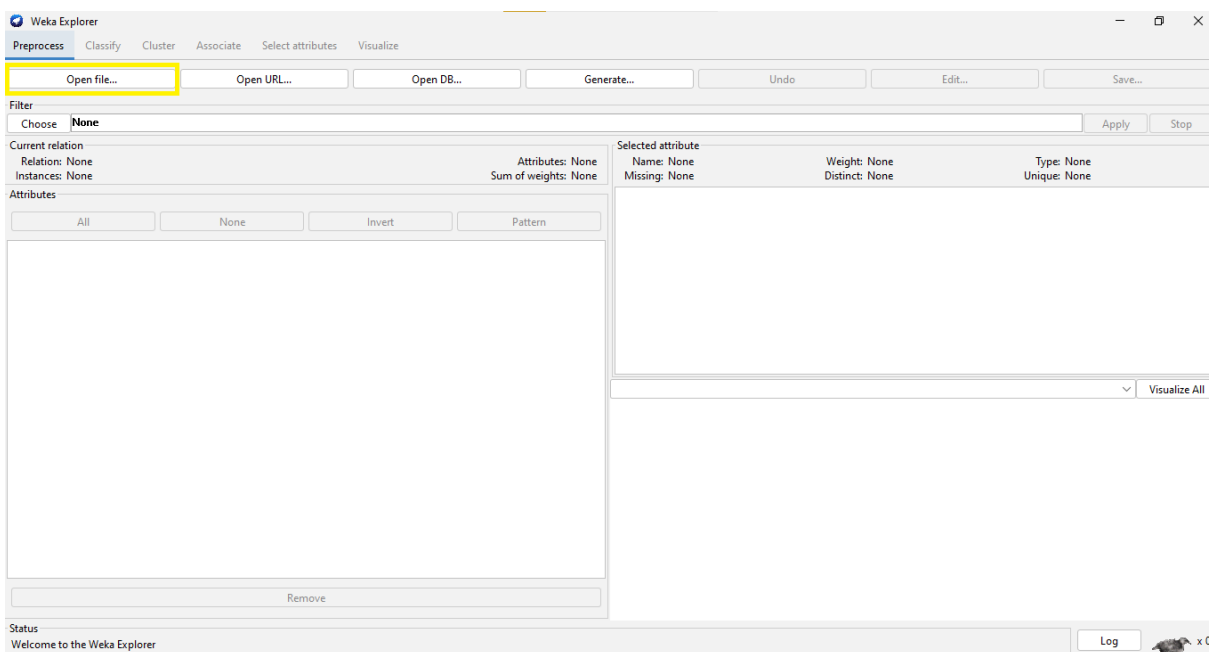


Figura 4.2 Seção “Weka Explorer”.

Fonte: SAUER, 2023.

A WEKA permite vários formatos de arquivos de entrada. No presente trabalho foi utilizado o formato .csv. Assim, como a base de dados utilizada no presente trabalho foi

montada no *google sheets* fez-se o download do arquivo no formato .csv para importá-lo à plataforma WEKA. Conforme a figura 4.3, em destaque nos retângulos amarelos, foi feito o ajuste do tipo do arquivo necessário e a seleção do arquivo “Dataset V2.d” no formato .csv.

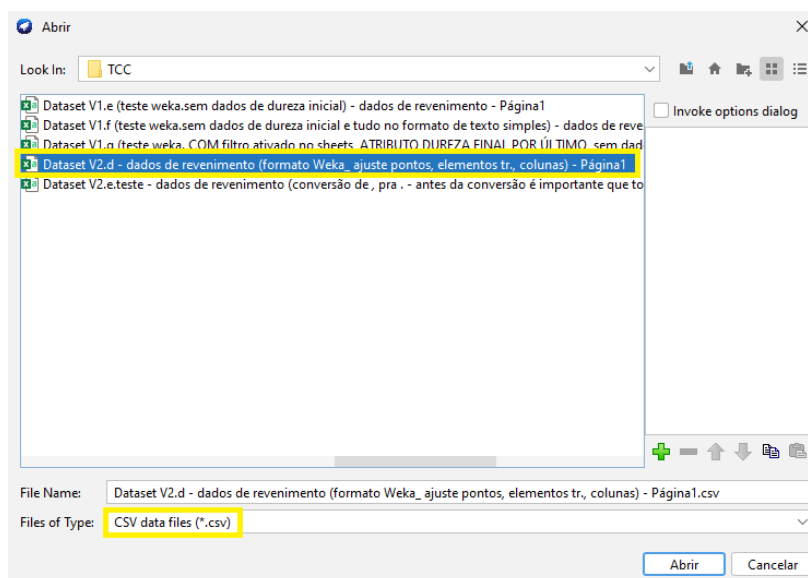


Figura 4.3 Importação da base de dados no formato .csv para a plataforma da WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

Para a compatibilidade do arquivo .csv na plataforma WEKA, os valores de dureza inicial que estavam em vacância no conjunto de dados no *google sheets* foram substituídos por “?” e a vírgula de todos os dados numéricos foram substituídas por um ponto.

Após clicar na opção “Abrir”, a aba *Preprocess* da seção “Weka Explorer” foi atualizada, conforme a figura 4.4. Dos 18 atributos inicialmente contidos no conjunto de dados importado foram excluídos os 2 atributos com dados nominais (não numéricos), isso é, irrelevantes no treinamento do algoritmo de aprendizado de máquina para o cálculo da dureza final: o atributo “Fonte” e o atributo “Tipo do aço”, conforme destacado nos retângulos amarelos da figura 4.4.

The screenshot shows the Weka Explorer interface. The 'Attributes' list on the left has 'Fonte' (1) and 'Tipo do aço' (2) selected with checkboxes. A yellow box highlights the 'Remove' button below the list. The 'Selected attribute' table on the right shows the distribution of 'Tipo do aço' values. Below it, a bar chart displays the distribution of 'Dureza final (HRC) - pÃ's revenido (Num)' for various AISI-STEEL grades.

No.	Label	Count	Weight
1	AISI-SAE 1026	39	39
2	AISI-SAE 1030	39	39
3	AISI-SAE 1035	40	40
4	AISI-SAE 1038	9	9
5	AISI-SAE 1040	40	40
6	AISI-SAE 1042	40	40
7	AISI-SAE 1045	40	40
8	AISI-SAE 1049	9	9
9	AISI-SAE 1050	17	17

Figura 4.4 Remoção dos atributos “Fonte” e “Tipo do aço” da base de dados importada para a plataforma da WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

A remoção dos devidos 2 atributos “Fonte (referência bibliográfica)” e “Tipo do aço (classificação SAE)” desnecessários para o treinamento do algoritmo, conforme a figura 4.4, resultou nos 16 atributos da Abordagem de treinamento N° 2 citada no trabalho, após isso, foi acessada a aba *Classify* da seção “Weka Explorer” destacada em um dos retângulos amarelos na figura 4.5. É possível observar, em sequência do N° 1 ao 16 no retângulo amarelo destacado mais abaixo da figura 4.5, os nomes dos 16 atributos utilizados no conjunto de dados para a abordagem N° 2 de treinamento dos modelos.

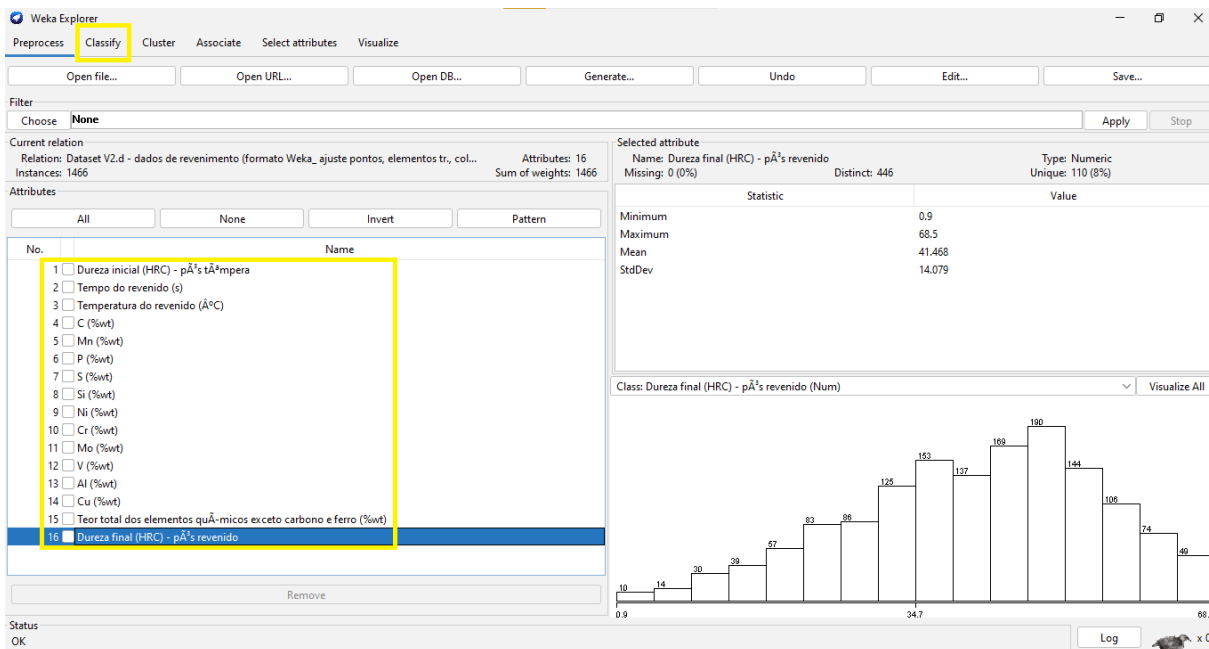


Figura 4.5 Nomes dos 16 atributos utilizados no conjunto de dados para a abordagem N<sup>o</sup> 2 de treinamento dos modelos na plataforma da WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

Na aba *Classify* da seção “Weka Explorer” foram selecionados o algoritmo *rules.M5Rules* na opção *Choose*, o modo teste *Cross-validation Folds 10* (na presente pesquisa empregou-se o parâmetro *5 Folds*) e o atributo estimado (previsto) para Dureza final (HRC) conforme destacado nos retângulos amarelos da figura 4.6. Após clicou-se na opção *Start* destacada no retângulo.

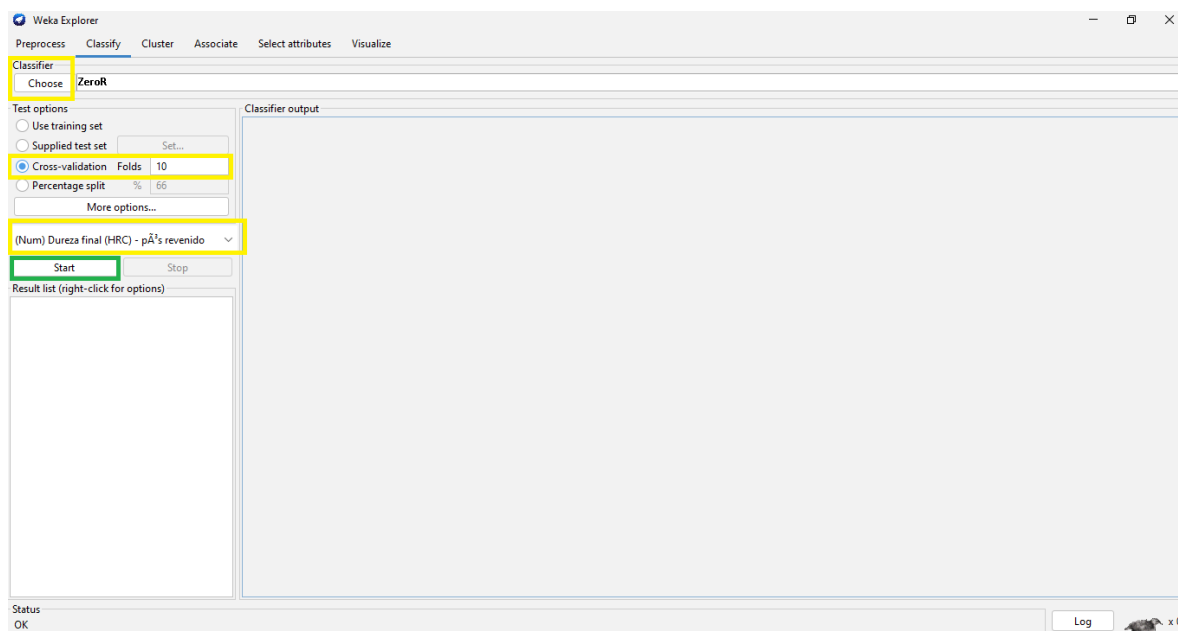


Figura 4.6 Aba *Classify* da seção “Weka Explorer”.

Fonte: SAUER, 2023.

O resultado do desempenho do algoritmo rules.M5Rules no conjunto de dados de treinamento foi apresentado na interface do software de forma resumida, em destaque no retângulo amarelo da figura 4.7, podendo ser observados os valores CC (*correlation coefficient*), MAE (*mean absolute error*), RMSE (*root mean squared error*), RAE (*relative absolute error*) e RRSE (*root relative squared error*) que aferem de diferentes maneiras o desempenho das predições realizadas pelo algoritmo.

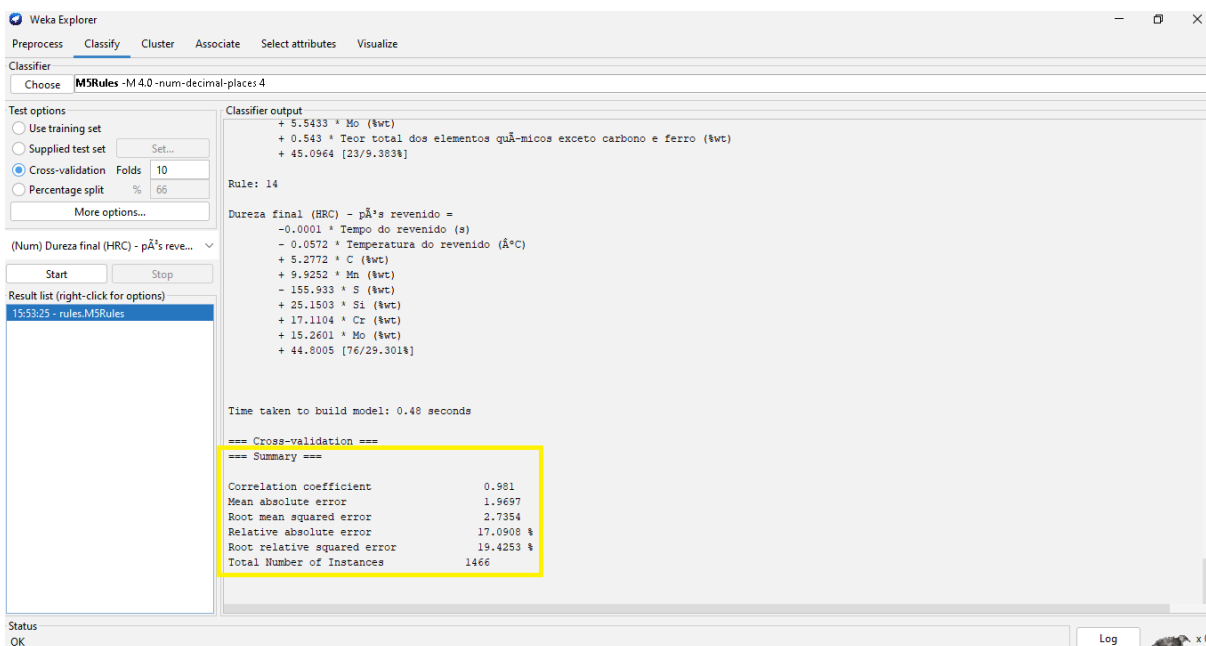


Figura 4.7 Resultado do desempenho do algoritmo rules.M5Rules no conjunto de dados de treinamento na WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

Após o treinamento do algoritmo rules.M5Rules, para validar o seu desempenho no conjunto de dados de teste foi selecionada a opção *Supplied test set* destacada no retângulo amarelo da figura 4.8.

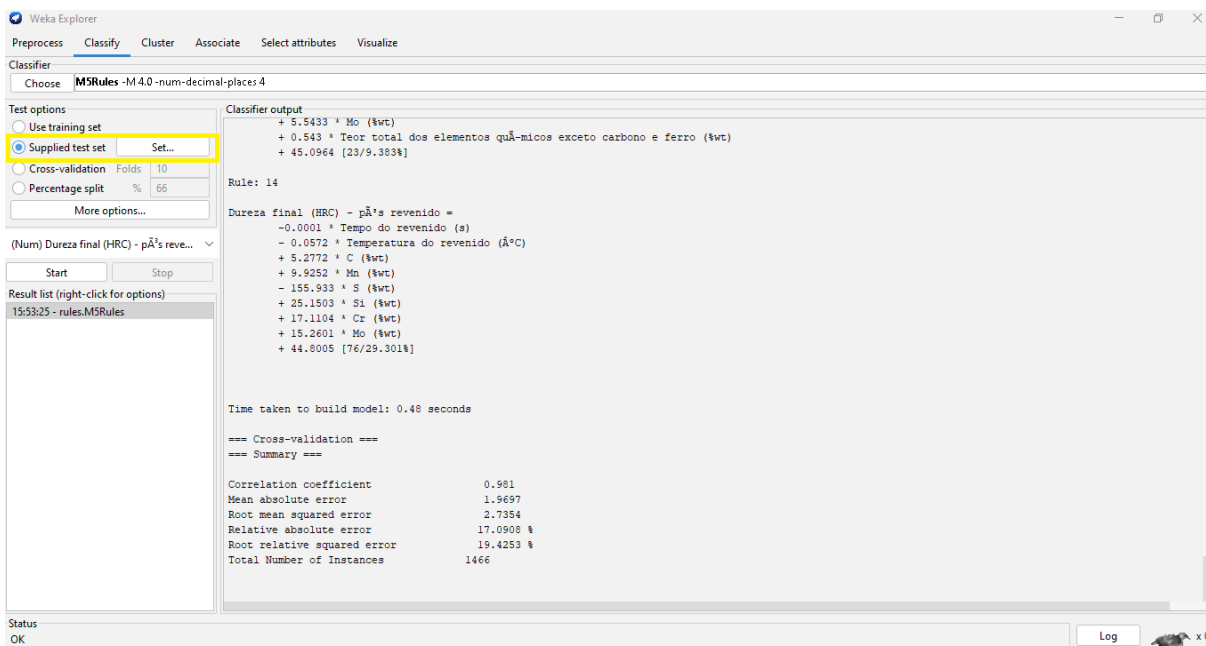


Figura 4.8 Seleção da opção *Supplied test set* para aferir o desempenho do algoritmo no conjunto de dados de teste na WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

Após clicar na opção *Set*, no botão *Open file* foi possível selecionar o arquivo do conjunto de dados de teste em formato .csv (esse arquivo precisa conter os mesmos 16 atributos utilizados no conjunto de dados de treinamento e disporem nomes iguais, na mesma sequência em suas colunas).

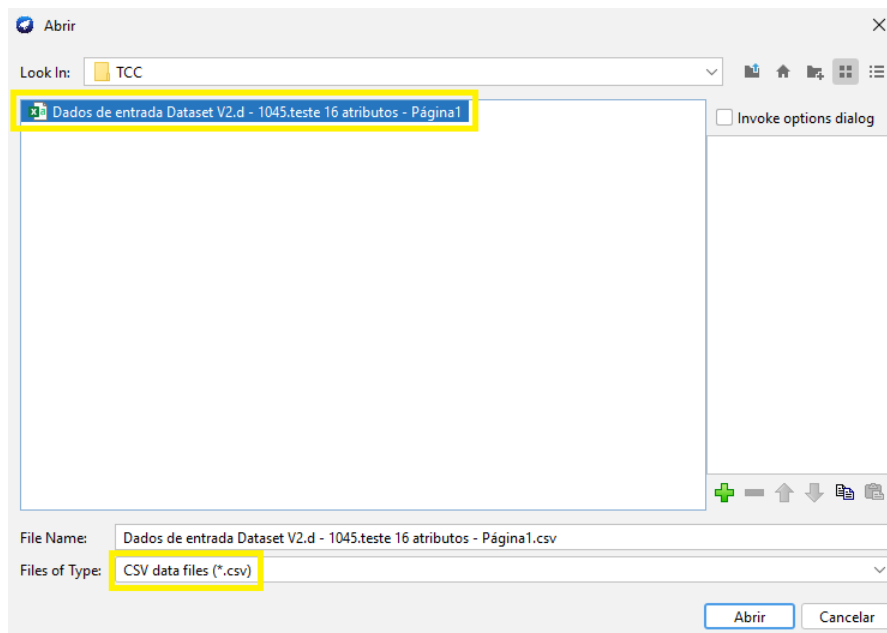


Figura 4.9 Seleção do arquivo do conjunto de dados de teste em formato .csv na WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.



Um protocolo de boas práticas na montagem de uma base de dados é colocar a variável que será predita, no caso do presente trabalho o atributo de “Dureza final (HRC) - pós revenido”, na última coluna do conjunto de dados. Esse ajuste também foi importante para a compatibilidade do conjunto de treinamento e de teste na execução das atividades na plataforma WEKA que apresentou problemas quando o atributo com os valores de dureza final estava em outra coluna que não a última.

Depois da seleção do arquivo do conjunto de dados de teste em formato .csv na WEKA, na aba *Classify* da seção “Weka Explorer” no canto inferior esquerdo onde consta a seção *Result list*, clicou-se com o botão direito sobre o resultado do algoritmo rules.M5Rules obtido com o conjunto de dados de treinamento e selecionou-se a opção *Re-evaluate model on current test set* destacada no retângulo amarelo da figura 4.10.

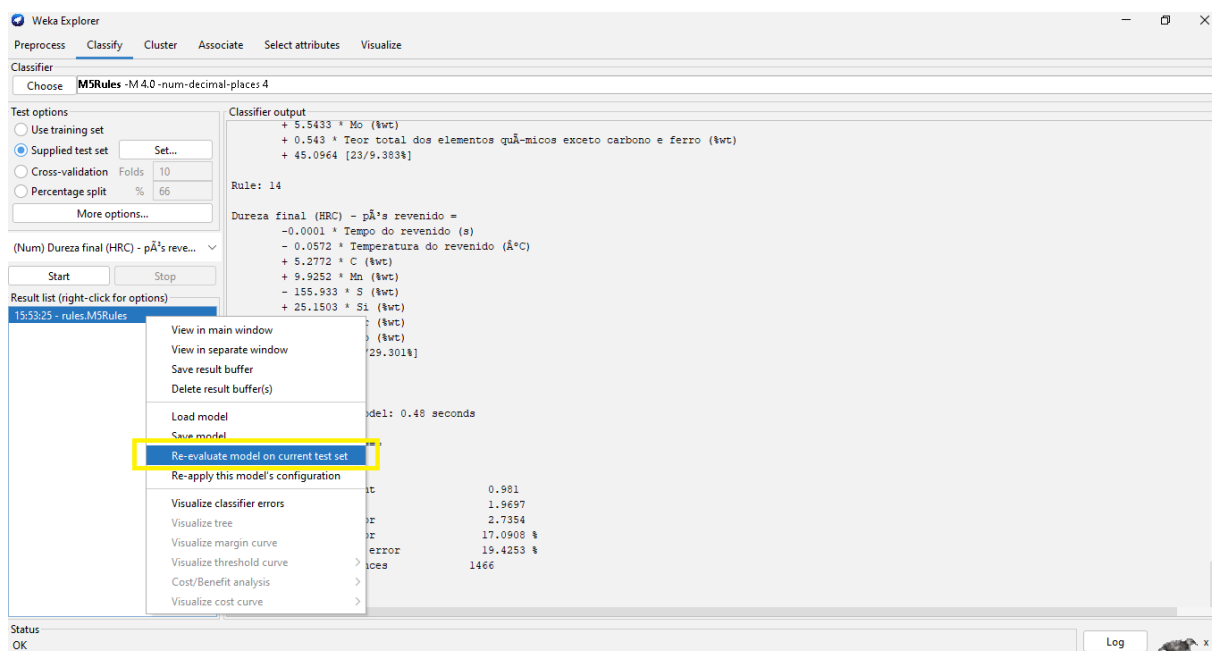


Figura 4.10 Seleção da opção *Re-evaluate model on current test set* na WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

Assim, o resultado do desempenho do algoritmo rules.M5Rules no conjunto de dados de teste foi apresentado na interface do software de forma resumida, em destaque no retângulo amarelo da figura 4.11, podendo ser observados os valores CC (*correlation coefficient*), MAE (*mean absolute error*) e RMSE (*root mean squared error*) que aferem de diferentes maneiras o desempenho das previsões realizadas pelo algoritmo.

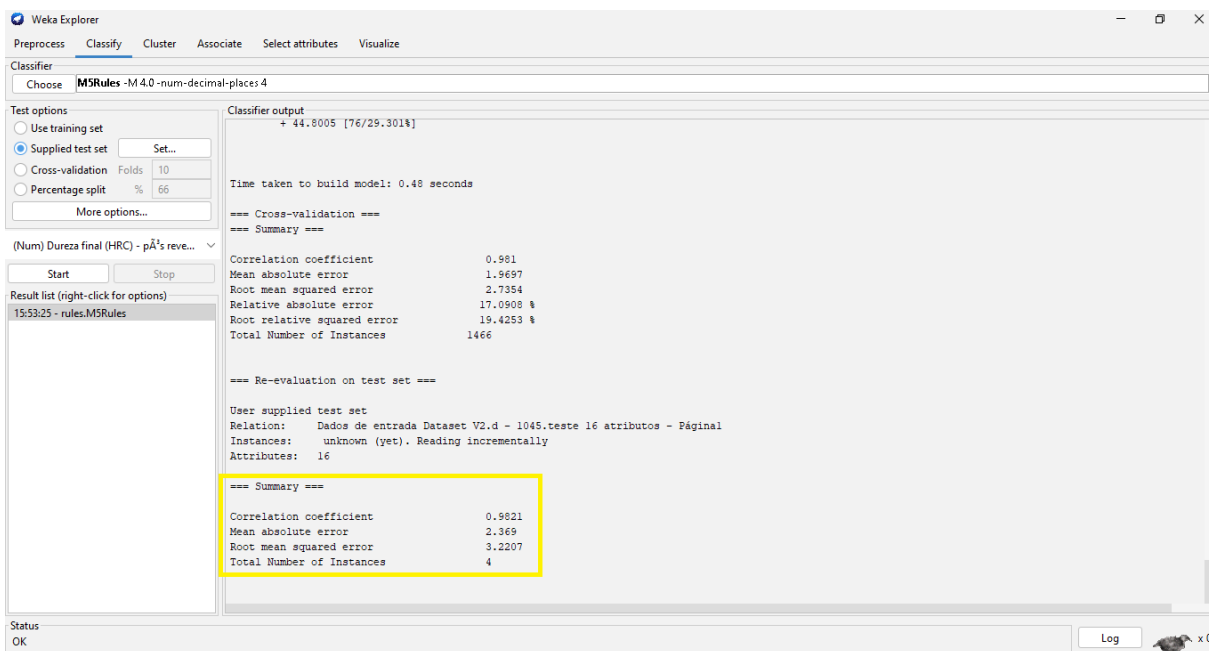


Figura 4.11 Resultado do desempenho do algoritmo rules.M5Rules no conjunto de dados de teste na WEKA.

Fonte: SAUER, 2023.

## 5.0 RESULTADOS

Os valores de dureza obtidos nas amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após a têmpera e após o revenimento estão resumidos na tabela 5.1.

Tabela 5.1 Dureza média das amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após a têmpera e após o revenimento.

	Dureza pós têmpera (HRC)				Dureza pós revenido (HRC)			
	Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3	Amostra 4	Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3	Amostra 4
SAE 1045	54.6	43.8	25.6	35.6	49	40.8	26.2	37.8
SAE 4140	54.8	52.6	52.8	52.2	50.4	48.6	51	47.8
DIN GGG50	59	56.6	59.4	-	54	52.4	53	-

(-): sem amostra

Fonte: SAUER, 2023.

Os resultados dos valores de composição química das ligas SAE 1045 e SAE 4140 estão mostrados na tabela 5.2.

Tabela 5.2 Medidas de composição química dos aços SAE 1045 e SAE 4140 produzidas em laboratório através do ensaio de espectrometria por emissão óptica (% em massa).

	C	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni	Al	Co	Cu	Nb	Ti	V	Sn	B
SAE 1045	0.4799	0.2049	0.593	0.0162	0.01	0.008	<0.005	<0.005	0.0421	<0.01	<0.01	<0.001	0.0019	<0.001	<0.001	0.0005
SAE 4140	0.41	0.2048	0.81	0.0176	0.0127	0.926	0.1571	0.1005	0.0234	0.0123	0.1948	0.0017	0.0016	0.0013	0.0229	0.0006

Fonte: SAUER, 2023.

Os elementos químicos presentes em cada uma das ligas, mostrados na tabela 5.2, com uma quantidade inferior aos limites de detecção do instrumento (Mo, Ni, Co, Cu, Nb, V e Sn) juntamente com os elementos químicos, que não constam na presente tabela, W (em quantidades maiores que 0,01% em massa) e Pb (em quantidades maiores que 0,002% em massa) que também obtiveram uma quantidade inferior aos limites de detecção do instrumento, foram definidos com uma quantidade de zero por cento em massa para cada uma dessas ligas de aço na sequência do trabalho.

É possível observar na tabela 5.3 os atributos contidos na base de dados montada para a presente pesquisa e os seus respectivos valores máximo, mínimo, médio e desvio padrão. Os valores máximo e mínimo foram extraídos da base de dados utilizada no presente trabalho e portanto a caracterizam. Notando-se, também, que cada atributo representa um parâmetro do processo de revenimento ou uma característica do material tratado termicamente. O conjunto de dados resultante foi disponibilizado na plataforma de dados da Kaggle e pode ser acessado em sua íntegra (Kaggle, 2023).

Tabela 5.3 Atributos contidos na base de dados utilizada na presente pesquisa com seus respectivos valores máximo, mínimo, médio e desvio padrão.

Atributo	Mínimo	Máximo	Média	Desvio Padrão
Dureza inicial (HRC) - pós tempera	46.5	67	61.494	5.656
Tempo do revenido (s)	10	115200	21969.754	34177.624
Temperatura do revenido (°C)	100	704.4	422.024	176.088
C (% em peso)	0.25	1.15	0.512	0.224
Mn (% em peso)	0.3	1.85	0.741	0.253
P (% em peso)	0.007	0.054	0.017	0.008
S (% em peso)	0.005	0.055	0.024	0.008
Si (% em peso)	0.06	1.62	0.239	0.239
Ni (% em peso)	0	3.41	0.363	0.81
Cr (% em peso)	0	1.57	0.390	0.481
Mo (% em peso)	0	0.36	0.080	0.121
V (% em peso)	0	0.16	0.005	0.029
Al (% em peso)	0	1.26	0.034	0.205
Cu (% em peso)	0	0.08	0.006	0.019
Dureza final (HRC) - pós revenido	0.9	68.5	41.468	14.079

Fonte: SAUER, 2023.

O resultado do ajuste de cada um dos 28 algoritmos disponíveis na plataforma da WEKA considerando as duas abordagens de treinamento dos modelos para a previsão da propriedade mecânica de dureza final (pós revenido) pode ser visualizado na tabela 5.4. Os algoritmos foram ordenados em sequência na tabela do menor para o maior valor RMSE (*root mean squared error*), o nome dos algoritmos pode ser visto à direita e a abordagem utilizada no treinamento do algoritmo pode ser vista à esquerda na tabela. Os demais valores CC (*correlation coefficient*), RRSE (*root relative squared error*), RAE (*relative absolute error*) e MAE (*mean absolute error*) que aferem de diferentes maneiras o desempenho das previsões realizadas pelos algoritmos são mostrados na tabela também.

Tabela 5.4 Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados de treinamento.

Abordagem de treinamento do algoritmo	CC	RRSE (%)	RAE (%)	MAE	RMSE	Algoritmo
1 (dataset com 15 atributos)	0.9879	16.886	14.5551	1.6782	2.3785	trees.RandomForest
2 (dataset com 16 atributos)	0.9869	17.6805	15.2784	1.7616	2.4904	trees.RandomForest
2 (dataset com 16 atributos)	0.9845	17.7728	16.1811	1.8657	2.5034	functions.MultilayerPerceptron
1 (dataset com 15 atributos)	0.984	18.2419	16.0511	1.8507	2.5695	meta.RandomCommittee
2 (dataset com 16 atributos)	0.984	18.3782	16.3903	1.8898	2.5887	meta.RandomCommittee
2 (dataset com 16 atributos)	0.9826	18.7157	16.3501	1.8852	2.6362	meta.Bagging
1 (dataset com 15 atributos)	0.9818	19.12	16.534	1.9064	2.6932	meta.Bagging
2 (dataset com 16 atributos)	0.9815	19.1344	16.4929	1.9017	2.6952	trees.M5P
1 (dataset com 15 atributos)	0.9811	19.3246	16.5984	1.9138	2.722	trees.M5P
2 (dataset com 16 atributos)	0.9795	20.2172	17.4505	2.0121	2.8477	rules.M5Rules
1 (dataset com 15 atributos)	0.9797	20.6609	18.4743	2.1301	2.9102	functions.MultilayerPerceptron
1 (dataset com 15 atributos)	0.9773	21.2018	18.619	2.1468	2.9864	rules.M5Rules
2 (dataset com 16 atributos)	0.9667	25.6039	22.9452	2.6457	3.6065	trees.REPTree
2 (dataset com 16 atributos)	0.9657	25.9345	24.073	2.7757	3.653	meta.RegressionByDiscretization
1 (dataset com 15 atributos)	0.965	26.2693	23.1949	2.6744	3.7002	trees.REPTree
1 (dataset com 15 atributos)	0.9623	27.2262	24.4531	2.8195	3.835	meta.RegressionByDiscretization
1 (dataset com 15 atributos)	0.9609	27.8142	24.5379	2.8293	3.9178	trees.RandomTree
2 (dataset com 16 atributos)	0.9488	32.0059	29.1331	3.3591	4.5082	meta.RandomizableFilteredClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	0.9432	33.205	30.8865	3.5613	4.6771	functions.LinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0.9431	33.2129	30.8854	3.5612	4.6782	functions.LinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0.9433	33.3433	29.6141	3.4146	4.6966	trees.RandomTree
2 (dataset com 16 atributos)	0.9422	33.5087	30.8224	3.5539	4.7199	functions.SMOreg
1 (dataset com 15 atributos)	0.9421	33.5202	30.8375	3.5557	4.7215	functions.SMOreg
2 (dataset com 16 atributos)	0.9396	34.2343	31.5405	3.6367	4.8221	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0.9394	34.2799	31.581	3.6414	4.8285	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0.9402	34.6179	30.7577	3.5465	4.8761	meta.RandomizableFilteredClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0.9256	37.8884	32.4393	3.7404	5.3368	rules.DecisionTable
2 (dataset com 16 atributos)	0.9273	37.9331	36.9397	4.2593	5.3431	meta.AdditiveRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.9273	37.9331	36.9397	4.2593	5.3431	meta.AdditiveRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.9241	38.2634	32.6874	3.769	5.3896	rules.DecisionTable
2 (dataset com 16 atributos)	0.9253	38.4144	30.5675	3.5245	5.4109	lazy.KStar
1 (dataset com 15 atributos)	0.9253	38.4217	30.5743	3.5253	5.4119	lazy.KStar
1 (dataset com 15 atributos)	0.9106	44.5508	40.2966	4.6463	6.2753	lazy.IBk
2 (dataset com 16 atributos)	0.9094	44.804	40.5512	4.6757	6.3109	lazy.IBk
2 (dataset com 16 atributos)	0.92	45.2449	41.4596	4.7804	6.373	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0.8684	49.5487	47.3558	5.4603	6.9792	functions.SimpleLinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.8684	49.5487	47.3558	5.4603	6.9792	functions.SimpleLinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.9205	50.8691	49.1959	5.6724	7.1652	meta.RandomSubSpace
1 (dataset com 15 atributos)	0.7956	60.6	59.1302	6.8179	8.5359	lazy.LWL
2 (dataset com 16 atributos)	0.7944	60.7817	59.3942	6.8483	8.5615	lazy.LWL
1 (dataset com 15 atributos)	0.7535	65.6923	64.4239	7.4283	9.2532	trees.DecisionStump
2 (dataset com 16 atributos)	0.7535	65.6923	64.4239	7.4283	9.2532	trees.DecisionStump
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.CVParameterSelection
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.MultiScheme
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.Stacking
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.Vote
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	misc.InputMappedClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.CVParameterSelection
2 (dataset com 16 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	rules.ZeroR
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.MultiScheme
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.Stacking
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.Vote
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	misc.InputMappedClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	-0.0532	100	100	11.5303	14.0856	rules.ZeroR

LEGENDA: CC - Correlation coefficient; RRSE - Root relative squared error; RAE - Relative absolute error; MAE - Mean absolute error; RMSE - Root mean squared error

Fonte: SAUER, 2023.

Após o ajuste dos 28 modelos (algoritmos) de aprendizado de máquina com as duas abordagens de treinamento propostas, foi feita a validação deles no conjunto de dados teste (obtidos através dos ensaios práticos das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50), gerando 56 testes de validação para cada uma das 3 ligas ferrosas ensaiadas.

O resultado desses testes de validação dos modelos para a previsão da propriedade mecânica de dureza final foram compilados nas tabelas 5.5, 5.6 e 5.7 respectivamente. Os algoritmos foram ordenados em sequência na tabela do menor para o maior valor RMSE (*root mean squared error*), o nome dos algoritmos pode ser visto à direita e a abordagem utilizada no treinamento do algoritmo pode ser vista à esquerda na tabela. Os demais valores CC (*correlation coefficient*) e MAE (*mean absolute error*) que aferem de diferentes maneiras o desempenho das previsões realizadas pelos algoritmos são mostrados na tabela também.

Tabela 5.5 Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste da liga de aço SAE 1045.

Abordagem de treinamento do algoritmo	CC	MAE	RMSE	Algoritmo
2 (dataset com 16 atributos)	0.9821	2.369	3.4677	rules.M5Rules
2 (dataset com 16 atributos)	0.9821	3.1452	3.8059	functions.SMOreg
1 (dataset com 15 atributos)	0.9821	3.1492	3.8274	functions.SMOreg
2 (dataset com 16 atributos)	0.9821	2.8949	3.8619	functions.LinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.9821	3.1235	3.8635	functions.LinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0.7451	6.425	8.6555	meta.RandomizableFilteredClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.CVParameterSelection
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.CVParameterSelection
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.MultiScheme
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.MultiScheme
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.Stacking
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.Stacking
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.Vote
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.Vote
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	misc.InputMappedClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	misc.InputMappedClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	6.784	8.7141	rules.ZeroR
1 (dataset com 15 atributos)	0	6.784	8.7141	rules.ZeroR
2 (dataset com 16 atributos)	0.9821	8.9844	9.1315	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0.9821	9.3365	9.4731	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.7779	9.5857	meta.AdditiveRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.7779	9.5857	meta.AdditiveRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.9821	7.8951	9.9532	rules.M5Rules
1 (dataset com 15 atributos)	0.7451	8.6986	10.8728	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0	9.0261	11.0955	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0.9883	10.7827	11.4906	functions.MultilayerPerceptron
2 (dataset com 16 atributos)	0	9.3667	11.567	trees.REPTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	9.3667	11.567	trees.REPTree
2 (dataset com 16 atributos)	0.9821	10.2894	12.7962	trees.M5P
1 (dataset com 15 atributos)	0.9821	10.3917	12.8924	trees.M5P
2 (dataset com 16 atributos)	0	10.93	13.6489	rules.DecisionTable
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.1625	13.8358	rules.DecisionTable
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.3743	14.0072	meta.Bagging
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.3743	14.0072	meta.Bagging
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.4917	14.1027	functions.SimpleLinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.4917	14.1027	functions.SimpleLinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.5675	14.1646	meta.RandomCommittee
1 (dataset com 15 atributos)	0.7451	11.7672	14.3088	trees.RandomForest
2 (dataset com 16 atributos)	0.7451	11.9144	14.4447	trees.RandomForest
1 (dataset com 15 atributos)	0.7451	12.0457	14.5574	lazy.KStar
2 (dataset com 16 atributos)	0.7451	12.0542	14.5644	lazy.KStar
1 (dataset com 15 atributos)	-0.8652	11.225	14.6386	meta.RandomizableFilteredClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	0	12.225	14.7064	meta.RandomCommittee
2 (dataset com 16 atributos)	0	12.5247	14.9565	trees.DecisionStump
1 (dataset com 15 atributos)	0	12.5247	14.9565	trees.DecisionStump
1 (dataset com 15 atributos)	0	12.839	15.2206	meta.RegressionByDiscretization
2 (dataset com 16 atributos)	0	12.839	15.2206	meta.RegressionByDiscretization
1 (dataset com 15 atributos)	0	13.55	15.825	lazy.IBk
2 (dataset com 16 atributos)	0	13.55	15.825	lazy.IBk
2 (dataset com 16 atributos)	0	13.55	15.825	trees.RandomTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	13.55	15.825	trees.RandomTree
1 (dataset com 15 atributos)	0.8024	14.3452	16.4923	lazy.LWL
2 (dataset com 16 atributos)	0.7955	14.4032	16.5454	lazy.LWL
1 (dataset com 15 atributos)	-0.1387	14.8934	17.0048	functions.MultilayerPerceptron

LEGENDA: CC - Correlation coefficient; MAE - Mean absolute error; RMSE - Root mean squared error

Fonte: SAUER, 2023.



Tabela 5.6 Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste da liga de aço SAE 4140.

Abordagem de treinamento do algoritmo	CC	MAE	RMSE	Algoritmo
1 (dataset com 15 atributos)	0.586	1.1077	1.1977	rules.M5Rules
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.25	1.2991	meta.RandomCommittee
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.3054	trees.RandomForest
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.25	1.3187	trees.RandomForest
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.3229	lazy.IBk
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.3229	meta.RandomizableFilteredClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.25	1.3229	lazy.IBk
1 (dataset com 15 atributos)	-0.7367	1.2505	1.3253	lazy.KStar
2 (dataset com 16 atributos)	-0.7369	1.2502	1.326	lazy.KStar
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.3708	meta.RandomCommittee
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.3854	meta.Bagging
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.25	1.3854	meta.Bagging
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.25	1.389	functions.SimpleLinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.389	functions.SimpleLinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.586	1.2135	1.463	trees.M5P
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.25	1.5	trees.RandomTree
2 (dataset com 16 atributos)	0.586	1.3053	1.6426	trees.M5P
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.3	1.6703	trees.RandomTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.3639	1.688	meta.AdditiveRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.3639	1.688	meta.AdditiveRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.5373	2.003	trees.DecisionStump
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.5373	2.003	trees.DecisionStump
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.6607	2.1084	meta.RegressionByDiscretization
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.6607	2.1084	meta.RegressionByDiscretization
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.8167	3.1018	trees.REPTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	2.8167	3.1018	trees.REPTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	3.031	3.2976	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0.586	3.4227	3.5905	rules.M5Rules
2 (dataset com 16 atributos)	0	3.3708	3.6124	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0.5872	3.4498	3.6832	lazy.LWL
1 (dataset com 15 atributos)	0.5868	3.458	3.6905	lazy.LWL
1 (dataset com 15 atributos)	0.9623	6.25	6.2841	meta.RandomizableFilteredClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	0.586	6.3801	6.4752	functions.LinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0.586	6.4163	6.5106	functions.SMOreg
2 (dataset com 16 atributos)	0.586	6.5194	6.6121	functions.SMOreg
2 (dataset com 16 atributos)	0.586	7.0358	7.1221	functions.LinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	meta.CVParameterSelection
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	meta.MultiScheme
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	meta.Stacking
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	meta.Vote
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	meta.CVParameterSelection
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	misc.InputMappedClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	meta.MultiScheme
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	rules.DecisionTable
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	meta.Stacking
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	meta.Vote
1 (dataset com 15 atributos)	0	7.982	8.087	rules.ZeroR
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	misc.InputMappedClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	rules.DecisionTable
2 (dataset com 16 atributos)	0	7.982	8.087	rules.ZeroR
2 (dataset com 16 atributos)	0.586	8.1764	8.2441	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0.586	8.2504	8.3174	functions.GaussianProcesses
2 (dataset com 16 atributos)	-0.5777	67.5948	67.6092	functions.MultilayerPerceptron
1 (dataset com 15 atributos)	0.5946	74.4911	74.4993	functions.MultilayerPerceptron

LEGENDA: CC - Correlation coefficient; MAE - Mean absolute error; RMSE - Root mean squared error

Fonte: SAUER, 2023.



Tabela 5.7 Resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste da liga de ferro fundido DIN GGG50.

Abordagem de treinamento do algoritmo	CC	MAE	RMSE	Algoritmo
1 (dataset com 15 atributos)	0.6971	0.5366	0.5372	rules.M5Rules
2 (dataset com 16 atributos)	0.6951	0.6897	0.7381	lazy.LWL
1 (dataset com 15 atributos)	0.695	0.6966	0.7496	lazy.LWL
1 (dataset com 15 atributos)	0	0.7333	0.9866	trees.RandomTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.0167	1.2121	trees.REPTree
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.0167	1.2121	trees.REPTree
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.0814	1.2668	meta.AdditiveRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.0814	1.2668	meta.AdditiveRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.6067	1.737	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0	1.8994	2.0108	meta.Bagging
1 (dataset com 15 atributos)	0	1.8994	2.0108	meta.Bagging
1 (dataset com 15 atributos)	0.7857	1.9081	2.0115	trees.RandomForest
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.0133	2.1187	meta.RandomCommittee
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.0667	2.1695	meta.RandomizableFilteredClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.0667	2.1695	trees.RandomTree
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.1225	2.2228	trees.RandomForest
1 (dataset com 15 atributos)	0	2.1586	2.2573	trees.DecisionStump
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.1586	2.2573	trees.DecisionStump
2 (dataset com 16 atributos)	0	2.2254	2.3212	meta.RandomSubSpace
2 (dataset com 16 atributos)	0.1505	2.402	2.4904	lazy.KStar
1 (dataset com 15 atributos)	0	2.72	2.7989	meta.RandomCommittee
1 (dataset com 15 atributos)	0.17	3.1898	3.256	lazy.KStar
1 (dataset com 15 atributos)	0	3.1916	3.2591	functions.SimpleLinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0	3.1916	3.2591	functions.SimpleLinearRegression
1 (dataset com 15 atributos)	0	3.7956	3.8525	meta.ReggressionByDiscretization
2 (dataset com 16 atributos)	0	3.7956	3.8525	meta.ReggressionByDiscretization
1 (dataset com 15 atributos)	-0.7857	3.9667	4.2154	lazy.IBk
1 (dataset com 15 atributos)	0	4.3667	4.4163	meta.RandomizableFilteredClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	5.1667	5.2086	lazy.IBk
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.CVParameterSelection
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.MultiScheme
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.Stacking
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.Vote
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	misc.InputMappedClassifier
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	rules.DecisionTable
1 (dataset com 15 atributos)	0	11.6653	11.684	rules.ZeroR
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.CVParameterSelection
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.MultiScheme
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.Stacking
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.Vote
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	meta.WeightedInstancesHandlerWrapper
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	misc.InputMappedClassifier
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	rules.DecisionTable
2 (dataset com 16 atributos)	0	11.6653	11.684	rules.ZeroR
1 (dataset com 15 atributos)	0.6971	29.2209	29.2254	trees.M5P
2 (dataset com 16 atributos)	0.6971	30.1363	30.1406	trees.M5P
2 (dataset com 16 atributos)	0.6971	30.1363	30.1406	rules.M5Rules
2 (dataset com 16 atributos)	0.6951	62.1496	62.1643	functions.MultilayerPerceptron
1 (dataset com 15 atributos)	0.6971	63.1538	63.1556	functions.LinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0.6971	64.2323	64.234	functions.LinearRegression
2 (dataset com 16 atributos)	0.6971	66.0486	66.0503	functions.SMOreg
1 (dataset com 15 atributos)	0.6971	66.1957	66.1975	functions.SMOreg
2 (dataset com 16 atributos)	0.6971	68.346	68.3488	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0.6971	68.7367	68.7396	functions.GaussianProcesses
1 (dataset com 15 atributos)	0.7004	86.503	86.5043	functions.MultilayerPerceptron

LEGENDA: CC - Correlation coefficient; MAE - Mean absolute error; RMSE - Root mean squared error

Fonte: SAUER, 2023.

É possível observar, nas tabelas 5.5, 5.6 e 5.7 que mostram o resultado do desempenho dos algoritmos no conjunto de dados teste das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50, que enquanto para a liga SAE 1045 o teste de validação com o menor valor RMSE foi do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 2 (conjunto de dados com 16 atributos), para as outras duas ligas SAE 4140 e DIN GGG50 os testes de validação com o menor valor RMSE foram igualmente do algoritmo M5.Rules, porém, treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos). Assim, de maneira prévia, o algoritmo M5.Rules aponta-se como o modelo de aprendizado de máquina destaque, com o melhor desempenho dentre os 28 algoritmos da WEKA aplicados na presente pesquisa, para as predições de dureza.

E complementarmente, para fins de registro, durante a aplicação do algoritmo `rules.M5Rules` no presente estudo, foram utilizados os seguintes parâmetros *batchSize*, *buildRegressionTree*, *debug*, *doNotCheckCapabilities*, *minNumInstances*, *numDecimalPlaces*, *unpruned* e *useUnsmoothed* conforme seus respectivos valores mostrados na figura 5.1. É importante notar que esses parâmetros estão configurados de acordo com as predefinições da versão 3.8.6 do software WEKA. Todos os outros 27 algoritmos usados nessa pesquisa foram aplicados com suas configurações padrão, também, compatíveis com essa versão do software.

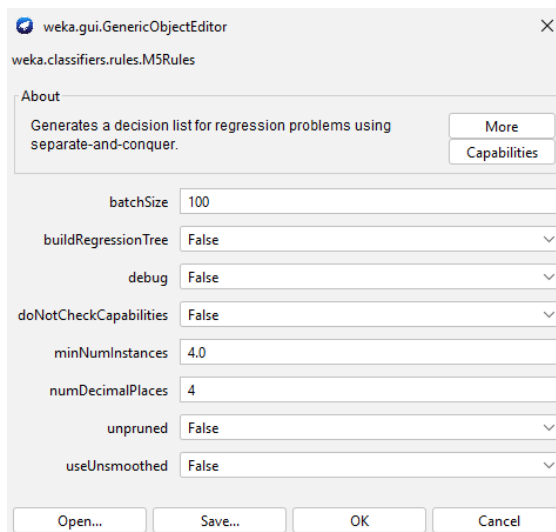


Figura 5.1 Parâmetros utilizados no algoritmo `rules.M5Rules` no presente estudo.

Fonte: SAUER, 2023.

## 6.0 DISCUSSÕES

Na tabela 6.1 seguem resumidas as predições de dureza do algoritmo M5.Rules para cada uma das amostras da liga SAE 1045 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45min, com as informações detalhadas dos valores da dureza inicial, da dureza final REAL (obtida através do ensaio de dureza da amostra), da dureza final PREVISTA (obtida através do algoritmo M5.Rules) e do ERRO (calculado como a diferença entre os valores finais de dureza prevista e real).

Tabela 6.1 Predições de dureza do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 2 (conjunto de dados com 16 atributos) para as amostras da liga SAE 1045 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45 min.

	SAE 1045			
	Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3	Amostra 4
Dureza inicial (HRC) - pós têmpera	54.6	43.8	25.6	35.6
Dureza final (HRC) - pós revenido <b>REAL</b>	49	40.8	26.2	37.8
Dureza final (HRC) - pós revenido <b>PREVISTA</b>	47.212	41.851	32.818	37.781
ERRO (HRC)	-1.788	1.051	6.618	-0.019
Abordagem de treinamento do algoritmo	2 ( <i>dataset</i> com 16 atributos)			

Fonte: SAUER, 2023.

É possível perceber, a partir da medida de dureza inicial da amostra 3 da liga SAE 1045 mostrada na tabela 6.1, que no processo de têmpera a transformação da microestrutura martensítica nessa amostra foi praticamente nula ou inexistente. Não por acaso ela foi a amostra que obteve o maior valor ERRO dentre as 4 ensaiadas. Isso pode ser explicado pelo fato de que todos os dados contidos no conjunto de dados de treinamento do algoritmo foram obtidos de aços martensíticos, o que não foi o caso dessa amostra. A capacidade do algoritmo de generalizar um dado de saída com acuracidade para essa nova situação, como a qual de um aço com outra microestrutura além da martensita ser submetido ao revenimento, foi afetada negativamente visto que no treinamento do algoritmo não foi obtida nenhuma informação relacionada a isso.

As amostras 2 e 4, por outro lado, obtiveram uma microestrutura parcialmente martensítica da têmpera, por dedução das suas medidas de dureza inicial mostradas na tabela 6.1, e as previsões do algoritmo apresentaram resultados melhores.

Em duas hipóteses, para garantir a transformação completa da martensita nas amostras da liga SAE 1045 ensaiadas em função da sua temperabilidade característica, duas medidas poderiam ser realizadas: o tempo de encharcamento de 10min deve ser idealmente ajustado para um intervalo entre 20min e 30min, mantendo a temperatura de 880°C utilizada; ou o meio de têmpera deve ser redefinido para acelerar a taxa de resfriamento das amostras.

Na tabela 6.2 seguem resumidas as previsões de dureza do algoritmo M5.Rules para cada uma das amostras da liga SAE 4140 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45min, com as informações detalhadas dos valores da dureza inicial, da dureza final REAL (obtida através do ensaio de dureza da amostra), da dureza final PREVISTA (obtida através do algoritmo M5.Rules) e do ERRO (calculado como a diferença entre os valores finais de dureza prevista e real).

Tabela 6.2 Previsões de dureza do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos) para as amostras da liga SAE 4140 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45 min.

	SAE 4140			
	Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3	Amostra 4
Dureza inicial (HRC) - pós têmpera	54.8	52.6	52.8	52.2
Dureza final (HRC) - pós revenido <b>REAL</b>	50.4	48.6	51	47.8
Dureza final (HRC) - pós revenido <b>PREVISTA</b>	49.923	49.476	49.517	49.395
ERRO (HRC)	-0.477	0.876	-1.483	1.595
Abordagem de treinamento do algoritmo	1 ( <i>dataset</i> com 15 atributos)			

Fonte: SAUER, 2023.

Já na tabela 6.3 seguem resumidas as previsões de dureza do algoritmo M5.Rules para cada uma das amostras da liga DIN GGG50 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45min, com as informações detalhadas dos valores da dureza inicial, da dureza final REAL (obtida através do ensaio de dureza da amostra), da dureza final PREVISTA (obtida através do algoritmo M5.Rules) e do ERRO (calculado como a diferença entre os valores finais de dureza prevista e real).

Tabela 6.3 Predições de dureza do algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos) para as amostras da liga DIN GGG50 submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um tempo de 45 min.

	DIN GGG50		
	Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3
Dureza inicial (HRC) - pós têmpera	59	56.6	59.4
Dureza final (HRC) - pós revenido <b>REAL</b>	54	52.4	53
Dureza final (HRC) - pós revenido <b>PREVISTA</b>	53.428	52.926	53.511
ERRO (HRC)	-0.572	0.526	0.511
Abordagem de treinamento do algoritmo	1 ( <i>dataset</i> com 15 atributos)		

Fonte: SAUER, 2023.

Para aferir a capacidade de generalização do modelo para novos dados como os encontrados no ensaio da liga DIN GGG50 (ferro fundido nodular) com níveis de teores de carbono e silício em massa (estimados para 3,6 e 2,55% em massa respectivamente na seção 4.4) mais elevados aos contidos no conjunto de dados de treinamento (com o carbono e o silício em teores máximos de 1,15 e 1,62% em massa respectivamente), a abordagem 2 de treinamento descrita na seção 4.7, em que há a adição do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)”, foi propositadamente considerada na metodologia do presente trabalho, visto a equivalência de valores nesse atributo entre a liga DIN GGG50 ensaiada e os aços ao carbono e de baixo teor em liga contidos no conjunto de dados de treinamento. Verifica-se que enquanto para os 35 aços com composição química distintas entre si, do conjunto de treinamento, o valor do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)” varia entre um mínimo de 0,713 a um máximo de 4,385 % em massa, para a liga DIN GGG50 o valor desse atributo está 3,305 % em massa e está contido na faixa dos valores mínimo e máximo dos 35 aços contidos na base de dados, o que constata um ponto de afinidade entre os dados da liga DIN GGG50 e os dados do conjunto de treinamento do algoritmo.

Portanto, a adição do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)” nos dados do conjunto de treinamento e teste foi realizada na tentativa de auxiliar a capacidade de generalização do modelo nessas situações.

Apesar disso, verificou-se conforme mostrado na tabela 6.3 que o teste de validação com melhor desempenho nas predições de dureza para as amostras da liga DIN GGG50, submetidas a um tratamento térmico de revenimento a uma temperatura de 300°C para um

tempo de 45 min, ainda assim, foi obtido pelo algoritmo M5.Rules treinado justamente com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos), isso é, sem a consideração do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)”.

Excepcionalmente, verificou-se também que a adição do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em massa)” afetou a influência do atributo “Dureza inicial (HRC) - pós revenido” proposto por Penha (2010) para o cálculo da previsão da dureza final, quando compara-se as regras geradas pelo algoritmo M5.Rules nos 2 diferentes cenários de treinamento do algoritmo.

Na interpretação dos resultados do algoritmo M5.Rules, quando o algoritmo foi treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos), ele constituiu 22 regras (*rules*) para a previsão do atributo dureza final - pós têmpera, elas podem ser visualizadas no Anexo A.

Se os dados de entrada forem atendidos na condição IF da primeira regra, então o cálculo da dureza final é realizado com base na equação proposta dentro dessa regra, porém se a condição IF da regra 1 não é satisfeita, então a segunda regra é processada e assim conseguinte até à 22ª regra gerada pelo algoritmo.

Ao analisar essas 22 regras, mostradas no Anexo A, é possível observar os seguintes atributos com maior influência para o cálculo da previsão da dureza final realizado pelo algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 1 (conjunto de dados com 15 atributos) no presente trabalho: num primeiro nível de maior influência os atributos Temperatura do revenido (°C) e Tempo do revenido (s) que constam na condição IF da regra 1, num segundo nível de maior influência os atributos C (%wt) e Cr (%wt) que constam na condição IF da regra 2, num terceiro nível de maior influência o atributo P (%wt) que consta na condição IF da regra 8, num quarto nível de maior influência o atributo S (%wt) que consta na condição IF da regra 10, num quinto nível de maior influência o atributo Dureza inicial (HRC) - pós têmpera que consta na condição IF da regra 14 e num sexto nível de maior influência o atributo Mn (%wt) que consta na condição IF da regra 21.

Já quando o algoritmo M5.Rules foi treinado com a abordagem 2 (conjunto de dados com 16 atributos), ele constituiu 14 regras (*rules*) para a previsão do atributo dureza final - pós têmpera, elas podem ser visualizadas no Anexo B.

Como citado anteriormente, se os dados de entrada forem atendidos na condição IF da primeira regra, então o cálculo da dureza final é realizado com base na equação proposta dentro dessa regra, porém se a condição IF da regra 1 não é satisfeita, então a segunda regra é processada e assim conseguinte até à 14ª regra gerada pelo algoritmo.

Ao analisar essas 14 regras, mostradas no Anexo B, é possível observar os seguintes atributos com maior influência para o cálculo da previsão da dureza final realizado pelo algoritmo M5.Rules treinado com a abordagem 2 (conjunto de dados com 16 atributos) no presente trabalho: num primeiro nível de maior influência os atributos Temperatura do revenido (°C), C (%wt), Tempo do revenido (s) que constam na condição IF da regra 1, num segundo nível de maior influência o atributo Dureza inicial (HRC) - pós têmpera que consta na condição IF da regra 2, num terceiro nível de maior influência o atributo Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt) que consta na condição IF da regra 5, num quarto nível de maior influência o atributo Cr (%wt) que consta na condição IF da regra 8 e num quinto nível de maior influência o atributo S (%wt) que consta na condição IF da regra 9.

Assim, os atributos com maior influência para o cálculo da previsão da dureza final realizado pelo algoritmo M5.Rules nos 2 diferentes cenários de treinamento do algoritmo foram resumidos na tabela 6.4. É possível notar à esquerda da tabela o nível de influência do atributo e abaixo dos atributos o número da regra em que eles estão contidos, que foi constituída pelo algoritmo M5.Rules para o cálculo da previsão da dureza final.

Tabela 6.4 Influência dos atributos para o cálculo da previsão da dureza final realizado pelo algoritmo M5.Rules.

Abordagem de treinamento	Influência dos atributos para o cálculo da previsão da dureza final	
	1 (dataset com 15 atributos)	2 (dataset com 16 atributos)
1º nível de maior influência	Temperatura do revenido (°C) Tempo do revenido (s) <i>regra 1</i>	Temperatura do revenido (°C) Tempo do revenido (s) C (% em peso) <i>regra 1</i>
2º nível de maior influência	C (% em peso) Cr (% em peso) <i>regra 2</i>	Dureza inicial (HRC) - pós têmpera <i>regra 2</i>
3º nível de maior influência	P (% em peso) <i>regra 8</i>	Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (% em peso) <i>regra 5</i>
4º nível de maior influência	S (% em peso) <i>regra 10</i>	Cr (% em peso) <i>regra 8</i>
5º nível de maior influência	Dureza inicial (HRC) - pós têmpera <i>regra 14</i>	S (% em peso) <i>regra 9</i>
6º nível de maior influência	Mn (% em peso) <i>regra 21</i>	

Fonte: SAUER, 2023.

Ao analisar a tabela 6.4, primeiramente, é possível destacar na abordagem 1 de treinamento as seguintes 4 observações abaixo:

- A baixa influência do atributo “Dureza inicial (HRC) - pós têmpera” proposto por Penha (2010) que consta na condição IF da regra 14.
- A relevância dos atributos Temperatura do revenido (°C) e Tempo do revenido (s) que constam na condição IF da regra 1, conforme o preconizado na literatura através dos parâmetros de revenido existentes.
- Dentre todos os elementos químicos, C e Cr obtiveram igualmente a maior influência para o cálculo da previsão da dureza final, evidenciado pelos atributos C (%wt) e Cr (%wt) que constam na condição IF da regra 2.
- A notória presença dos elementos químicos P e S que normalmente estão em teores residuais nos aços, evidenciada pelos atributos P (%wt) que consta na condição IF da regra 8 e S (%wt) que consta na condição IF da regra 10, que estão entre os elementos químicos com maior influência para o cálculo da previsão da dureza final.

Já ao analisar, comparativamente, a influência dos atributos para o cálculo da previsão da dureza final realizado pelo algoritmo M5.Rules nos 2 diferentes cenários de treinamento do algoritmo, é possível perceber que com a adição do atributo “Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)” utilizada na abordagem 2 de treinamento, há algumas mudanças nas regras constituídas pelo algoritmo para o cálculo da previsão da dureza final, havendo mudanças nos níveis de influências dos atributos no cálculo da dureza final, com destaque para seguintes 5 observações abaixo:

- O aumento substancial da influência do atributo “Dureza inicial (HRC) - pós têmpera” proposto por Penha (2010) que consta na condição IF da regra 2, num segundo nível de maior influência dentre todos os atributos.
- O aumento da influência do atributo C (%wt) que foi posto conjuntamente com os atributos Temperatura do revenido (°C) e Tempo do revenido (s), preconizados na literatura através dos parâmetros de revenido existentes, na condição IF da regra 1, num primeiro nível de maior influência dentre todos os atributos.
- A influência do atributo Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt) que consta na condição IF da regra 5, num terceiro nível de maior influência dentre todos os atributos.
- Exceto pelo elemento químico carbono (C), Cr e S obtiveram a maior influência para o cálculo da previsão da dureza final, evidenciado pelos



atributos Cr (%wt) que consta na condição IF da regra 8 e S (%wt) que consta na condição IF da regra 9, no quarto e quinto nível de maior influência dentre todos os atributos.

- E por fim, a diminuição da influência dos elementos químicos P e Mn, evidenciada pela ausência dos atributos P (%wt) e Mn (%wt) em qualquer uma das condições IF das 14 regras geradas pelo algoritmo.

A influência dos elementos químicos Mg (presente na liga DIN GGG50), Ti e B (presente nas ligas SAE 1045 e SAE 4140), e Co, Nb, V e Sn (presentes na liga SAE 4140) sobre a dureza final dessas ligas ferrosas após o revenimento não foi avaliada na presente pesquisa, uma vez que não continha nenhuma informação sobre esses elementos químicos nos dados experimentais de revenimento extraídos da literatura.

Apesar do algoritmo M5.Rules ter se despontado como destaque dentre os 28 algoritmos da WEKA aplicados na presente pesquisa, tendo obtido dentre todos o melhor compromisso entre viés e variância vide Hastie et al. (2021), é importante ressaltar que a quantidade de dados do conjunto teste das amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 foi pequena, o que impede tecnicamente a conclusão dos resultados, e portanto sugere que mais dados dessas ligas poderiam ser adquiridos para novos testes de validação dos modelos a fim de provar que os resultados encontrados na presente pesquisa não foram uma coincidência estatística.

Além disso, dadas as características da base de dados utilizada no presente trabalho, com aproximadamente 65% de suas instâncias com valores faltantes de dureza inicial (949 instâncias de dados - ou seja, em 949 ensaios de revenimento não havia essa informação especificada) é prudente avaliar as técnicas de aprendizado de máquina mais adequadas para si. Na prática, também, não se sabe exatamente como que cada um dos 28 algoritmos da WEKA aplicados na presente pesquisa considerou os dados faltantes de dureza inicial, alguns deles inclusive podem ter simplesmente ignorado todos valores desse atributo porque não havia essa informação para todas as instâncias (1466) do conjunto de dados de treinamento. O resultado final das previsões de dureza dos algoritmos para as ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 provavelmente foi afetado negativamente em função disso, afinal, no ajuste (treinamento) dos modelos (algoritmos) havia pouca informação sobre dados de dureza inicial e depois inclusive, na validação dos modelos com as ligas ensaiadas, a única diferença nos dados de entrada considerados no cálculo da dureza final prevista pelos algoritmos de uma amostra para outra, numa mesma liga, foi justamente nos seus valores de dureza inicial.

E finalmente, em última análise, dentre os 11 elementos químicos C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al e Cu considerados pelos algoritmos de aprendizado de máquina para o cálculo da dureza final, os elementos de liga Cr, Mo e V, conforme mencionado por Bhadeshia (2006), têm a capacidade de formar carbonetos que são termodinamicamente mais estáveis do que a cementita, numa temperatura acima de 500°C, e caracterizam o processo de endurecimento secundário que confere um aumento significativo na resistência do aço. Os demais elementos de liga W e Ti, citados por Bhadeshia (2006), que também têm a capacidade de formar carbonetos que são termodinamicamente mais estáveis do que a cementita, no processo de endurecimento secundário do aço durante o revenimento, não foram considerados no presente estudo.

Das 1466 instâncias de dados (ensaios de revenimento) contidas no conjunto de dados para o treinamento dos modelos de aprendizado de máquina avaliados na presente pesquisa, 586 delas possuem dados experimentais de revenimento com uma temperatura de revenido superior à 500°C, temperatura acima da qual ocorre o processo de endurecimento secundário do aço durante o revenimento (BHADESHIA; HONEYCOMBE, 2006). Dentre essas 586 instâncias de dados, 240 delas possuem teores não residuais de Cr entre 0,49% à 1,57% em massa, 184 delas possuem teores não residuais de Mo entre 0,21% à 0,36% em massa e 25 delas possuem teores não residuais de V com 0,16% em massa.

Apesar dessas características da base de dados utilizada no presente estudo, contendo dados experimentais de revenimento próprios do processo de endurecimento secundário do aço (com uma temperatura de revenido superior à 500°C e com teores não residuais dos elementos químicos Cr, Mo e V), o que pode lhe tornar útil para avaliar modelos de aprendizado de máquina dentro desse contexto, todas as amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 ensaiadas no presente trabalho foram submetidas a uma temperatura de revenimento de apenas 300°C.

Portanto, o processo de endurecimento secundário que irrompe em temperaturas somente acima de 500°C, segundo Bhadeshia (2006), não ocorreu nessas amostras ensaiadas, além do quê apenas as amostras da liga SAE 4140 continham teores de liga mais elevados com a capacidade de formar carbonetos termodinamicamente mais estáveis do que a cementita, o que sugere novas investigações futuras com esse enfoque de validação dos algoritmos para a previsão de dureza de aços ligados com endurecimento secundário durante o revenido, especialmente diante da limitação do parâmetro de revenido Holloman-Jaffe para essas situações, conforme apontado por Reguly et al. (2014).

## 7.0 CONCLUSÕES

Uma base de dados foi montada contendo um total de 21.041 registros de dados experimentais de revenimento compilados da literatura metalúrgica, obtidos de aços ao carbono e de aços de baixo teor em liga, envolvendo tempo e temperatura de revenido, composição química dos aços (em % de massa dos elementos químicos C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo, V, Al e Cu) e suas durezas pós têmpera e pós revenido, totalizando um conjunto de dados com 1466 instâncias (ensaios de revenimento) e com uma variabilidade de 34 classes distintas de aços. Para a extração dos dados da literatura metalúrgica, uma metodologia foi empregada: a base de dados resultante inclui informações detalhadas sobre a composição química das ligas de aço ensaiadas e valores de dureza extraídos de tabelas, o que garantiu melhora na exatidão dos dados registrados em relação ao estado da arte de Kang (2014).

Foram avaliadas a aplicabilidade de 28 algoritmos de aprendizado de máquina em suas capacidades de predições de dureza em ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 após o tratamento térmico de revenimento. Para isso, foram empregadas 2 metodologias de ajuste dos modelos (algoritmos de aprendizado de máquina), no que resultou em 56 testes de validação para cada uma das 3 ligas ferrosas ensaiadas no presente trabalho. O desempenho dos algoritmos nos materiais ensaiados foi avaliado com base em métricas como coeficiente de correlação, erro médio absoluto e erro médio quadrático.

Finalmente, o algoritmo M5.Rules despontou como destaque dentre os 28 algoritmos investigados na plataforma WEKA para a previsão da propriedade mecânica de dureza das ligas ferrosas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 submetidas a um tratamento térmico de revenimento. Apesar disso, é importante ressaltar que a quantidade de dados do conjunto teste das amostras das ligas SAE 1045, SAE 4140 e DIN GGG50 foi pequena, o que impede tecnicamente a conclusão dos resultados, e portanto sugere que mais dados dessas ligas poderiam ser adquiridos para novos testes de validação dos modelos a fim de provar que os resultados encontrados na presente pesquisa não foram uma coincidência estatística.

## 8.0 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Investigar o desempenho de algoritmos de aprendizado de máquina para a previsão da propriedade mecânica de dureza em aços ligados com endurecimento secundário durante o revenido.
- Obter mais dados experimentais de ligas ferrosas submetidas ao tratamento térmico para validação dos modelos de aprendizado de máquina investigados na presente pesquisa.
- Aplicar técnicas alternativas de aprendizado de máquina para a previsão de dureza em ligas ferrosas considerando a característica da base de dados utilizada no presente trabalho com valores ausentes de dureza inicial em cerca de 65% das suas instâncias.
- Avaliar a influência dos elementos químicos Mg, Ti, B, Co, Nb, V e Sn sobre a dureza de ligas ferrosas submetidas ao tratamento térmico de revenimento.

## 9.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. E140 – 12b<sup>el</sup>: Standard Hardness Conversion Tables for Metals Relationship Among Brinell Hardness, Vickers Hardness, Rockwell Hardness, Superficial Hardness, Knoop Hardness, Scleroscope Hardness, and Leeb Hardness. West Conshohocken, 2013.

AMERICAN SOCIETY FOR METALS. ASM Handbook: Heat treating of Irons and Steels, 10 edição, v.4d. ASM International, 1991.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ABNT NBR 6916: Ferro Fundido Nodular ou Ferro Fundido com Grafita Esferoidal. 1981.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ABNT NBR 8650: Emprego de Ferro Fundido Nodular para Produtos Automotivos - Procedimentos. Rio de Janeiro, 2015.

BHADESHIA, H. K. D. H.; HONEYCOMBE, R. W. K. Steels: Microstructure and Properties, 3<sup>o</sup> edição. Butterworth-Heinemann, 2006.

Espectrometria de Emissão Óptica por Centelha (S-OES). Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais. Disponível em: <http://www.ccdm.ufscar.br/ensaios-quimicos/espectrometria-de-emissao-optica-por-centelha-s-oes/#:~:text=Informa%C3%A7%C3%B5es%20adicionais%3A%20A%20espectrometria%20de,fundi%C3%A7%C3%B5es%20em%20molde%20e%20manufatura>. Acesso em: 25 ago. 2023.

CHANDLER, H. Heat Treater's Guide: Practices and Procedures for Irons and Steels, 2<sup>o</sup> edição. ASM International, 1995.

CHIAVERINI, V.. Aços e Ferros Fundidos, 6<sup>o</sup> edição. Associação Brasileira, 1990.

DEUTSCHE NORMEN. DIN 1693: Cast Iron with Nodular Graphite: Unalloyed and Low alloy grades. Berlim, 1973.

DOSSETT, J. L.; BOYER H. E. Practical Heat Treating, 2<sup>o</sup> edição. ASM International, 2006.

Ferros Fundidos: Engenharia e Ciência dos Materiais I. USP. Disponível em: [https://www.edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/4683731/mod\\_resource/content/1/Aula%206%20focos.pdf](https://www.edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/4683731/mod_resource/content/1/Aula%206%20focos.pdf). Acesso em: 1 set. 2023.

- GRANGE, R. A.; BAUGHMAN, R. W. Hardness of Tempered Martensite in Carbon and Alloy Steels. Transactions of American Society for Metals, v.48, p.165-197, 1956.
- HASTIE, T. et al. An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R, 2º edição. Springer, 2021.
- HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction, 2º edição. Springer, 2017.
- HOLLOMON, J. F.; JAFFE, L. D. Time-Temperature Relations in Tempering Steel. Transactions of AIME, v.162, p.223-249, 1945.
- KANG, S.; LEE, S. J. Prediction of Tempered Martensite Hardness Incorporating the Composition-Dependent Tempering Parameter in Low Alloy Steels. Materials Transactions of the Japan Institute of Metals and Materials, v.55, n.7, p.1069-1072, 2014.
- O que é Inteligência Artificial? Como funciona uma IA, quais os tipos e exemplos. Alura. Disponível em: [www.alura.com.br/artigos/inteligencia-artificial-ia](http://www.alura.com.br/artigos/inteligencia-artificial-ia). Acesso em: 8 jul. 2023.
- REGULY, A. et al. Tratamentos Térmicos de Aços e Ferros Fundidos, 1º edição. Gráfica UFRGS, 2014.
- SILVA, A. L. C.; MEI, P. R. Aços e Ligas Especiais, 2º edição. Eletrometal S.A. Metais Especiais, 1988.
- PENHA, R. N. Modelagem do processo de revenimento por redes neurais. Tese. Escola de Engenharia de Materiais: Universidade de São Carlos, 2010.
- Tempering data for carbon and low alloy steels. Kaggle. Disponível em: [www.kaggle.com/datasets/rgerschtsauer/tempering-data-for-carbon-and-low-alloy-steels](http://www.kaggle.com/datasets/rgerschtsauer/tempering-data-for-carbon-and-low-alloy-steels). Acesso em: 7 set. 2023.
- TOTTEN, G. E. et al. A historical overview of steel tempering parameters. International Journal of Microstructure and Materials Properties, v.3, n.4, p. 474-525, 2008.
- TOTTEN, G. E. et al. Handbook of Quenchants and Quenching Technology, 2º edição. ASM International, 1993.
- WITTEN, I. H. et al. Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques, 4º edição. Morgan Kaufmann, 2017.

ANEXO A - 22 regras (*rules*) geradas pelo algoritmo M5.Rules para o cálculo da dureza final utilizando a abordagem 1 no seu treinamento

**Rule: 1**

IF

Temperatura do revenido (°C) > 416.35

Temperatura do revenido (°C) > 601

Tempo do revenido (s) > 2250

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.0159 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.1055 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 6.0841 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 0.5717 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 165.5384 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 6.6792 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 0.1356 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 6.4527 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 12.305 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 79.6083 [156/21.947\%]$

**Rule: 2**

IF

Temperatura do revenido (°C) > 416.35

Temperatura do revenido (°C) <= 518.9

Cr (%wt) <= 0.63

C (%wt) <= 0.465

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.0582 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0999 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 32.9783 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 2.7632 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 14.3969 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 0.7096 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 0.051 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 0.8614 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 16.7462 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 62.9702 [115/20.084\%]$

**Rule: 3**

IF  
 Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  454.45  
 C (%wt)  $\leq$  0.505  
 Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  280  
 C (%wt)  $>$  0.365  
 Tempo do revenido (s)  $>$  2250  
 THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.4975 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0453 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 28.0255 * \text{C (%wt)}$   
 $+ 0.5088 * \text{Mn (%wt)}$   
 $+ 3.0729 * \text{P (%wt)}$   
 $- 2.1052 * \text{S (%wt)}$   
 $+ 0.2472 * \text{Si (%wt)}$   
 $+ 1.4134 * \text{Cr (%wt)}$   
 $+ 0.3703 * \text{Mo (%wt)}$   
 $+ 19.9046 [97/7.942\%]$

**Rule: 4**

IF  
 Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  454.45  
 C (%wt)  $\leq$  0.505  
 Temperatura do revenido (°C)  $>$  255  
 Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  343.35  
 THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.2033 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0568 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 32.311 * \text{C (%wt)}$   
 $+ 1.1239 * \text{Mn (%wt)}$   
 $+ 4.4621 * \text{P (%wt)}$   
 $- 3.6671 * \text{S (%wt)}$   
 $+ 0.3053 * \text{Si (%wt)}$   
 $+ 2.6694 * \text{Cr (%wt)}$   
 $+ 0.7415 * \text{Mo (%wt)}$   
 $+ 39.064 [136/11.525\%]$

**Rule: 5**

IF  
 Temperatura do revenido (°C)  $>$  343.35  
 Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  518.9  
 Tempo do revenido (s)  $>$  750  
 THEN



Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.422 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0682 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $+ 10.4062 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 1.9652 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 91.0853 * \text{P (\%wt)}$   
 $- 1.1242 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 6.0289 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 0.0339 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 3.29 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 11.8977 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 16.4129 * \text{V (\%wt)}$   
 $+ 34.0114 [189/17.45\%]$

**Rule: 6**

IF

Temperatura do revenido ( $^\circ\text{C}$ )  $\leq 518.9$ C (%wt)  $> 0.505$ Temperatura do revenido ( $^\circ\text{C}$ )  $> 227.2$ Tempo do revenido (s)  $> 345$ 

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.209 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0404 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $+ 0.8681 * \text{C (\%wt)}$   
 $- 3.4782 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $- 123.4784 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 229.7724 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 0.1735 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 0.7806 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 0.4393 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 2.2997 * \text{Cu (\%wt)}$   
 $+ 52.8762 [85/18.558\%]$

**Rule: 7**

IF

Temperatura do revenido ( $^\circ\text{C}$ )  $> 518.9$ Cr (%wt)  $\leq 0.63$ Cr (%wt)  $\leq 0.025$ C (%wt)  $\leq 0.465$ 

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $-0.1473 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0651 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$

+ 29.476 \* C (%wt)  
 + 10.8052 \* Mn (%wt)  
 + 32.4946 \* P (%wt)  
 - 37.7011 \* S (%wt)  
 + 0.3804 \* Si (%wt)  
 + 0.0644 \* Ni (%wt)  
 + 2.3959 \* Cr (%wt)  
 + 4.1211 \* Mo (%wt)  
 + 1.7134 \* Cu (%wt)  
 + 53.4993 [58/16.605%]

**Rule: 8**

IF

Temperatura do revenido (°C) > 518.9

Cr (%wt) <= 0.63

Tempo do revenido (s) > 450

P (%wt) > 0.014

C (%wt) <= 0.565

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.0393 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0.0001 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0591 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 21.0303 \* C (%wt)  
 - 2.3906 \* Mn (%wt)  
 + 10.708 \* P (%wt)  
 - 249.589 \* S (%wt)  
 + 0.3993 \* Si (%wt)  
 - 1.0118 \* Ni (%wt)  
 + 1.0321 \* Cr (%wt)  
 + 3.4498 \* Mo (%wt)  
 + 1.1353 \* Cu (%wt)  
 + 64.1706 [66/11.33%]

**Rule: 9**

IF

Temperatura do revenido (°C) <= 518.9

C (%wt) > 0.505

Temperatura do revenido (°C) > 275

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.783 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0.0434 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0519 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 1.6123 \* C (%wt)  
 + 0.0744 \* Mn (%wt)  
 + 24.1567 \* P (%wt)  
 - 13.5266 \* S (%wt)

$+ 0.1101 * \text{Si (\%wt)}$   
 $- 0.0209 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 3.227 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 0.3475 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 2.473 * \text{Cu (\%wt)}$   
 $+ 24.8169 [48/16.513\%]$

**Rule: 10**

IF

Temperatura do revenido (°C)  $\leq 454.45$

C (%wt)  $\leq 0.505$

S (%wt)  $> 0.019$

Temperatura do revenido (°C)  $\leq 227.2$

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.2134 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0158 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 32.2159 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 0.185 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 8.6693 * \text{P (\%wt)}$   
 $- 39.4641 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 0.1386 * \text{Si (\%wt)}$   
 $- 0.0245 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 0.1706 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 0.5123 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 31.7152 [51/8.193\%]$

**Rule: 11**

IF

Temperatura do revenido (°C)  $> 310.55$

Tempo do revenido (s)  $\leq 750$

Temperatura do revenido (°C)  $> 518.9$

Cr (%wt)  $\leq 0.63$

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.0243 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0097 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0635 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 3.9295 * \text{C (\%wt)}$   
 $- 2.3322 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $- 151.9229 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 373.3574 * \text{S (\%wt)}$   
 $- 9.0952 * \text{Si (\%wt)}$   
 $- 1.1111 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $- 7.9721 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 13.0112 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 69.5058 [65/12.131\%]$

**Rule: 12**

IF

Temperatura do revenido (°C) &gt; 310.55

Tempo do revenido (s) &lt;= 750

Temperatura do revenido (°C) &lt;= 624.45

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.1396 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0076 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0518 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 19.9361 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 11.6267 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 21.197 * \text{P (\%wt)}$   
 $- 225.771 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 0.8444 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 1.2848 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 49.6343 [73/12.344\%]$

**Rule: 13**

IF

Temperatura do revenido (°C) &gt; 393.9

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.0569 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0368 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 6.7932 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 13.0803 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $- 7.5526 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 105.4567 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 7.6315 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 32.647 [147/24.944\%]$

**Rule: 14**

IF

Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera &lt;= 63.9

C (%wt) &lt;= 0.46

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.5278 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.017 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 0.9873 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 8.6057 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 18.5104 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 21.5423 [31/23.94\%]$

**Rule: 15**

IF  
 Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  $\leq 63.9$   
 Tempo do revenido (s)  $> 2250$   
 Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  $> 61.547$   
 THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.0867 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0348 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $- 0.4023 * \text{C (\%wt)}$   
 $- 4.6314 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 53.5471 * \text{P (\%wt)}$   
 $+ 62.5615 [24/26.023\%]$

**Rule: 16**

IF  
 Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  $\leq 63.9$   
 Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  $\leq 62.3$   
 THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.6441 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0069 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $+ 0.4092 * \text{C (\%wt)}$   
 $- 7.8135 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 11.1519 * \text{P (\%wt)}$   
 $- 0.2087 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 28.0581 [24/24.508\%]$

**Rule: 17**

IF  
 Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  $> 63.9$   
 Temperatura do revenido ( $^\circ\text{C}$ )  $\leq 125$   
 THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.7671 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0124 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $+ 0.2877 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 17.0219 [20/27.495\%]$

**Rule: 18**

IF  
 Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  $> 63.9$   
 Tempo do revenido (s)  $\leq 4950$

Tempo do revenido (s) > 50  
THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.4887 * \text{Dureza inicial (HRC)} - \text{pós t\^empera}$   
 $- 0.0009 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0289 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $- 0.1631 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 38.6715 [20/33.19\%]$

**Rule: 19**

IF  
Tempo do revenido (s) <= 50  
THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $1.107 * \text{Dureza inicial (HRC)} - \text{pós t\^empera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.004 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $+ 0.6339 * \text{C (\%wt)}$   
 $- 6.8749 [24/25.554\%]$

**Rule: 20**

IF  
Temperatura do revenido (°C) <= 175  
THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.3802 * \text{Dureza inicial (HRC)} - \text{pós t\^empera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0123 * \text{Temperatura do revenido (}^\circ\text{C)}$   
 $+ 1.0288 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 4.785 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 38.8582 [20/31.874\%]$

**Rule: 21**

IF  
Mn (%wt) > 0.47  
THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $-0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $+ 2.3687 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 58.472 [12/75.926\%]$

**Rule: 22**

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $+ 62.02 [5/100\%]$

ANEXO B - 14 regras (*rules*) geradas pelo algoritmo M5.Rules para o cálculo da dureza final utilizando a abordagem 2 no seu treinamento

**Rule: 1**

IF

Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  416.35

C (%wt)  $>$  0.505

Temperatura do revenido (°C)  $>$  227.2

Tempo do revenido (s)  $>$  750

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.5334 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.061 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 6.301 * \text{C (%wt)}$   
 $- 0.8401 * \text{Mn (%wt)}$   
 $+ 20.8168 * \text{P (%wt)}$   
 $+ 84.4396 * \text{S (%wt)}$   
 $+ 4.7017 * \text{Si (%wt)}$   
 $- 0.0251 * \text{Ni (%wt)}$   
 $- 0.7534 * \text{Cr (%wt)}$   
 $+ 0.1834 * \text{Mo (%wt)}$   
 $+ 2.0249 * \text{Cu (%wt)}$   
 $+ 0.929 * \text{Teor total dos elementos qu\^imicos exceto carbono e ferro (%wt)}$   
 $+ 30.3815 [109/14.38\%]$

**Rule: 2**

IF

Temperatura do revenido (°C)  $\leq$  416.35

C (%wt)  $>$  0.505

Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera  $\leq$  63.9

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.8287 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós t\^empera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0229 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 3.6344 * \text{C (%wt)}$   
 $+ 0.0522 * \text{Mn (%wt)}$   
 $+ 11.3831 * \text{P (%wt)}$   
 $- 6.7995 * \text{S (%wt)}$   
 $+ 0.1086 * \text{Si (%wt)}$

- 0.0697 \* Ni (%wt)  
 + 0.1095 \* Cr (%wt)  
 + 0.1954 \* Mo (%wt)  
 + 0.5692 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 9.6302 [104/13.904%]

**Rule: 3**

IF

Temperatura do revenido (°C) &lt;= 454.45

Temperatura do revenido (°C) &gt; 307.8

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.1479 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0628 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 25.0186 \* C (%wt)  
 + 4.4201 \* Mn (%wt)  
 + 41.7577 \* P (%wt)  
 - 58.7758 \* S (%wt)  
 + 5.4761 \* Si (%wt)  
 + 2.5233 \* Ni (%wt)  
 + 7.4332 \* Cr (%wt)  
 + 7.2118 \* Mo (%wt)  
 - 2.4131 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 46.113 [307/16.984%]

**Rule: 4**

IF

Temperatura do revenido (°C) &lt;= 391.1

Dureza inicial (HRC) - pós têmpera &lt;= 62.997

C (%wt) &gt; 0.33

Tempo do revenido (s) &gt; 2250

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.4963 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0457 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 27.2935 \* C (%wt)  
 + 0.1387 \* Mn (%wt)  
 + 2.0294 \* S (%wt)  
 + 0.2164 \* Si (%wt)  
 + 0.0491 \* Ni (%wt)  
 + 1.5257 \* Cr (%wt)  
 + 0.3841 \* Mo (%wt)  
 - 0.0213 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 20.6535 [129/6.073%]

**Rule: 5**



IF

Temperatura do revenido (°C) > 391.1

Temperatura do revenido (°C) > 601

Tempo do revenido (s) > 2250

Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt) > 1.135

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =

0.019 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera

- 0.0001 \* Tempo do revenido (s)

- 0.1309 \* Temperatura do revenido (°C)

+ 2.7386 \* C (%wt)

- 1.2335 \* Mn (%wt)

+ 155.2047 \* P (%wt)

- 2.9755 \* S (%wt)

+ 6.5372 \* Si (%wt)

- 0.1845 \* Ni (%wt)

+ 5.7477 \* Cr (%wt)

+ 8.8131 \* Mo (%wt)

- 0.4042 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)

+ 102.104 [103/14.702%]

**Rule: 6**

IF

Temperatura do revenido (°C) > 391.1

Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt) > 1.135

C (%wt) > 0.385

Tempo do revenido (s) > 210

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =

0.9463 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera

- 0.0001 \* Tempo do revenido (s)

- 0.0595 \* Temperatura do revenido (°C)

+ 2.6029 \* C (%wt)

- 7.5535 \* Mn (%wt)

+ 16.9122 \* P (%wt)

- 12.6468 \* S (%wt)

+ 3.0072 \* Si (%wt)

+ 0.547 \* Ni (%wt)

- 1.0736 \* Cr (%wt)

+ 2.3209 \* Mo (%wt)

+ 1.3464 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)

+ 13.9198 [150/20.231%]

**Rule: 7**

IF

Temperatura do revenido (°C) > 391.1

Tempo do revenido (s) > 450

Temperatura do revenido (°C) <= 601

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.1493 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0.0001 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.08 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 15.429 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 2.6651 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 178.2357 * \text{P (\%wt)}$   
 $- 174.7091 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 4.9038 * \text{Si (\%wt)}$   
 $+ 0.3108 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 6.4881 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 21.6353 * \text{Mo (\%wt)}$   
 $+ 0.3155 * \text{Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (\%wt)}$   
 $+ 54.2357 [188/14.428\%]$

**Rule: 8**

IF

Temperatura do revenido (°C) > 518.9

Tempo do revenido (s) <= 450

Cr (%wt) <= 0.64

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.4986 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0.0132 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0664 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 7.1482 * \text{C (\%wt)}$   
 $+ 0.4812 * \text{Mn (\%wt)}$   
 $+ 8.5039 * \text{P (\%wt)}$   
 $- 43.1163 * \text{S (\%wt)}$   
 $+ 0.5575 * \text{Si (\%wt)}$   
 $- 0.6735 * \text{Ni (\%wt)}$   
 $+ 2.2656 * \text{Cr (\%wt)}$   
 $+ 0.9719 * \text{Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (\%wt)}$   
 $+ 39.5798 [60/11.572\%]$

**Rule: 9**

IF

Temperatura do revenido (°C) <= 601

Dureza inicial (HRC) - pós têmpera <= 63.9

S (%wt) > 0.021

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 $0.2199 * \text{Dureza inicial (HRC) - pós têmpera}$   
 $- 0 * \text{Tempo do revenido (s)}$   
 $- 0.0398 * \text{Temperatura do revenido (°C)}$   
 $+ 31.432 * \text{C (\%wt)}$

+ 5.7443 \* Mn (%wt)  
 - 10.4734 \* P (%wt)  
 - 45.2481 \* S (%wt)  
 + 0.5405 \* Si (%wt)  
 + 1.2186 \* Ni (%wt)  
 + 1.2145 \* Cr (%wt)  
 - 0.4421 \* Mo (%wt)  
 - 0.3478 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 33.056 [80/8.172%]

**Rule: 10**

IF

Temperatura do revenido (°C) <= 601

Temperatura do revenido (°C) <= 400

Dureza inicial (HRC) - pós têmpera > 62.997

Temperatura do revenido (°C) > 125

Tempo do revenido (s) > 50

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.4454 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0.0001 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0363 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 3.0485 \* C (%wt)  
 + 1.575 \* Mn (%wt)  
 + 35.6858 \* P (%wt)  
 + 1.8813 \* Si (%wt)  
 + 1.0373 \* Cr (%wt)  
 - 1.5785 \* Mo (%wt)  
 + 0.2085 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 37.3397 [40/6.213%]

**Rule: 11**

IF

Temperatura do revenido (°C) <= 601

Temperatura do revenido (°C) <= 400

Dureza inicial (HRC) - pós têmpera > 62.997

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.8829 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0178 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 2.3006 \* C (%wt)  
 + 1.0956 \* Mn (%wt)  
 + 1.4047 \* Cr (%wt)  
 - 1.9709 \* Mo (%wt)  
 + 0.2519 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 7.4077 [36/4.287%]

**Rule: 12**

IF

Temperatura do revenido (°C) &lt;= 601

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.3221 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0.002 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0334 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 11.9466 \* C (%wt)  
 + 9.9885 \* Mn (%wt)  
 - 45.1909 \* S (%wt)  
 + 19.5819 \* Si (%wt)  
 + 5.8632 \* Cr (%wt)  
 + 22.7208 [61/12.443%]

**Rule: 13**

IF

Cr (%wt) &lt;= 0.28

Tempo do revenido (s) &lt;= 11700

Cr (%wt) &lt;= 0.025

C (%wt) &gt; 0.335

THEN

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 0.2091 \* Dureza inicial (HRC) - pós têmpera  
 - 0.0006 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0736 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 12.5967 \* C (%wt)  
 + 4.6034 \* Mn (%wt)  
 - 18.3233 \* S (%wt)  
 + 5.1747 \* Si (%wt)  
 + 40.5796 \* Cr (%wt)  
 + 5.5433 \* Mo (%wt)  
 + 0.543 \* Teor total dos elementos químicos exceto carbono e ferro (%wt)  
 + 45.0964 [23/9.383%]

**Rule: 14**

Dureza final (HRC) - pós revenido =  
 -0.0001 \* Tempo do revenido (s)  
 - 0.0572 \* Temperatura do revenido (°C)  
 + 5.2772 \* C (%wt)  
 + 9.9252 \* Mn (%wt)  
 - 155.933 \* S (%wt)  
 + 25.1503 \* Si (%wt)  
 + 17.1104 \* Cr (%wt)  
 + 15.2601 \* Mo (%wt)  
 + 44.8005 [76/29.301%]