

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

**Aplicações de Técnicas de *Machine Learning* na
Metalurgia de Aços: Avanços e Perspectivas**

Hans Steinern Krystian von Lang

SÃO CARLOS - SP
2025

Aplicações de Técnicas de *Machine Learning* na Metalurgia de Aços: Avanços e Perspectivas

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos, como requisito para obtenção do título de bacharel em Engenharia de Materiais.

Orientador: Lucas Barcelos Otani

São Carlos - SP
2025



ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO (TCC)

NOME: Hans Steinern Krystian Von Lang

RA: 802387

TÍTULO: Aplicações de técnicas de machine learning na metalurgia de aços: avanços e perspectivas

ORIENTADOR(A): Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani

DATA/HORÁRIO: 11/07/2025, 13h30

BANCA – NOTAS:

	Monografia	Defesa
Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani	7	8
Prof. Dr. Guilherme Zepon	7	8
Média	7	8

BANCA – ASSINATURAS:

Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani

Prof. Dr. Guilherme Zepon

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho, com todo o meu carinho e gratidão, à minha família e namorada, pelo apoio, pelo amor e por acreditarem em mim mesmo nos momentos mais difíceis; e aos meus amigos, que estiveram ao meu lado durante toda essa caminhada.

Este trabalho é fruto não apenas do meu esforço, mas também do suporte e do afeto que recebi de cada um de vocês. Muito obrigado.

AGRADECIMENTO

A realização deste trabalho só foi possível graças ao apoio e à orientação de pessoas que fizeram parte fundamental desta trajetória. Agradeço, em especial, ao meu orientador Lucas Barcelos Otani, por sua dedicação, paciência e amizade.

Estendo meus sinceros agradecimentos a todos os professores e funcionários do Departamento de Engenharia de Materiais, que, ao longo da graduação, compartilharam não apenas conhecimento técnico, mas também valores éticos, compromisso com a ciência e inspiração para seguir em frente como engenheiro e pesquisador.

RESUMO

O aço é um dos materiais mais utilizados globalmente, com aplicações essenciais nos setores automotivo, aeroespacial e da construção civil, devido à sua versatilidade, resistência e capacidade de adaptação a diferentes condições de uso. Contudo, a complexidade dos processos metalúrgicos e a necessidade de desempenho cada vez mais específico têm impulsionado a busca por ferramentas que auxiliem, principalmente, na otimização de suas propriedades mecânicas e microestruturais. Diante desse cenário, técnicas de *machine learning* (ML) vêm se destacando como uma abordagem inovadora para enfrentar tais desafios, permitindo a predição e otimização de propriedades a partir de grandes volumes de dados experimentais e computacionais. O uso de algoritmos como redes neurais artificiais, máquinas de vetores de suporte, aprendizado por reforço e algoritmos genéticos tem possibilitado a identificação de composições químicas ideais e o controle refinado de parâmetros de processamento, visando maximizar resistência e ductilidade, bem como reduzir fragilidade. Este trabalho tem como objetivo analisar criticamente as principais aplicações de técnicas de ML na metalurgia dos aços, com foco na predição de propriedades mecânicas, no desenvolvimento de novas ligas e no aprimoramento de microestruturas e processos metalúrgicos. Para isso, realizou-se uma revisão bibliográfica detalhada, mapeando as técnicas empregadas na literatura recente e correlacionando cada abordagem com suas respectivas aplicações e resultados. A partir do estudo bibliográfico, percebe-se que o ML já tem sido amplamente utilizado com sucesso para previsão de desempenho, otimização de composições e definição de parâmetros operacionais, promovendo maior eficiência, economia de recursos e inovação tecnológica no setor metalúrgico. Conclui-se que o uso integrado dessas técnicas representa um caminho promissor para o avanço da engenharia de materiais, contribuindo de forma significativa para a digitalização e modernização da indústria do aço.

Palavras-chave: Aço. Metalurgia. *Machine learning*. Otimização de ligas.

ABSTRACT

Steel is one of the most widely used materials globally, with essential applications in the automotive, aerospace, and construction sectors due to its versatility, strength, and ability to adapt to different usage conditions. However, the complexity of metallurgical processes and the growing demand for increasingly specific performance have driven the search for tools that assist, especially, in the optimization of its mechanical and microstructural properties. In this context, machine learning (ML) techniques have emerged as an innovative approach to tackle such challenges, enabling the prediction and optimization of properties based on large volumes of experimental and computational data. The use of algorithms such as artificial neural networks, support vector machines, reinforcement learning, and genetic algorithms has made it possible to identify ideal chemical compositions and finely control processing parameters, aiming to maximize strength and ductility while reducing brittleness. This work aims to critically analyze the main applications of ML techniques in steel metallurgy, focusing on the prediction of mechanical properties, the development of new alloys, and the improvement of microstructures and metallurgical processes. To this end, a detailed literature review was conducted, mapping the techniques employed in recent studies and correlating each approach with its respective applications and outcomes. Based on the literature, it is evident that ML has already been widely and successfully used for performance prediction, composition optimization, and definition of operational parameters, promoting greater efficiency, resource savings, and technological innovation in the metallurgical sector. It is concluded that the integrated use of these techniques represents a promising path for the advancement of materials engineering, contributing significantly to the digitalization and modernization of the steel industry.

Keywords: Steel. Metallurgy. Machine learning. Alloy optimization.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1. Diagrama esquemático das Redes Neurais Artificiais (ANNs). Adaptado de [17]. . 6	6
Figura 2. Exemplo de separação de dados (vermelho - quadrado e verde - redondo) pelas Máquinas de Vetores de Suporte (SVMs). Adaptado de [14]. 7	7
Figura 3. Diagrama esquemático dos modelos de Florestas Aleatórias (Random Forests). Adaptado de [15]...... 8	8
Figura 4. Exemplo do agrupamento de dados (clustering). Adaptado de [19]...... 9	9
Figura 5. Exemplo da análise de componentes principais (PCA). Adaptado de [22]...... 10	10
Figura 6. Diagrama esquemático do modelo de aprendizado por reforço. Adaptado de [8].10	10
Figura 7. Diagrama esquemático do modelo de algoritmos genéticos. Adaptado de [9]. 12	12
Figura 8. Diagrama esquemático do modelo de aprendizado profundo (deep learning). Adaptado de [17]...... 13	13
Figura 9. Exemplo da utilização e funcionamento das Redes Neurais Convolucionais (CNNs). Adaptado de [16]...... 14	14
Figura 10. Diagrama esquemático do modelo de Redes Neurais Recorrentes (RNNs). Adaptado de [23]...... 15	15

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Principais correlações entre as técnicas de ML utilizadas e suas aplicações. 32

LISTA DE SIGLAS

ML -	<i>Machine Learning</i>
AG -	Algoritmo Genético
ANN -	<i>Artificial Neural Network</i> (Rede Neural Artificial)
SVM -	<i>Support Vector Machine</i> (Máquina de Vetores de Suporte)
RF -	<i>Random Forest</i> (Floresta Aleatória)
GB -	<i>Gradient Boosting</i>
CNN -	<i>Convolutional Neural Network</i> (Rede Neural Convolucional)
RNN -	<i>Recurrent Neural Network</i> (Rede Neural Recorrente)
PCA -	<i>Principal Component Analysis</i> (Análise de Componentes Principais)
R ² -	Coefficiente de Determinação
MSE -	<i>Mean Squared Error</i> (Erro Quadrático Médio)
MAE -	<i>Mean Absolute Error</i> (Erro Absoluto Médio)
RMSE -	<i>Root Mean Squared Error</i> (Raiz do Erro Quadrático Médio)
LSTM -	<i>Long Short-Term Memory</i>
GRU -	<i>Gated Recurrent Unit</i>
KNN -	<i>K-Nearest Neighbors</i>
XAI -	<i>Explainable Artificial Intelligence</i> (Inteligência Artificial Explicável)
SHAP -	<i>Shapley Additive Explanations</i>
LIME -	<i>Local Interpretable Model-agnostic Explanations</i>
CALPHAD -	<i>CALculation of PHAse Diagrams</i>

SUMÁRIO

1. Introdução	1
2. Revisão bibliográfica: <i>Machine Learning</i>	3
2.1 Aços: correlação entre microestrutura e propriedades.....	3
2.2 <i>Machine learning</i> e técnicas aplicadas à metalurgia de aços	4
2.3 Aprendizado supervisionado.....	5
2.4 Aprendizado não supervisionado	8
2.5 Aprendizado por reforço.....	10
2.6 Algoritmos genéticos	11
2.7 Aprendizado profundo (<i>Deep learning</i>).....	12
3. Materiais e métodos	17
4. Resultados	19
4.1 Predição de propriedades mecânicas.....	19
4.2 Otimização da composição química	21
4.3 Aplicações em inspeção e análise de microestrutura	23
4.4 Desafios e tendências identificadas na literatura	24
5. Discussão dos resultados.....	28
6. Conclusões/ Considerações finais	34
7. Referências	35

1. Introdução

A metalurgia dos aços tem desempenhado um papel essencial no desenvolvimento industrial e tecnológico, sendo fundamental para a construção civil, indústria automobilística, aeroespacial, entre outros setores, visto que a produção mundial de aço é um indicador fundamental do desenvolvimento industrial e econômico global. Em 2023, a produção mundial de aço bruto atingiu aproximadamente 1.888,2 milhões de toneladas, mantendo-se estável em relação ao ano anterior [1]. A China liderou como maior produtora, com 1.019,1 milhões de toneladas, representando cerca de 54% da produção global. A Índia se consolidou como o segundo maior produtor, com 140,2 milhões de toneladas, registrando um crescimento de 11,8% em comparação a 2022. Já o Brasil ocupou a nona posição, com uma produção de 31,9 milhões de toneladas. Esses números refletem não apenas a capacidade industrial dos países, mas também sua competitividade e inserção nas cadeias globais de valor [1].

A busca por aprimoramento na produção e caracterização dos aços tem levado à adoção de tecnologias inovadoras, dentre as quais se destacam as técnicas de *machine learning* (ML), que têm revolucionado a forma como materiais são projetados, processados e avaliados [2].

Machine learning, um subcampo da inteligência artificial, permite a análise de grandes volumes de dados e a identificação de padrões complexos. Sua aplicação tem se expandido rapidamente na ciência dos materiais, particularmente na metalurgia de aços, por sua capacidade de correlacionar variações nas composições, parâmetros de processamento e propriedades finais. A identificação de relações não lineares entre composição química, microestrutura e propriedades mecânicas é uma das grandes vantagens do uso de ML, uma vez que esses parâmetros estão frequentemente inter-relacionados de maneira complexa e difícil de ser modelada por métodos convencionais [3,4].

Nos últimos anos, diversas abordagens de ML, como aprendizado supervisionado, não supervisionado, por reforço, aprendizado profundo e algoritmos genéticos, têm sido empregadas na previsão de propriedades mecânicas, controle de qualidade, detecção de falhas e otimização de processos térmicos e composicionais em diversos tipos de aços [5,6,7,8,9]. Com isso, torna-se possível acelerar significativamente o desenvolvimento de novos materiais e reduzir a quantidade de experimentação física necessária, reduzindo custos e tempo de

pesquisa e desenvolvimento [10].

Diante desse cenário, este trabalho tem como objetivo analisar e discutir as principais aplicações de técnicas de *machine learning* na metalurgia dos aços, com foco na predição de propriedades mecânicas, otimização de composição química e melhorias microestruturais. A relevância deste estudo está na crescente necessidade de inovação e digitalização da indústria metalúrgica, com foco em melhorar a eficiência produtiva, reduzir desperdícios e desenvolver materiais com propriedades superiores. Ao compreender e aplicar técnicas de ML na metalurgia dos aços, este trabalho visa contribuir tanto para o avanço do conhecimento científico quanto para o aprimoramento das práticas industriais e acadêmicas na área de engenharia de materiais.

2. Revisão bibliográfica: *Machine Learning*

A utilização de técnicas de *machine learning* na metalurgia de aços tem se destacado como uma ferramenta poderosa para a previsão de propriedades mecânicas, otimização de processos e desenvolvimento de novas ligas. Diversas abordagens de ML são empregadas de acordo com o tipo e a complexidade do problema, e vêm sendo incorporadas progressivamente tanto na pesquisa acadêmica quanto na prática industrial [2,6,10]. No presente texto, será feita inicialmente uma revisão bibliográfica sobre os principais tipos de técnicas envolvendo ML de uma forma geral. Posteriormente, como resultado deste trabalho, um aprofundamento e correlação destas técnicas com as mais diversas possibilidades existentes para a aplicação na metalurgia de aços será realizada em conjunto com discussões realizadas pelo autor.

2.1 Aços: correlação entre microestrutura e propriedades

Os aços constituem uma classe de ligas metálicas amplamente utilizadas devido à sua versatilidade, custo relativamente baixo e possibilidade de ajuste de propriedades mecânicas por meio de tratamentos térmicos, composição química e processos de fabricação. A microestrutura dos aços é um dos principais fatores determinantes de seu desempenho, influenciando diretamente características como dureza, resistência mecânica, ductilidade, tenacidade e resistência ao desgaste [3,5].

As microestruturas típicas presentes nos aços incluem fases como ferrita e a austenita (ambas de estrutura cúbica), além da cementita (Fe_3C), uma fase metaestável dura e frágil rica em carbono. A partir da combinação dessas fases, e mediante variações nos ciclos térmicos e mecânicos, surgem microestruturas complexas como a perlita, a bainita e a martensita. A ferrita é uma fase dúctil e tenaz, com baixa dureza, predominante em aços de baixo carbono. A perlita, por sua vez, é um arranjo lamelar de ferrita e cementita que confere maior resistência e dureza em comparação à ferrita pura. Já a martensita é formada por têmpera e caracteriza-se por elevada dureza e resistência, mas menor ductilidade, sendo ideal para aplicações que exigem alta resistência ao desgaste [11].

A bainita surge como uma microestrutura intermediária entre perlita e martensita, combinando resistência e certa ductilidade, o que a torna desejável em

diversas aplicações estruturais. A austenita, embora estável apenas a altas temperaturas na maioria dos aços, pode ser retida à temperatura ambiente em ligas inoxidáveis e aços de alta liga, contribuindo para a tenacidade e resistência à corrosão.

A manipulação da fração volumétrica dessas fases, bem como o tamanho de grão, presença de precipitados e textura cristalográfica, são aspectos fundamentais para o desenvolvimento de aços com desempenho específico [6,11]. Esses fatores são controlados por meio de parâmetros como taxa de resfriamento, temperatura de austenitização, tempo de revenido, deformação a quente, entre outros.

As propriedades dos aços são resultado de uma complexa interação entre diversos fatores, como composição química, condições de processamento, temperatura de transformação e histórico termomecânico. Essa sensibilidade a múltiplas variáveis torna os aços extremamente versáteis e ajustáveis para diferentes aplicações, mas também impõe um alto grau de complexidade na compreensão e previsão de seu comportamento. Pequenas variações em parâmetros térmicos ou mecânicos podem gerar microestruturas distintas, com respostas mecânicas bastante diferentes. Esse cenário desafia os métodos tradicionais de modelagem e reforça a necessidade de abordagens mais avançadas, capazes de lidar com sistemas multidimensionais e não lineares, como as técnicas de machine learning, que vêm ganhando espaço justamente por sua capacidade de interpretar essas interrelações de forma mais precisa e eficiente.

2.2 *Machine learning* e técnicas aplicadas à metalurgia de aços

Machine learning é um subcampo da inteligência artificial que se concentra no desenvolvimento de algoritmos capazes de aprender e fazer previsões ou tomar decisões com base em dados. Diferente da programação tradicional, onde cada decisão ou ação precisa ser explicitamente definida por regras predefinidas, o aprendizado de máquina permite que os sistemas melhorem seu desempenho com o tempo ao serem expostos a novos dados [2]. Essa abordagem revolucionou diversas áreas do conhecimento, incluindo a metalurgia, ao permitir a modelagem de problemas complexos que envolvem um grande número de variáveis interdependentes [3,10].

O princípio fundamental do ML reside na capacidade de extrair padrões de grandes volumes de dados e utilizar esses padrões para prever ou otimizar

determinados fenômenos. Para que isso seja possível, os algoritmos são treinados em conjuntos de dados históricos que contêm exemplos de entrada e saída, permitindo que o modelo aprenda as relações entre essas variáveis. Essa aprendizagem pode ocorrer de diversas maneiras, dependendo da estrutura do problema e da disponibilidade de informações pré-classificadas. Em linhas gerais, as abordagens de aprendizado de máquina podem ser classificadas em três categorias principais: aprendizado supervisionado, aprendizado não supervisionado e aprendizado por reforço [2,8].

2.3 Aprendizado supervisionado

O aprendizado supervisionado é uma abordagem amplamente utilizada na metalurgia de aços, pois se baseia no uso de dados rotulados para treinar modelos capazes de prever propriedades dos materiais com alta precisão [4,5,6]. Esse tipo de aprendizado é particularmente útil quando há uma grande quantidade de informações previamente conhecidas sobre a composição química, os tratamentos térmicos e os processos mecânicos aplicados aos aços. A partir desses dados, os algoritmos de aprendizado supervisionado conseguem estabelecer relações entre as variáveis de entrada e as características finais do material, permitindo prever atributos como dureza, resistência mecânica, tenacidade e comportamento diante corrosão [12,13].

Entre os algoritmos mais comuns, destacam-se as Redes Neurais Artificiais (ANNs), as Máquinas de Vetores de Suporte (SVMs) e os modelos de Florestas Aleatórias (*Random Forests*) [14,15,16].

As ANNs são compostas por unidades computacionais chamadas neurônios, organizadas em camadas interconectadas. Cada neurônio recebe entradas, aplica pesos, realiza uma soma ponderada e passa o resultado por uma função de ativação (como ReLU, sigmoid ou tanh). O processo de treinamento envolve o ajuste iterativo dos pesos com base no erro entre a saída prevista e a real, por meio de algoritmos como o *backpropagation* [16]. A Figura 1 ilustra um diagrama esquemático das Redes Neurais Artificiais.

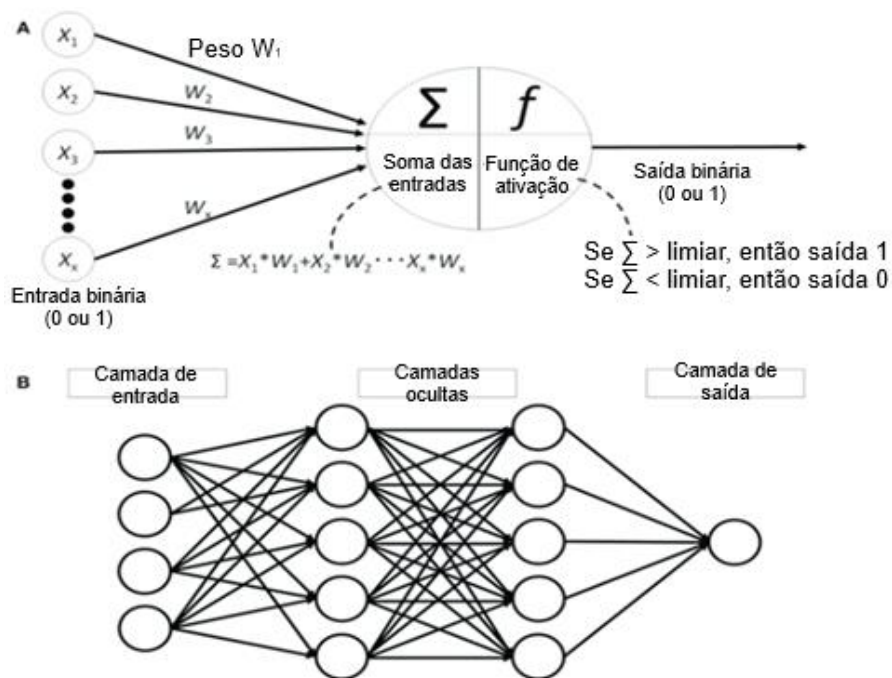


Figura 1. Diagrama esquemático das Redes Neurais Artificiais (ANNs). Adaptado de [17].

ANNs são especialmente eficazes para modelar sistemas não lineares, sendo amplamente aplicadas na previsão de dureza, limite de escoamento e outras propriedades complexas de ligas metálicas [2,6,17]. Quando adequadamente regularizadas, essas redes podem generalizar, mesmo diante de dados com ruído ou incompletos [16,17].

As SVMs, por sua vez, são algoritmos que visam encontrar o hiperplano ótimo que separa os dados ou que melhor se ajusta a uma função de regressão. Quando os dados não são linearmente separáveis, as SVMs utilizam funções de *kernel*, como o *radial basis function* (RBF) ou o polinomial, para projetá-los em um espaço de maior dimensionalidade. Isso permite a separação de dados complexos com elevada precisão [3,14]. A Figura 2 demonstra como ocorre a separação de dados pelas SVMs.

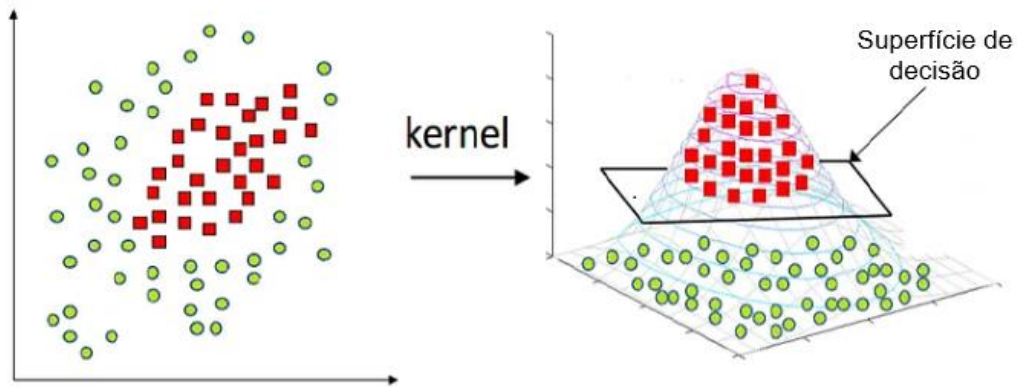


Figura 2. Exemplo de separação de dados (vermelho - quadrado e verde - redondo) pelas Máquinas de Vetores de Suporte (SVMs). Adaptado de [14].

Na metalurgia, SVMs têm sido usadas com sucesso para classificar fases microestruturais ou prever propriedades específicas, como o alongamento ou o comportamento em fadiga, mesmo com conjuntos de dados relativamente pequenos [4,6]. Isso se deve à capacidade das SVMs de encontrar hiperplanos de separação ótimos em espaços de alta dimensão, o que as torna eficientes mesmo quando o número de amostras é limitado, desde que os dados sejam bem representativos e as variáveis preditoras estejam adequadamente selecionadas.

Já as florestas aleatórias (RF) são compostas por múltiplas árvores de decisão construídas a partir de subconjuntos aleatórios dos dados. Cada árvore toma decisões com base em divisões sucessivas nas variáveis de entrada, e a predição final é feita por agregação dos resultados (votação ou média) [11,15]. A Figura 3 apresenta um digrama dos modelos de RF.

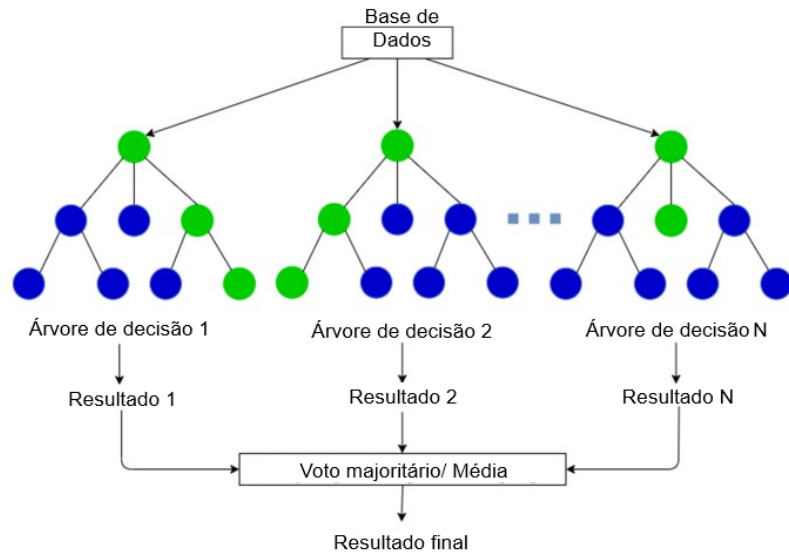


Figura 3. Diagrama esquemático dos modelos de Florestas Aleatórias (*Random Forests*). Adaptado de [15].

As RFs são particularmente valorizadas por sua robustez, capacidade de lidar com dados de alta dimensionalidade e por fornecerem estimativas da importância de cada variável, permitindo maior possibilidade de interpretação dos modelos [6,15]. Além disso, apresentam baixo risco de sobreajuste, quando comparadas a modelos individuais. O sobreajuste ocorre quando um modelo se ajusta excessivamente aos dados de treinamento, capturando até mesmo ruídos e variações aleatórias, o que compromete sua capacidade de generalização para novos dados. As RFs reduzem esse risco ao utilizar a média dos resultados de múltiplas árvores de decisão, construídas com subconjuntos diferentes de dados e variáveis. Essa abordagem suaviza as variações individuais e melhora a performance do modelo.

Estudos recentes demonstram que a precisão desses modelos na predição de propriedades mecânicas, como resistência à tração e módulo de elasticidade, pode atingir coeficientes de determinação superiores a 0,90, desde que os dados sejam devidamente tratados e os modelos otimizados por técnicas, como validação cruzada, busca em grade ou *random search* [5,10,12].

2.4 Aprendizado não supervisionado

Diferente do aprendizado supervisionado, que requer dados rotulados, o aprendizado não supervisionado trabalha com conjuntos de dados sem informações

prévias sobre as classes ou categorias a serem identificadas. Esse tipo de aprendizado é particularmente útil na metalurgia de aços para a análise exploratória de grandes bases de dados, permitindo a descoberta de padrões ocultos e a segmentação de diferentes tipos de ligas metálicas com base em suas características metalúrgicas [7,18].

Uma das técnicas mais utilizadas nesse campo é o agrupamento de dados (*clustering*), cujo objetivo é agrupar observações com características semelhantes. A Figura 4 ilustra como este agrupamento de dados pode ocorrer.

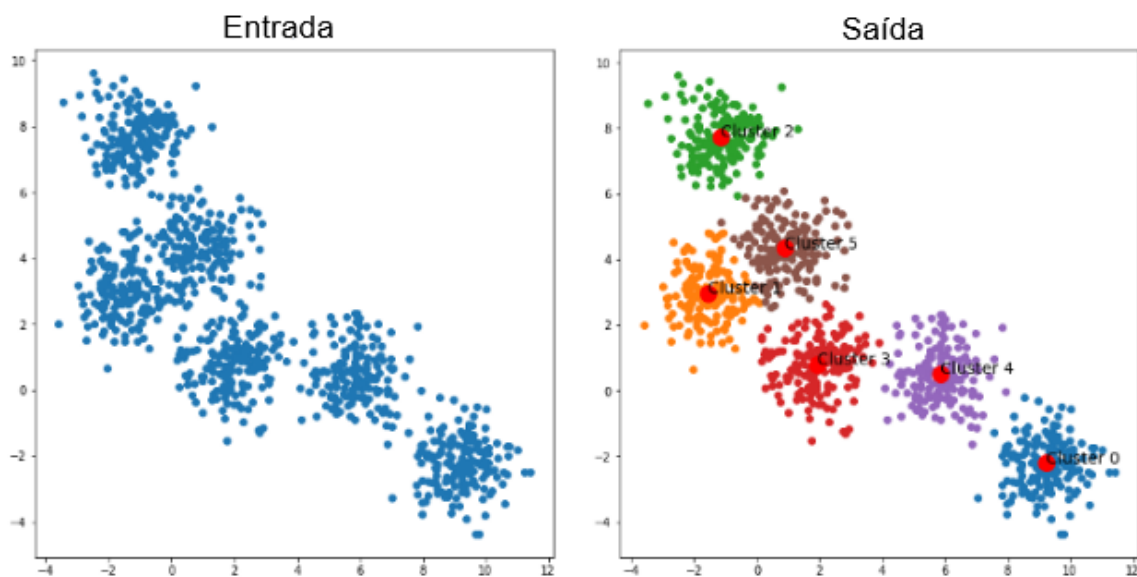


Figura 4. Exemplo do agrupamento de dados (*clustering*). Adaptado de [19].

O algoritmo *K-Means*, por exemplo, busca separar os dados em grupos distintos com base na minimização da distância entre os pontos e os centróides de cada grupo [7,19]. Já o DBSCAN, um algoritmo de agrupamento baseado em densidade, é mais adequado para conjuntos de dados com formas complexas ou ruído, e tem sido aplicado com sucesso na identificação de padrões microestruturais em imagens obtidas por microscopia [19,20].

A análise de componentes principais (PCA), por sua vez, é amplamente empregada como método de redução de dimensionalidade. O PCA transforma as variáveis originais em um novo conjunto de variáveis ortogonais chamadas componentes principais, que retêm a maior parte da variabilidade dos dados. A Figura 5 ilustra como o PCA pode ser aplicado.

Essa técnica é especialmente útil em bases metalúrgicas com muitas variáveis composicionais, permitindo visualizar e interpretar com mais clareza os fatores que influenciam determinadas propriedades dos aços [11,21,22].

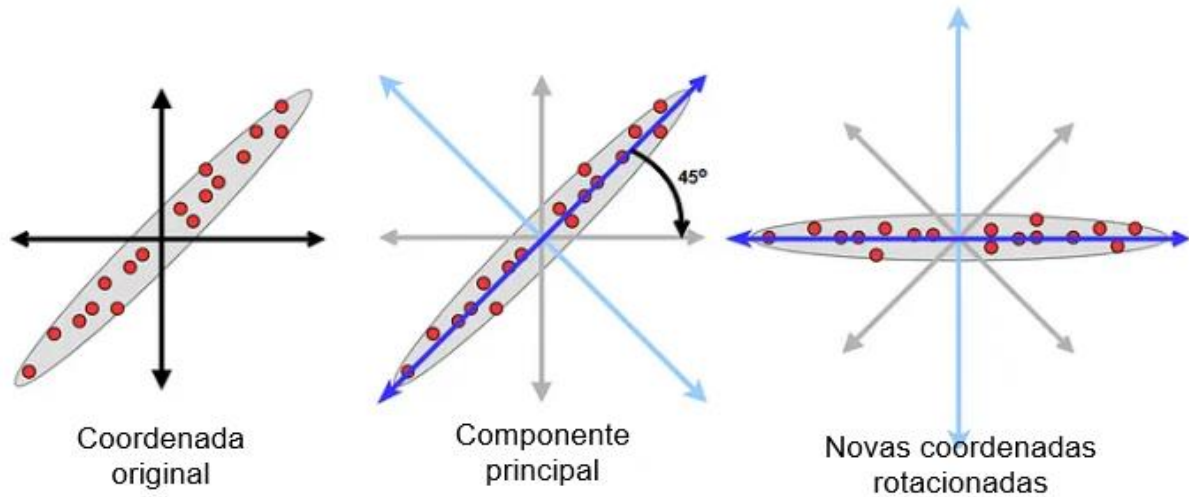


Figura 5. Exemplo da análise de componentes principais (PCA). Adaptado de [22].

2.5 Aprendizado por reforço

O aprendizado por reforço é uma técnica baseada em um sistema de recompensas, no qual o algoritmo aprende a tomar decisões por meio de tentativa e erro, buscando maximizar um determinado objetivo ao longo do tempo [8]. A Figura 6 indica um esquema do funcionamento do modelo de aprendizado por reforço.

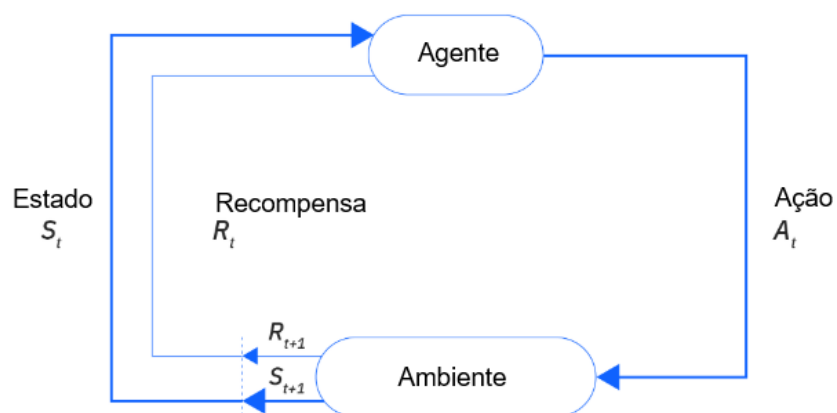


Figura 6. Diagrama esquemático do modelo de aprendizado por reforço. Adaptado de [8].

Essa abordagem tem sido aplicada na metalurgia de aços para otimizar processos industriais dinâmicos, nos quais as condições variam continuamente e exigem ajustes automáticos para garantir a melhor performance do material produzido [2].

Uma das principais aplicações do aprendizado por reforço na metalurgia é a otimização do controle de temperatura em fornos de tratamento térmico. O ajuste preciso da temperatura e do tempo de aquecimento é essencial para garantir a formação da microestrutura desejada no aço, e algoritmos de aprendizado por reforço podem ser utilizados para encontrar os melhores parâmetros operacionais, reduzindo desperdícios de energia e garantindo uma produção mais eficiente [8,10].

Além disso, redes neurais profundas de reforço vêm sendo aplicadas para prever o comportamento estrutural do aço em diferentes condições de processamento e uso. Essas redes são capazes de aprender a partir de grandes volumes de dados experimentais e computacionais, permitindo a modelagem precisa das transformações metalúrgicas e dos efeitos mecânicos ao longo da vida útil do material [2,8,17].

2.6 Algoritmos genéticos

Os algoritmos genéticos são métodos de otimização baseados nos princípios da seleção natural e têm sido amplamente aplicados na metalurgia de aços para resolver problemas complexos de engenharia. Esses algoritmos trabalham com populações de soluções candidatas, que são iterativamente avaliadas, combinadas e mutadas para encontrar a melhor configuração possível de variáveis [7,9]. A Figura 7 nos apresenta esquematicamente a lógica por trás de um algoritmo genético.

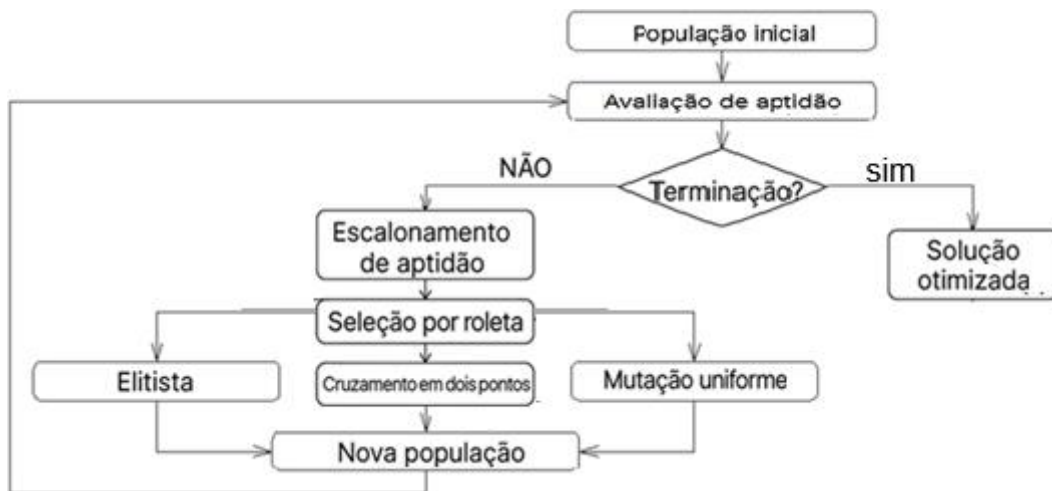


Figura 7. Diagrama esquemático do modelo de algoritmos genéticos. Adaptado de [9].

Na metalurgia, os algoritmos genéticos são empregados para otimizar a composição química de ligas metálicas, buscando combinações de elementos que maximizem a resistência mecânica e minimizem a fragilidade, por exemplo [7,9]. Esses algoritmos também são utilizados na simulação de processos metalúrgicos, permitindo prever o comportamento do aço sob diferentes condições de tratamento térmico e mecânico. Além disso, a combinação de algoritmos genéticos com técnicas de aprendizado profundo (*Deep learning*) tem sido explorada para o projeto de novas ligas, abrindo caminho para o desenvolvimento de materiais inovadores com propriedades superiores [2,10].

Estudos recentes demonstraram a aplicação de algoritmos genéticos guiados por *machine learning* para o desenvolvimento de aços de média liga com excelente equilíbrio entre resistência e ductilidade, utilizando um modelo preditivo para avaliar cada nova combinação gerada. Essa integração entre otimização evolutiva e predição via ML tem se mostrado eficaz para acelerar a descoberta de ligas metálicas otimizadas com menor custo experimental [7,10].

2.7 Aprendizado profundo (*Deep learning*)

O aprendizado profundo (*deep learning*) é uma subárea do ML que se baseia na utilização de redes neurais artificiais com múltiplas camadas ocultas, denominadas redes profundas (*deep neural networks* - DNNs). Essas redes são capazes de aprender representações hierárquicas de dados brutos, extraíndo

automaticamente características a partir de entradas complexas [2]. A Figura 8 indica as diferenças entre uma rede neural simples e uma profunda.

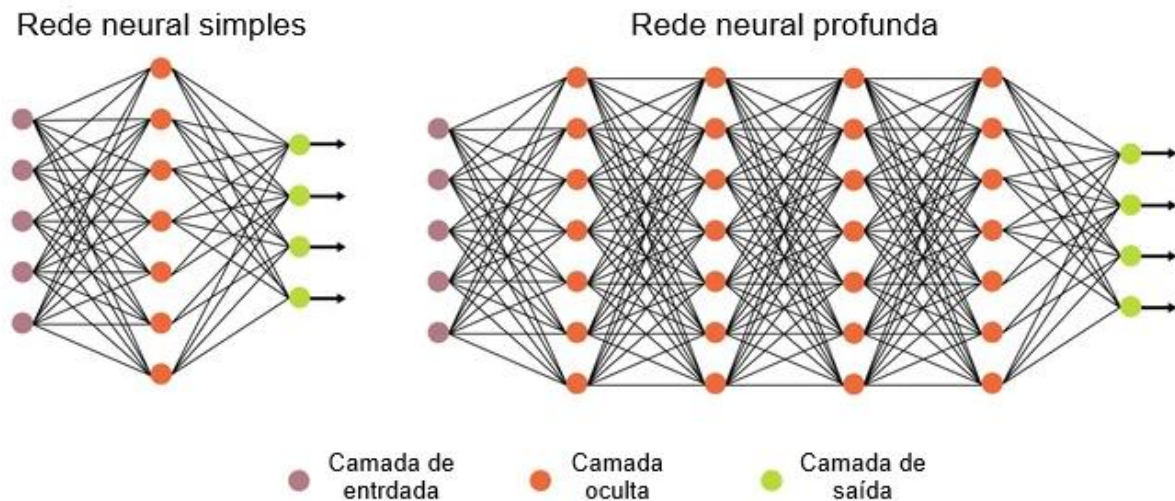


Figura 8. Diagrama esquemático do modelo de aprendizado profundo (*deep learning*). Adaptado de [17].

Essa capacidade é particularmente útil para tratar conjuntos de dados grandes, não estruturados ou com múltiplas dimensões, como imagens, sinais temporais e séries históricas. Na metalurgia de aços, o DL tem sido amplamente aplicado em tarefas como a análise automatizada de micrografias, a predição do comportamento mecânico e a automação da inspeção de qualidade [2,10].

Dentre as arquiteturas mais utilizadas, destacam-se as Redes Neurais Convolucionais (CNNs). Essas redes foram desenvolvidas para trabalhar com dados espaciais, como imagens, e são estruturadas em camadas convolucionais que aplicam filtros (ou *kernels*) sobre a entrada para extrair padrões locais; como bordas, texturas ou regiões específicas de uma imagem. Cada camada sucessiva combina esses padrões em estruturas mais abstratas, permitindo que a rede reconheça, por exemplo, a presença de grãos, a formação de fases metalúrgicas específicas, ou ainda inclusões não metálicas que comprometem a integridade do material [2,16]. Após as camadas convolucionais, normalmente são adicionadas camadas de agrupamento (*pooling*), que reduzem a dimensionalidade e aumentam a robustez do modelo. Por fim, camadas totalmente conectadas (*fully connected*) realizam a classificação ou regressão final [16]. A Figura 9 mostra como CNNs atuam para categorizar saídas a partir de dados de imagem de entrada.

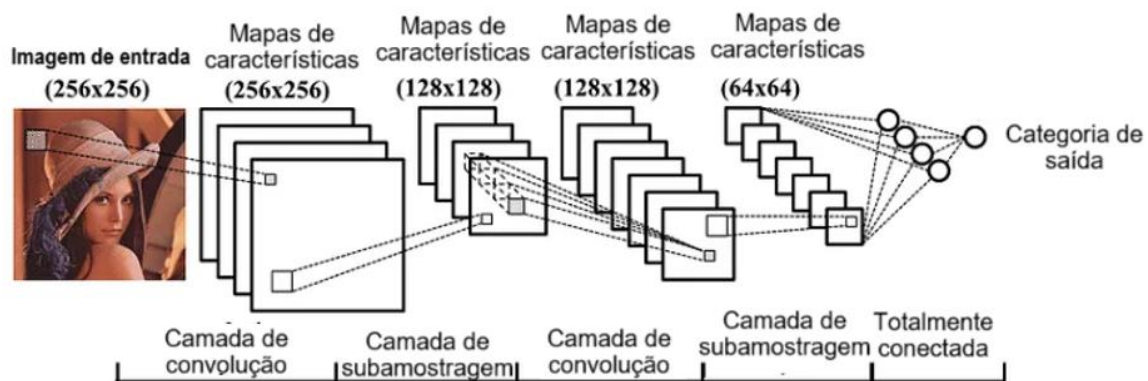


Figura 9. Exemplo da utilização e funcionamento das Redes Neurais Convolucionais (CNNs). Adaptado de [16].

Na metalurgia de aços, CNNs vêm sendo amplamente utilizadas para análise automatizada de imagens metalográficas obtidas por microscopia óptica ou eletrônica, permitindo a segmentação e classificação automática das microestruturas [10,16]. Isso representa um avanço significativo em relação às metodologias tradicionais, que dependem da análise visual feita por especialistas, muitas vezes sujeita a subjetividades e variabilidades entre operadores. Além disso, CNNs são altamente eficientes na detecção de falhas superficiais em linhas de produção, como trincas, porosidades e descontinuidades, sendo integradas em sistemas de visão computacional para controle de qualidade em tempo real [2,16].

Outra arquitetura importante no contexto do DL é a das Redes Neurais Recorrentes (RNNs). Essas redes são projetadas para trabalhar com dados sequenciais ou temporais, como séries de medições de propriedades ao longo do tempo ou ciclos de carregamento mecânico. Diferentemente das redes tradicionais, que consideram apenas a entrada atual, as RNNs possuem conexões recorrentes que permitem armazenar informações de estados anteriores, criando uma "memória" no modelo [23]. A Figura 10 representa um diagrama esquemático do modelo de RNNs.

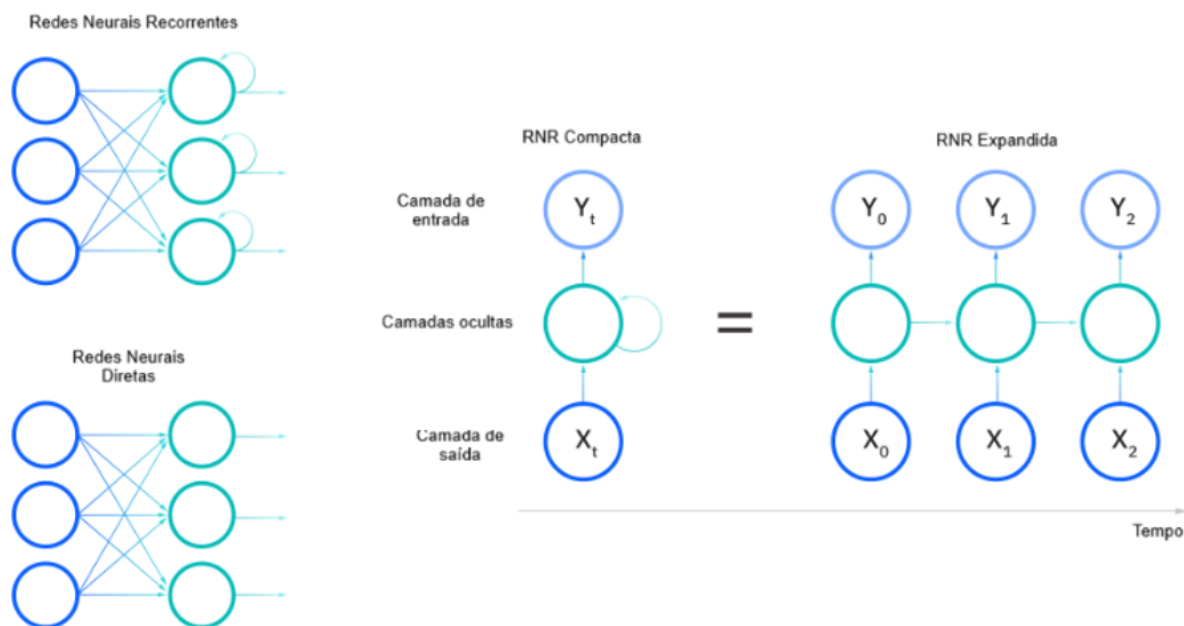


Figura 10. Diagrama esquemático do modelo de Redes Neurais Recorrentes (RNNs). Adaptado de [23].

Essa característica torna as RNNs especialmente úteis para modelar fenômenos que evoluem no tempo, como o desgaste, a corrosão ou a fadiga cíclica de materiais.

As RNNs são frequentemente utilizadas para prever a vida útil de componentes metálicos submetidos a ambientes agressivos ou a cargas variáveis, pois conseguem lidar com sequências temporais de dados. No entanto, redes RNNs simples apresentam dificuldades em capturar dependências de longo prazo devido ao chamado problema do desaparecimento do gradiente. Esse fenômeno ocorre durante o processo de treinamento, em que os gradientes, responsáveis por ajustar os pesos, tornam-se extremamente pequenos ao atravessar diversas camadas. Como resultado, as atualizações de peso são insignificantes e a rede deixa de aprender relações importantes que envolvem eventos ou estados muito distantes no tempo, o que compromete sua eficácia em tarefas que exigem memória de longo prazo. Para superar essas limitações, variantes como as redes LSTM (*Long Short-Term Memory*) e GRU (*Gated Recurrent Units*) foram desenvolvidas, oferecendo maior capacidade de retenção de informações e estabilidade no treinamento. Essas arquiteturas têm sido aplicadas com sucesso para monitoramento de integridade estrutural e previsão da degradação de ligas metálicas sob múltiplas influências ambientais [10,23].

Por fim, a integração dessas redes com técnicas de *data augmentation* (aumento de dados), transferência de aprendizado (*transfer learning*) e *explainable AI* (XAI) tem ampliado seu uso na indústria, promovendo resultados mais robustos, interpretáveis e aplicáveis a diferentes contextos de produção [2,10]. Em ambientes metalúrgicos, essas tecnologias são fundamentais para a implementação de sistemas autônomos de controle de qualidade e manutenção [10].

3. Materiais e métodos

A metodologia deste trabalho baseia-se na realização de uma revisão bibliográfica sistemática voltada à aplicação de técnicas de *machine learning* na metalurgia de aços e analisar o estado da arte desta tecnologia voltada para esta aplicação. A partir dessa abordagem, será possível explorar e prever quais possíveis técnicas de ML poderão ser utilizadas em cada aplicação. Para isso, são levadas em consideração as relações entre composição química, parâmetros de processamento e propriedades mecânicas, principalmente.

A etapa mais extensa deste trabalho consistiu na realização de uma revisão bibliográfica sistemática, voltada à identificação, análise e discussão dos principais estudos que tratam da aplicação de algoritmos de *machine learning* na previsão e otimização de propriedades de aços. Foram consultadas as principais bases de dados científicas internacionais, como ScienceDirect, Scopus, SpringerLink e IEEE Xplore, privilegiando artigos publicados nos últimos cinco anos, com foco em revisões, estudos experimentais com modelagem preditiva e propostas de otimização de ligas metálicas.

Os critérios de seleção incluíram: a presença explícita dos termos “*machine learning*” e “*steel*” no título ou palavras-chave; a existência de validação experimental ou computacional dos modelos propostos; e a descrição da metodologia adotada. Estudos voltados à predição de propriedades mecânicas (como resistência à tração, dureza, limite de escoamento e alongamento), análise de microestrutura via redes neurais convolucionais, e otimização de composição química por meio de algoritmos genéticos foram especialmente priorizados. Essa ênfase se justifica pelo alto potencial dessas abordagens em resolver problemas complexos da metalurgia moderna. As CNNs são eficazes na interpretação de imagens de microscopia, permitindo a identificação automatizada e precisa de padrões microestruturais, o que é essencial para estabelecer correlações entre microestrutura e propriedades mecânicas. Por sua vez, os algoritmos genéticos oferecem estratégias eficientes para a otimização de composições em ligas metálicas, reduzindo a necessidade de ensaios experimentais extensivos e acelerando o desenvolvimento de materiais com desempenho aprimorado.

Durante a seleção, os artigos foram categorizados com base nos tipos de algoritmos utilizados, nas propriedades analisadas e na forma de validação dos modelos. Cada artigo foi examinado de forma crítica, observando-se não apenas os

resultados, mas também as limitações metodológicas e as perspectivas apontadas para o avanço da área. Esse processo permitiu a construção de um panorama detalhado das contribuições recentes da área, servindo como base conceitual e técnica para as etapas subsequentes deste trabalho.

4. Resultados

Dado o caráter bibliográfico deste trabalho, os resultados apresentados baseiam-se na análise crítica da literatura selecionada e no mapeamento das aplicações de ML na metalurgia de aços, com foco na predição e otimização de propriedades mecânicas, composição química e controle de microestruturas/fases.

4.1 Predição de propriedades mecânicas

O aprendizado supervisionado tem se destacado como a principal abordagem em estudos que buscam prever propriedades mecânicas de aços. A maioria desses modelos é construída a partir de bases de dados estruturadas contendo entradas como composição química, parâmetros de processamento e histórico de deformações, com saídas conhecidas provindas de testes experimentais ou simulações computacionais.

Shaheen et al. (2023) utilizaram algoritmos de RF e SVM para prever as propriedades mecânicas de aços de alta resistência que foram submetidos a diferentes temperaturas, com base em dados experimentais coletados em laboratório. O conjunto de dados utilizado foi composto por 366 registros extraídos de 19 estudos distintos, abrangendo uma variedade de condições experimentais. Os aços analisados apresentavam predominantemente microestrutura martensítica, característica comum em aços de alta resistência submetidos a processos de têmpera, sendo essa estrutura particularmente sensível a variações térmicas. Os modelos apresentaram um bom desempenho, atingindo valores de R^2 superiores a 0,90, e demonstraram boa capacidade de generalização mesmo com um volume de dados que é considerado moderado [4].

Ji et al. (2024) investigaram a influência dos parâmetros de composição e processamento sobre a resistência ao desgaste de aços de médio manganês, utilizando DNNs. A base de dados, construída a partir de ensaios experimentais, abrangeu variações na composição química, parâmetros do tratamento térmico e diferentes condições do ensaio de impacto, resultando em um conjunto de dados sobre microestrutura, dureza, tenacidade ao impacto e resistência ao desgaste. Os modelos treinados apresentaram elevada precisão na previsão das propriedades tribológicas, especificamente resistência ao desgaste, com coeficientes de determinação superiores a 0,92 e erro médio absoluto inferior a 5% [13].

Kateb e Safarian (2025) propuseram um modelo de aprendizado

supervisionado para prever propriedades mecânicas de aços com diferentes composições e rotas de processamento. Utilizando um conjunto de dados extraído de diversas fontes experimentais e industriais, com mais de 500 registros, eles aplicaram modelos baseados em regressão por *boosting*, árvores de decisão e redes neurais. O modelo final alcançou R^2 de 0,95 para resistência à tração e 0,91 para alongamento [6].

Wu et al. (2024) aplicaram DNNs para prever o limite de escoamento, resistência à tração e dureza de ligas Fe-C-Cr-Mn-Si, com base em dados obtidos de bancos experimentais e cálculos via CALPHAD. O modelo foi treinado e validado de maneira cruzada, atingindo precisão superior a 97% para todas as propriedades mecânicas avaliadas, além de apresentar boa capacidade de extrapolação para composições fora do intervalo originalmente testado. Esse intervalo contemplou teores de C entre 0,10 e 0,90%, Si de 0,17 a 1,80%, Mn de 0,40 a 1,90%, Cr de 0,25 a 2,25% e Mo de 0,10 a 2,20% [3].

Millner et al. (2025) compararam modelos semiempíricos e algoritmos de aprendizado de máquina para prever propriedades de tração de diferentes aços. Utilizando uma base industrial com mais de 700 amostras, os modelos RF e GB superaram os modelos empíricos tradicionais, atingindo $R^2 > 0,9$ e erro quadrático médio reduzido em até 30% em relação aos métodos clássicos [12].

Além da precisão, diversos autores destacam a importância da interpretabilidade e da qualidade dos dados. Liu et al. (2022), em sua revisão, ressaltam que a eficiência dos modelos depende fortemente do pré-processamento dos dados, da remoção de valores discrepantes, da seleção de variáveis e da utilização de técnicas de regularização e validação cruzada para evitar sobreajuste [2]. A validação cruzada consiste em dividir o conjunto de dados em múltiplas partes e treinar o modelo repetidamente em subconjuntos distintos, testando-o nos dados remanescentes a cada rodada. Essa abordagem permite avaliar o desempenho do modelo de forma mais realista, evitando que ele memorize padrões específicos de um único conjunto de treinamento; com isso, há a redução do risco de ocorrer sobreajuste.

Hu et al. (2023) propõem o uso de técnicas baseadas em SHAP e LIME para interpretar os modelos de rede neural utilizados na predição de propriedades mecânicas. A partir da análise das contribuições de cada variável, foi possível identificar os elementos de liga mais relevantes para cada propriedade avaliada. A

base utilizada continha aproximadamente 300 composições distintas, combinadas com propriedades mecânicas obtidas por simulação [20].

Por fim, Millner et al. (2023) utilizaram aprendizado supervisionado em dados industriais reais para prever propriedades mecânicas diretamente a partir de parâmetros de processo, sem informações explícitas sobre composição. O sucesso do modelo ($R^2 > 0,93$) demonstra o potencial do ML para capturar padrões complexos mesmo em ambientes industriais com variabilidade e ruído nos dados. A base de dados incluiu mais de 1000 registros de produção, fornecidos por uma linha de laminação contínua [5].

4.2 Otimização da composição química

A otimização da composição química de ligas metálicas representa um dos maiores desafios no design de materiais, especialmente quando múltiplas propriedades devem ser maximizadas simultaneamente. Nesse contexto, algoritmos genéticos têm sido amplamente utilizados para realizar buscas mais eficientes em bases de dados com variáveis complexas.

Diao et al. (2022) desenvolveram uma técnica de otimização assistida por ML utilizando algoritmos genéticos para buscar ligas que maximizassem resistência à tração e módulo de elasticidade, enquanto minimizavam o custo e a densidade. A base de dados foi construída a partir de simulações numéricas via CALPHAD e dados experimentais extraídos da literatura, totalizando 295 registros distintos de diversas composições de ligas. O modelo foi treinado com técnicas supervisionadas e os GAs foram usados para explorar novas combinações dentro do espaço de composição. O modelo proposto forneceu diversas soluções, que segundo os autores, representam composições promissoras para posterior validação experimental [7].

Allen et al. (2023) propuseram um modelo automatizado de design de ligas, que integra algoritmos genéticos com modelos preditivos treinados para estimar a temperabilidade de aços em função da composição química. Utilizando dados industriais obtidos a partir de bancos de dados de usinas e cálculos CALPHAD, o conjunto total de dados incluiu mais de 1500 amostras, com valores de dureza e temperabilidade registrados. Os autores conseguiram desenvolver algumas ligas que atendiam simultaneamente aos requisitos de dureza e de têmpera, o que é crucial em aplicações estruturais. O estudo demonstrou como a iteração entre o

modelo preditivo e o algoritmo genético permitiu encontrar novas soluções que não estavam inicialmente presentes no conjunto de dados original [24].

Wu et al. (2024) também exploraram algoritmos evolutivos para projetar ligas Fe-C-Cr-Mn-Si com propriedades mecânicas superiores. Neste estudo, os autores treinaram uma rede neural profunda com mais de 4000 entradas extraídas de bases experimentais públicas e privadas. Em seguida, um algoritmo genético foi utilizado para gerar novas composições, cujas propriedades eram estimadas pelo modelo. A integração resultou em um processo de otimização altamente eficiente, que sugeriu novas ligas, que segundo simulações termodinâmicas, apresentavam melhores propriedades do que as disponíveis comercialmente. Para validar os resultados, três das composições foram fabricadas e submetidas a ensaios de microdureza, onde apresentaram excelente concordância com os valores previstos. A menor discrepância observada entre as previsões do modelo e os dados experimentais foi de apenas 1,17% [3].

Outro avanço importante é o uso de *active learning* em conjunto com algoritmos genéticos. Korotaev e Yanilkin (2023) propuseram a integração dessas duas abordagens para melhorar a eficiência da exploração de composições de aços. A base de dados inicial foi composta por 120 ligas extraídas de publicações científicas e bancos de dados CALPHAD, e o modelo evoluiu iterativamente à medida que novas amostras eram sugeridas pelo algoritmo. O aprendizado ativo permitiu que o modelo selecionasse, com base em critérios de incerteza, quais novas amostras ou composições deveriam ser avaliadas. Ao acoplar esse mecanismo ao algoritmo genético, foi possível acelerar a convergência do processo de otimização e reduzir a quantidade de simulações necessárias [18].

Liu et al. (2022), em sua revisão, reforçam que a combinação entre GAs e modelos preditivos treinados com dados de alta qualidade é uma das abordagens mais promissoras. Os autores também destacam o papel dos algoritmos genéticos na seleção de variáveis, permitindo não apenas otimizar ligas, mas também identificar os elementos mais influentes na definição de cada propriedade. Entre os estudos analisados, a maioria operava com conjuntos de dados entre 100 e 1000 registros, dependendo da complexidade das propriedades desejadas e da diversidade da composição dos materiais modelados [2].

4.3 Aplicações em inspeção e análise de microestrutura

O uso de *deep learning*, particularmente por meio de CNNs, tem se mostrado uma ferramenta poderosa na caracterização microestrutural de aços. Diferentemente das abordagens tradicionais, que dependem da análise visual manual, realizada por operadores, os modelos de DL oferecem uma forma automatizada, rápida e precisa de separar, classificar e quantificar as fases presentes nas microestruturas, com base em imagens provenientes de técnicas como microscopia óptica, MEV e EBSD.

Liu et al. (2022) realizaram uma ampla revisão das aplicações de DL na ciência dos materiais e destacaram diversos estudos nos quais CNNs foram utilizadas para identificar fases em ligas ferrosas. Um exemplo mencionado foi o uso de imagens de microscopia óptica de mais de 500 amostras para treinar modelos capazes de classificar ferrita, perlita, martensita e bainita com precisão superior a 95%. Os autores enfatizam que a principal limitação desses modelos ainda é a escassez de bancos de imagens padronizados e rotulados, o que tem levado muitos grupos a construir suas próprias bases de dados experimentais [2].

Millner et al. (2023) desenvolveram um modelo de DL para prever propriedades mecânicas com base em microestruturas obtidas a partir de aços fabricados industrialmente. O estudo utilizou uma base de dados composta por 1200 imagens de micrografias em conjunto com as propriedades mecânicas medidas, incluindo tração, dureza e alongamento. As imagens foram processadas por uma CNN com camadas convolucionais profundas, seguidas por camadas totalmente conectadas. O modelo foi capaz de prever propriedades com $R^2 > 0,90$, demonstrando que microestruturas fornecem informações fundamentais para prever o comportamento do material [5].

Nguyen et al. (2025) apresentaram uma abordagem híbrida baseada em física e DL para o estudo dos limites de conformação de aços avançados de alta resistência (AHSS). A base de dados foi construída a partir de experimentos com 250 amostras que passaram por ensaios de conformação, além de imagens de microestruturas adquiridas por microscopia eletrônica. Os dados foram extraídos com auxílio de CNNs e utilizados como entrada para um modelo de ML supervisionado. O modelo final foi capaz de prever os limites de conformação com alta precisão, sendo validado experimentalmente com bons resultados ($R^2 \approx 0,92$) [21].

Li et al. (2024) aplicaram uma combinação de CNNs e RNNs na análise de microestruturas obtidas via EBSD. O trabalho buscou classificar padrões de orientação cristalina e prever as propriedades mecânicas de aços de baixa liga com base nos mapas de 400 amostras e diversos dados correlacionados. As CNNs foram responsáveis por extrair características espaciais dos mapas de EBSD, enquanto as RNNs capturaram padrões associadas ao histórico térmico dos materiais. O modelo conjunto alcançou R^2 superior a 0,93 na predição da dureza e da tenacidade à fratura [11].

Hu et al. (2023) exploraram o uso de *deep learning* orientado por física para prever o mecanismo de deformação a quente de aços inoxidáveis. A abordagem envolveu a criação de um banco de dados com resultados experimentais de 150 ensaios de compressão a quente, imagens de microestrutura e dados termodinâmicos extraídos das simulações. A CNN foi treinada para identificar microestruturas associadas a diferentes mecanismos de deformação. O modelo demonstrou precisão de classificação acima de 94% e apresentou capacidade de classificar diferentes classes de aços inoxidáveis [20].

Além das CNNs, RNNs têm sido aplicadas com sucesso em situações que envolvem dados sequenciais, como séries temporais de deformações, variações térmicas ou ciclos de carga. Li et al. (2023), no mesmo estudo mencionado anteriormente, demonstraram que a incorporação do histórico de tratamento térmico via RNNs permitiu melhorar consideravelmente as previsões, quando comparada com as feitas pelas redes estáticas. A base de dados de entrada continha registros dos históricos térmicos de mais de 100 ciclos distintos por composição, o que permitiu observar padrões de relevância [11].

Liu et al. (2022) destacam ainda que a combinação de DL com técnicas como *data augmentation* e *transfer learning* tem sido essencial para superar limitações de dados e acelerar o treinamento dos modelos. O uso de XAI também começa a emergir como uma prática para tornar os modelos mais interpretáveis, especialmente em contextos industriais, com bases que frequentemente possuem entre 50 e 500 imagens [2].

4.4 Desafios e tendências identificadas na literatura

A previsão do comportamento de ligas convencionais, como os aços carbono e os aços de baixa liga, apresenta desafios específicos devido à elevada quantidade

de variáveis envolvidas. Propriedades mecânicas e microestruturais são influenciadas simultaneamente por fatores como composição química, taxa de resfriamento, segregações, fases formadas, precipitados, e histórico termomecânico, dificultando a identificação de padrões claros e consistentes. Em muitos casos, a relação entre causa e efeito não é evidente, especialmente em materiais com ampla faixa de variação composicional ou sujeitos a múltiplas etapas de processamento. Essa complexidade intrínseca torna mais difícil tanto a coleta e organização de dados representativos quanto a construção de modelos preditivos confiáveis, exigindo abordagens computacionais robustas, capazes de lidar com interações não lineares e alta dimensionalidade.

Apesar do progresso significativo observado na aplicação de ML, a literatura aponta para desafios estruturais e metodológicos que ainda limitam a plena adoção dessas técnicas em ambientes industriais e acadêmicos. Tais desafios envolvem a disponibilidade e qualidade das bases de dados, a interpretação dos modelos preditivos, a integração com conhecimento metalúrgico tradicional e a necessidade de padronização e validação dos modelos.

Um dos principais obstáculos relatados por diversos autores refere-se à disponibilidade limitada de bases de dados públicas e padronizadas. Liu et al. (2022) alertam que a ciência dos materiais, e a metalurgia em particular, carece de repositórios amplamente acessíveis que contenham dados bem estruturados, confiáveis e representativos de diversas ligas, processos e propriedades [2]. Muitas vezes, os dados disponíveis são provenientes de ambientes industriais sob sigilo comercial ou de experimentos acadêmicos com escopo limitado.

Essa limitação dificulta a reprodutibilidade dos estudos e restringe a capacidade dos modelos de serem generalizados para composições ou condições fora do conjunto de treinamento. Millner et al. (2025) apontam que, mesmo quando os dados são abundantes, sua qualidade pode ser comprometida por ruído, inconsistência entre medições e/ou falta de documentação sobre o histórico de processamento [12].

Outro grande desafio é a baixa interpretabilidade dos modelos baseados em DNNs. Enquanto algoritmos como regressão linear e árvores de decisão oferecem transparência quanto à influência de cada variável, modelos de DL operam como “caixas-pretas”, dificultando o entendimento do raciocínio por trás das previsões.

Hu et al. (2023) defendem a adoção de métodos de XAI, como SHAP

(*Shapley Additive Explanations*) e LIME (*Local Interpretable Model-agnostic Explanations*), para tornar os modelos mais confiáveis e auditáveis. Em seu estudo, os autores utilizaram SHAP para avaliar a contribuição de variáveis como teor de cromo, taxa de resfriamento e temperatura de têmpera sobre a dureza do aço, oferecendo dados que reforçaram a validade do modelo preditivo [20].

Autores como Nguyen et al. (2025) e Li et al. (2024) ressaltam a importância de integrar conhecimento físico e metalúrgico nos modelos de ML, prática conhecida como *physics-guided machine learning*. Essa abordagem busca incorporar restrições físicas, equações constitutivas ou heurísticas baseadas em metalurgia para guiar o treinamento e evitar previsões inviáveis ou inconsistentes com o comportamento real dos materiais [11,21].

Nguyen et al. utilizaram essa estratégia na avaliação de limites de conformação de aços AHSS, obtendo um modelo mais robusto e generalizável do que os puramente empíricos. A integração com variáveis derivadas de simulações e conhecimento metalúrgico permitiu reduzir o risco de sobreajuste e aumentou a utilidade prática do modelo [21].

Entre as tendências mais promissoras com relação às metodologias de *machine learning*, destaca-se a adoção crescente de:

- *Transfer learning*: estratégia na qual um modelo treinado em uma base de dados rica é ajustado para outro conjunto de dados relacionado, mas menor. Allen et al. (2023) destacam que essa abordagem pode ser útil na metalurgia, especialmente quando se deseja aplicar modelos treinados com aços comuns para prever propriedades de aços especiais com poucas amostras disponíveis [24].
- *Self-supervised learning* (SSL): técnica que dispensa rótulos manuais e permite que os modelos aprendam representações úteis a partir da estrutura interna dos dados. Liu et al. (2022) observam que SSL pode ser particularmente valioso na análise de imagens metalográficas, onde o processo de rotulagem manual é demorado e sujeito a variações de interpretação [2].
- Modelagem híbrida com CALPHAD: Kateb e Safarian (2025) propuseram um modelo híbrido que combina aprendizado supervisionado com dados termodinâmicos gerados via CALPHAD para prever propriedades de aços. Essa união entre inteligência artificial e modelos físico químicos se mostra eficaz em

melhorar a robustez e a capacidade de extrapolação dos modelos, especialmente em ligas complexas com poucos dados disponíveis [6].

Essas tendências demonstram um movimento da comunidade científica rumo a modelos mais confiáveis, generalizáveis e integrados ao conhecimento metalúrgico. O futuro do uso de ML na metalurgia dos aços caminha, portanto, para uma abordagem interdisciplinar e colaborativa, que combine inteligência artificial, engenharia de materiais e ciência de dados para acelerar a inovação na área.

5. Discussão dos resultados

A análise dos estudos revisados permitiu identificar não apenas as aplicações das técnicas de ML na metalurgia dos aços, mas também os critérios que definem a escolha do modelo ideal para cada tipo de aplicação. Nesse sentido, a relação entre o tipo e a qualidade dos dados disponíveis, o grau de complexidade das variáveis envolvidas e a necessidade de interpretabilidade dos modelos são fatores essenciais para a seleção da abordagem mais eficaz.

As ANNs e suas variantes DNNs demonstraram excelente desempenho na predição de propriedades mecânicas, especialmente quando treinadas com grandes bases de dados experimentais ou simuladas [3,6,13]. Essas técnicas são particularmente úteis quando as relações entre as variáveis são não lineares e difíceis de capturar por modelos convencionais. No entanto, sua principal limitação é a baixa interpretabilidade, o que pode comprometer sua aceitação em ambientes industriais, a menos que sejam acompanhadas de métodos explicativos, como SHAP ou LIME [2,20].

Por outro lado, modelos baseados em árvores de decisão, como RF e GB, têm sido valorizados por sua robustez a ruídos, a sua capacidade de trabalhar com pequenos conjuntos de dados e de fornecer medidas claras da relevância de cada variável [5,6,12]. Essa capacidade vem do fato de que esses algoritmos não exigem suposições sobre a distribuição dos dados e são menos sensíveis à dimensionalidade, o que os torna menos propensos ao sobreajuste, em situações onde os dados são limitados. Além disso, ao separarem os dados a partir de critérios como o índice de Gini ou entropia, eles conseguem extrair padrões relevantes mesmo com poucas amostras. Esses modelos são ideais para aplicações onde a compreensão do comportamento de entrada e saída é tão importante quanto a sua precisão, como em cenários industriais onde decisões precisam ser justificadas com uma base técnica bem consolidada.

As SVMs se destacam em contextos em que a divisão dos dados é clara, como na classificação das fases presentes ou no agrupamento de dados dos diferentes processamentos. Apesar de não serem tão escaláveis quanto os modelos baseados em árvores, seu desempenho é competitivo quando utilizado com bases bem tratadas, especialmente com o uso de *kernels* adequados [4,6].

O uso de DL tem revolucionado a análise microestrutural, em especial com a

introdução de CNNs. Tais redes têm demonstrado notável capacidade de identificar fases, defeitos e padrões metalográficos em imagens de microscopia óptica ou eletrônica [2,5,20]. A vantagem das CNNs reside na automatização e padronização da inspeção, reduzindo o viés subjetivo e acelerando a sua avaliação. Estudos que combinam CNNs com RNNs ampliam ainda mais o potencial analítico dos modelos, pois permitem não apenas extrair características espaciais das imagens (via CNN), mas também capturar dependências sequenciais ou temporais nos dados analisados (via RNN). Essa integração é especialmente útil em aplicações que envolvem séries de imagens adquiridas ao longo de tratamentos térmicos ou processos de deformação, possibilitando o monitoramento da evolução da microestrutura de maneira contínua e mais precisa [11].

Além das técnicas preditivas, os GAs e o aprendizado ativo têm sido aplicados com bastante êxito na otimização de ligas metálicas. Eles atuam não apenas otimizando, mas também como ferramentas para exploração de diversas composições. Sua integração com modelos preditivos permite identificar composições ótimas para múltiplos critérios (resistência, ductilidade, custo, etc.), mesmo quando o espaço de busca é vasto e parcialmente desconhecido [3,7,24]. O aprendizado ativo, por sua vez, se mostra estratégico em contextos de restrição experimental, guiando quais composições valem a pena serem testadas, reduzindo o gasto de tempo e recursos [9].

Outro ponto que se destaca é o crescimento do uso de modelos híbridos, que combinam ML com simulações baseadas em física, como os métodos CALPHAD. Essa combinação permite não apenas melhorar a precisão dos modelos, mas também garantir que as soluções propostas respeitem restrições termodinâmicas e metalúrgicas reais, reforçando sua aplicabilidade prática [10,14].

A Tabela 1 a seguir resume essas correlações entre as técnicas de ML e suas aplicações mais frequentes na metalurgia dos aços:

Técnica de ML	Tipo de Aprendizado / Aplicação	Inputs típicos / Outputs esperados	Potencialidades / Benefícios	Referências
Redes Neurais (ANNs / DNNs)	Supervisionado / Sozinha ou combinada	Dados tabulares: composição química, dados experimentais / Predição de propriedades mecânicas, otimização de desgaste	Modela relações não-lineares complexas; bom desempenho em grandes bases	[2], [3], [6], [13]
Redes Neurais Convolucionais (CNNs)	Supervisionado / Sozinha ou combinada	Imagens de microscopia óptica ou eletrônica, EBSD/ Classificação de fases, detecção de defeitos	Extração automática de características espaciais; reduz viés subjetivo	[2], [5], [11], [20], [21]
Redes Neurais Recorrentes (RNNs)	Supervisionado / Combinada com CNNs	Séries temporais, histórico térmico / Previsão de propriedades ao longo do tempo	Captura dependências sequenciais; modela processos dinâmicos	[10], [11]
Máquinas de Vetores de Suporte (SVM)	Supervisionado / Sozinha	Dados tabulares, propriedades em condições variadas / Classificação, predição	Bom desempenho com bases pequenas; margem de decisão clara	[4], [6]

Técnica de ML	Tipo de Aprendizado / Aplicação	Inputs típicos / Outputs esperados	Potencialidades / Benefícios	Referências
Árvores Aleatórias (RF)	Supervisionado / Sozinha	Dados tabulares: propriedades mecânicas e químicas / Predição; interpretação da importância das variáveis	Robusto a ruídos; bom com bases pequenas; interpretabilidade	[4], [5], [6], [12]
Gradient Boosting / LightGBM / XGBoost	Supervisionado / Sozinha	Dados tabulares, propriedades mecânicas / Predição precisa; otimização de desempenho	Alta precisão; bom para bases médias	[6], [12]
Algoritmos Genéticos (GA)	Otimização (Metaheurística) / Combinado com ML	Parâmetros de composição, propriedades desejadas / Otimização de composições químicas	Explora grandes espaços de busca; otimização multiobjetivo	[2], [3], [7], [24]
Aprendizado Ativo (Active Learning)	Supervisionado / Combinado com ML	Dados rotulados e não rotulados, composições químicas / Seleção inteligente de amostras para treinamento	Reduz custos computacionais e experimentais; eficiente na coleta de dados	[7], [18]

Técnica de ML	Tipo de Aprendizado / Aplicação	Inputs típicos / Outputs esperados	Potencialidades / Benefícios	Referências
Modelos híbridos (ML + CALPHAD)	Supervisionado / Física / Combinado	Dados experimentais e modelagem CALPHAD / Predição robusta de propriedades termodinâmicas	Combina física e dados; maior confiabilidade e extrapolação	[6], [24]
XAI (Explainable AI)	Supervisionado / Combinado	Modelos treinados, variáveis de entrada / Interpretação e análise de importância	Aumenta confiança e aceitação; facilita decisão técnica	[2], [20]
Transfer Learning / SSL	Supervisionado / Sozinha ou combinada	Modelos pré-treinados, poucas amostras rotuladas / Predição com menos dados; análise de imagens	Usa dados escassos eficientemente; acelera treinamento	[2], [24]

Tabela 1. Principais correlações entre as técnicas de ML utilizadas e suas aplicações.

Considerando a necessidade de validação experimental dos modelos preditivos analisados, uma estratégia promissora seria aplicar essas técnicas de ML em aços inoxidáveis, especialmente os do tipo austenítico. Esses materiais apresentam uma vantagem relevante, eles partem predominantemente da fase austenítica em temperaturas elevadas, o que fornece um ponto de partida

microestrutural mais uniforme para os modelos. Essa homogeneidade inicial pode facilitar a identificação de padrões e a correlação entre parâmetros de processamento, transformações de fase e propriedades finais. A utilização de ML nesses casos permitiria prever, por exemplo, a fração de fases obtidas após diferentes rotas térmicas ou o comportamento mecânico resultante, e os modelos poderiam ser validados de forma controlada por meio de tratamentos térmicos sistemáticos, análises microestruturais e ensaios mecânicos. A aplicação prática desse tipo de abordagem poderia acelerar o desenvolvimento de aços inoxidáveis com propriedades otimizadas, ao mesmo tempo em que fortalece a robustez e a utilidade dos modelos propostos neste estudo.

A análise dos resultados também nos mostra que a aplicação de ML na metalurgia exige uma abordagem interdisciplinar, na qual engenheiros de materiais, cientistas de dados e metalurgistas atuem em conjunto. Esse tipo de integração é essencial para garantir que os modelos desenvolvidos tenham alta precisão, boa interpretabilidade e aplicabilidade real, especialmente considerando as exigências da indústria 4.0, que demanda respostas rápidas, adaptáveis e confiáveis.

6. Conclusões/ Considerações finais

Este trabalho teve como objetivo analisar criticamente as principais técnicas de ML aplicadas à metalurgia dos aços, com ênfase na predição de propriedades mecânicas, no desenvolvimento de novas ligas e na otimização de microestruturas e processos metalúrgicos. A partir de uma revisão bibliográfica abrangente, foi possível mapear e correlacionar diferentes técnicas as problemáticas da área, evidenciando o estado atual da literatura e suas principais contribuições.

Verificou-se que as técnicas de ML já desempenham um papel relevante na aceleração do desenvolvimento de materiais, principalmente pela sua capacidade de lidar com dados complexos, realizar predições precisas e reduzir a dependência de comprovações experimentais demoradas. A análise dos estudos revelou que diferentes métodos se apresentam mais adequados para um determinado tipo de problema, sendo que a sua eficiência está diretamente relacionada à qualidade dos dados e à integração com o conhecimento metalúrgico consolidado.

A principal contribuição deste trabalho consiste na organização e sistematização do conhecimento atual sobre o uso de ML na engenharia de aços, oferecendo uma base de consulta relevante para estudantes, pesquisadores e profissionais da área. Além disso, destaca-se a importância de iniciativas voltadas à criação de bases de dados públicas e padronizadas, bem como à adoção de estratégias alinhadas aos princípios e conceitos da ciência e engenharia dos materiais.

Como continuidade deste estudo, recomenda-se a aplicação prática dos métodos aqui discutidos, por meio da implementação de modelos preditivos sobre bases de dados experimentais reais. A integração entre técnicas de ML e modelagens físico químicas, como CALPHAD, assim como o uso de aprendizado por reforço para o controle de processos industriais, representam caminhos promissores para trabalhos futuros com enfoque prático e interdisciplinar.

Conclui-se, portanto, que a aplicação de ML na metalurgia dos aços já apresenta resultados expressivos e promissores, principalmente quando associada a uma compreensão aprofundada dos materiais e processos envolvidos. O próximo passo, conforme aponta a literatura, é ampliar o uso de abordagens híbridas e autônomas, que combinem aprendizado orientado por dados, simulações baseadas em física e validação experimental.

7. Referências

- [1] WORLD STEEL ASSOCIATION. *World Steel in Figures 2024*. Brussels, 2024. Disponível em: <https://worldsteel.org/publications/>
- [2] LIU, Xiujuan et al. Material machine learning for alloys: Applications, challenges and perspectives. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.165984.
- [3] WU, Hao et al. Extreme high accuracy prediction and design of Fe-C-Cr-Mn-Si steel using machine learning. *Materials and Design*, 2024. DOI: 10.1016/j.matdes.2024.113473.
- [4] SHAHEEN, Mohamed A.; PRESSWOOD, Rebecca et al. Application of Machine Learning to predict the mechanical properties of high strength steel at elevated temperatures. *Structures*, 2023. DOI: 10.1016/j.istruc.2023.03.085.
- [5] MILLNER, Gerfried et al. Machine learning mechanical properties of steel sheets from an industrial production route. *Materialia*, 2023. DOI: 10.1016/j.mtla.2023.101810.
- [6] KATEB, Movaffaq; SAFARIAN, Sahar. Machine learning-driven predictive modeling of mechanical properties in diverse steels. *Machine Learning with Applications*, 2025. DOI: 10.1016/j.mlwa.2025.100634.
- [7] DIAO, Yupeng; YAN, Luchun; GAO, Kewei. A strategy assisted machine learning to process multi-objective optimization for improving mechanical properties of complex alloys. *Journal of Materials Science and Technology*, 2021. DOI: 10.1016/j.jmst.2021.09.004.
- [8] SUTTON, Richard S.; BARTO, Andrew G. *Reinforcement Learning: An Introduction*. MIT Press, 2018 (2^a ed.). ISBN: 9780262039246.
- [9] HOLLAND, John H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, 1975.
- [10] HU, Mingwei et al. Recent applications of machine learning in alloy design: A review. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2023. DOI:

10.1016/j.mser.2023.100746.

[11] LI, Yu et al. Predicting mechanical properties of low-alloy steels using features extracted from Electron Backscatter Diffraction characterization. *Journal of Materials Research and Technology*, 2024. DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.10.225.

[12] MILLNER, Gerfried et al. Comparison of semi-empirical models, symbolic regression, and machine learning approaches for prediction of tensile properties. *International Journal of Engineering Science*, 2025. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2024.104996.

[13] JI, Yafeng et al. Research on alloy composition-process-wear properties of medium manganese steel based on machine learning. *Tribology International*, 2024. DOI: 10.1016/j.triboint.2024.108234.

[14] VAPNIK, Vladimir. *The Nature of Statistical Learning Theory*. Springer, 1995.

[15] BREIMAN, Leo. Random forests. *Machine Learning*, v. 45, n. 1, p. 5–32, 2001. DOI: 10.1023/A:1010933404324.

[16] LE CUN, Yann; BENGIO, Yoshua; HINTON, Geoffrey. Deep learning. *Nature*, v. 521, p. 436–444, 2015. DOI: 10.1038/nature14539.

[17] GOODFELLOW, Ian; BENGIO, Yoshua; COURVILLE, Aaron. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. ISBN: 9780262035613.

[18] KOROTAEV, Pavel; YANILKIN, Aleksey. Steels classification by machine learning and Calphad methods. *Calphad*, 2023. DOI: 10.1016/j.calphad.2023.102587.

[19] JAIN, Anil K. Data clustering: 50 years beyond K-means. *Pattern Recognition Letters*, v. 31, n. 8, p. 651–666, 2010. DOI: 10.1016/j.patrec.2009.09.011.

[20] LI, Huaying et al. Physical metallurgy guided machine learning to predict hot deformation mechanism of stainless steel. *Materials Today Communications*, 2023. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2023.106779.

[21] NGUYEN, Nhat Tam et al. Physics-guided machine learning for forming-limit

assessments of advanced high-strength steels. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2025. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2025.109959.

[22] OLLIFFE, Ian T.; CADIMA, Jorge. Principal component analysis: a review and recent developments. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, v. 379, 2021. DOI: 10.1098/rsta.2020.0202.

[23] LIPTON, Zachary C. A critical review of recurrent neural networks for sequence learning. *arXiv preprint*, arXiv:1506.00019, 2015.

[24] ALLEN, Louis et al. Development of a machine learning framework to determine optimal alloy composition based on steel hardenability properties. *Digital Chemical Engineering*, 2023. DOI: 10.1016/j.dche.2023.100036.