

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

**Inteligência artificial para previsão de variáveis de processos
termomecânicos via elementos finitos**

Beatriz Pomponio de Andrade

SÃO CARLOS -SP
[2025]

Inteligência artificial para previsão de variáveis de processos termomecânicos via elementos finitos

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: Dr. Lucas Barcelos Otani
Coorientadora: Ma. Caroline Binde Stoco

São Carlos-SP
[2025]



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

NOME: Beatriz Pomponio de Andrade

RA: 762117

TÍTULO: Inteligência artificial para previsão de variáveis de processos termomecânicos via elementos finitos

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

CO-ORIENTADOR(A): Me. Caroline Binde Stocco

DATA/HORÁRIO: 11/07/2025, 17h15

BANCA – NOTAS:

	Monografia	Defesa
Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani	6	8
Prof. Dr. Francisco Gil Coury	6	8
Média	6	8

BANCA – ASSINATURAS:

Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani

Documento assinado digitalmente
gov.br LUCAS BARCELOS OTANI
Data: 14/07/2025 13:41:35-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Francisco Gil Coury

Documento assinado digitalmente
gov.br FRANCISCO GIL COURY
Data: 14/07/2025 16:36:57-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à minha família, amigos e professores que acreditaram em mim e me apoiaram para que eu não desistisse. Sou muito grata pelo incentivo e pela força durante toda essa jornada.

AGRADECIMENTO

Gostaria de expressar minha profunda gratidão ao meu orientador, o Professor Doutor Lucas Barcelos Otani, pelo apoio, ensinamentos, paciência e valiosas orientações ao longo de toda a realização deste trabalho. Agradeço também à minha coorientadora, Caroline Binde Stoco, pela dedicação, ensinamentos e auxílio fundamental na construção deste projeto.

À minha família, deixo meu carinho e reconhecimento: à minha mãe, Solange de Jesus Pomponio; ao meu pai, Hamilton Fernando de Andrade; e à minha irmã, Eduarda Pomponio de Andrade. Vocês foram meu alicerce e fonte de força em todos os momentos, apoiando-me sempre.

Não poderia deixar de agradecer ao meu namorado, Felipe Rodrigues de Nami, pelos incentivos e por estar sempre ao meu lado, especialmente nas horas mais difíceis.

Agradeço também à SIXPRO Virtual and Practical Process Ltda., distribuidora oficial no Brasil, por ter disponibilizado gentilmente uma licença educacional do software QForm UK, instrumento essencial para a realização das simulações e análises desenvolvidas neste trabalho.

A todos vocês, meu muito obrigada por fazerem parte dessa conquista.

RESUMO

A extrusão metálica é amplamente utilizada na fabricação de componentes com geometrias complexas e elevadas exigências mecânicas. No entanto, a previsão de variáveis desse processo, como a carga máxima e a triaxialidade, por meio de simulações via Método dos Elementos Finitos (MEF), como o software QForm UK, apresenta elevado custo computacional e dificuldade de generalização para novas ligas. Diante disso, este trabalho propõe o uso de algoritmos de aprendizado de máquina como alternativa para prever essas variáveis a partir da composição química das ligas. Foram realizadas simulações com ligas de alumínio (Al), cobre (Cu), níquel (Ni) e aço inoxidável (Fe), mantendo-se constantes as condições de processo. Os dados extraídos foram a carga máxima e a triaxialidade máxima, enquanto as composições químicas foram convertidas em descritores físico-químicos, como massa atômica, raio atômico, eletronegatividade entre outros. Esses dados alimentaram três modelos de regressão supervisionada: Support Vector Regression (SVR), Random Forest (RF) e Gradient Boosting Regressor (GBR). Os hiperparâmetros dos modelos foram otimizados automaticamente com o uso da biblioteca Optuna, que emprega uma estratégia de busca bayesiana mais eficiente que métodos tradicionais como grid search. O modelo GBR obteve o menor erro (RMSE) na previsão da carga, especialmente para ligas de cobre, mas apresentou maior dificuldade nas faixas de níquel e alumínio. Para a triaxialidade, todos os modelos apresentaram desempenho limitado, com erros comparáveis à própria variabilidade da variável. Os resultados confirmam a viabilidade da integração entre MEF e inteligência artificial na previsão da carga em processos de extrusão, ao mesmo tempo em que evidenciam os desafios da modelagem de triaxialidade

Palavras-chave: Aprendizado de máquina. Elementos finitos. Extrusão metálica. Triaxialidade. QForm.

ABSTRACT

Metal extrusion is widely used in the manufacturing of components with complex geometries and high mechanical performance requirements. However, predicting critical process variables—such as maximum load and stress triaxiality—through Finite Element Method (FEM) simulations, like those performed using QForm UK, involves high computational costs and limited generalization to new alloys. To address these challenges, this study proposes the use of machine learning algorithms as an alternative to predict such variables from the chemical composition of metallic alloys. Simulations were carried out using aluminum (Al), copper (Cu), nickel (Ni), and stainless steel (Fe) alloys under fixed process conditions. The extracted outputs were maximum load and maximum triaxiality, while the input variables were physicochemical descriptors derived from the chemical compositions, such as atomic mass, atomic radius, and electronegativity. These features were used to train three supervised regression models: Support Vector Regression (SVR), Random Forest (RF), and Gradient Boosting Regressor (GBR). The models' hyperparameters were automatically optimized using the Optuna library, which applies a Bayesian search strategy more efficient than traditional methods like grid search. The GBR model achieved the lowest Root Mean Square Error (RMSE) in predicting load, particularly for copper alloys, although it struggled more with nickel and aluminum. For triaxiality, all models showed limited performance, with errors comparable to the variable's natural variability. The results confirm the feasibility of integrating FEM simulations with artificial intelligence for load prediction in extrusion processes, while also highlighting the challenges in modeling stress triaxiality.

Keyword: Machine learning. Finite elements. Metal extrusion. Triaxiality. QForm.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Extrusão direta (superior), extrusão indireta (inferior) (Adaptado de [(SILVA, 2013 [36])])	14
Figura 2 - Visualização da malha de elementos finitos e da distribuição de tensão efetiva em uma simulação de extrusão no QForm UK. (imagem obtida via software Qform).....	18
Figura 3 – Curva genérica de carga em função do deslocamento em um processo de extrusão direta.....	20
Figura 4 - Esquemática-gráfica do funcionamento do algoritmo Support Vector Regression (SVR). Os pontos em preto representam os dados de treinamento, enquanto o hiperplano (linha central) é ajustado de forma a maximizar a margem entre as duas linhas paralelas (em vermelho), dentro das quais os erros são tolerados. (Adaptado de (SPOT INTELLIGENCE, 2024) [38]).....	25
Figura 5 - Esquemática da técnica de Random Forest (Adaptada de (IBM, [s.d.])[25]).....	27
Figura 6 – Esquemática da técnica de Gradient Boosting Regressor (Adaptado de (HE et al., 2024)[17]).....	29
Figura 7 – Curva carga versus tempo genérica criada pelo software para obtenção da carga máxima (imagem obtida via software QForm) [23].	33
Figura 8 – Representação da obtenção dos valores de triaxialidade (imagem obtida via software QForm) [23].	34
Figura 9 – Gráfico comparativo entre a carga máxima real e prevista para o modelo SVR com os dados de teste.	40
Figura 10 - Gráfico comparativo entre a triaxialidade máxima real e prevista para o modelo SVR com os dados de teste.	41
Figura 11 – Gráfico comparativo entre a carga máxima real e prevista para o modelo RF com os dados de teste.	42
Figura 12 - Gráfico comparativo entre a triaxialidade máxima real e prevista para o modelo RF com os dados de teste.	43
Figura 13 - Gráfico comparativo entre a carga máxima real e prevista para o modelo GBR com os dados de teste.	44
Figura 14 - Gráfico comparativo entre a triaxialidade máxima real e prevista para o modelo GBR com os dados de teste.	45
Figura 15 – Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Al por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.	46
Figura 16 – Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Cu por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.	46
Figura 17 - Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Fe por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.	47
Figura 18 - Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Ni por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.	47

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Resumo com as principais diferenças dos hiperparâmetros do <i>Support Vector Regression</i>	26
Tabela 2 – Resumo com as principais diferenças dos hiperparâmetros do <i>Random Forest</i>	28
Tabela 3 – Resumo com as principais diferenças dos hiperparâmetros do <i>Gradient Boosting Regressor</i>	30
Tabela 4 - Tabela comparativa dos principais algoritmos utilizado neste trabalho.	31
Tabela 5 – Principais hiperparâmetros utilizados para o modelo SVR.....	36
Tabela 6 – Principais hiperparâmetros utilizados para o modelo RF.....	37
Tabela 7 - Principais hiperparâmetros utilizados para o modelo GBR.....	37
Tabela 8 – Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo SVR no processo de predição da carga máxima.....	39
Tabela 9 - Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo SVR no processo de predição da triaxialidade máxima.....	40
Tabela 10: Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo RF no processo de predição da carga máxima.....	41
Tabela 11- Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo RF no processo de predição da triaxialidade máxima.....	42
Tabela 12 - Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo GBR no processo de predição da carga máxima.....	43
Tabela 13 – Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo GBR no processo de predição da triaxialidade máxima.....	44
Tabela 14 – Resultados da extrapolação por elemento químico do modelo GBR.....	47
Tabela 15 - Hiperparâmetros otimizados para cada extrapolação com GBR.....	48

LISTA DE ABREVIATURAS

Al	Alumínio
Co	Cobalto
Cr	Cromo
Fe	Ferro
IA	Inteligência Artificial
ML	<i>Machine Learning</i>
Mn	Manganês
Ni	Níquel
SVM	<i>Support Vector Machine</i>
T	Temperatura
GB	<i>Gradient Boosting</i>
GBR	<i>Gradient Boosting Regressor</i>
RF	<i>Random Forest</i>
RFR	<i>Random Forest Regressor</i>
SV	<i>Support Vector</i>
SVR	<i>Support Vector Regressor</i>
MAD	<i>Mean Absolute Deviation</i>
VEC	Concentração média de elétrons de valência
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i>
SS	<i>Stress Shielding</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

ε	Deformação plástica
$\dot{\varepsilon}$	Taxa de deformação
T	Temperatura
σ_m	Tensão média
σ_s	Tensão equivalente de von Mises
t_{max}	Tempo total de deformação considerado,
C_{val}	Contante de calibração experimental
dt	Intervalo infinitesimal de tempo

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	12
2 REVISÃO DE LITERATURA	13
2.1 Conformação mecânica e processo de extrusão em materiais metálicos	13
2.1.1 Tipo de extrusão (Direta ou Indireta):.....	14
2.1.2 Razão de extrusão (<i>Extrusion Ratio</i>)	14
2.1.3 Temperatura de extrusão	15
2.1.4 Velocidade de extrusão (ou taxa de deformação)	15
2.1.5 Condições de atrito.....	15
2.2 Equação Constitutiva:.....	15
2.2.1 Obtenção das equações constitutivas	16
2.3 Método dos elementos finitos (MEF) na simulação de processos termomecânicos	17
2.2.1 QForm UK.....	18
2.4 Aplicações de inteligência artificial na previsão de variáveis de processos termomecânicos	21
2.4.1. Conceitos fundamentais de <i>machine learning</i>	22
3 MATERIAIS E MÉTODOS	32
3.1 Criação da Base de Dados.....	32
3.1.1 Obtenção dos dados brutos via QForm	32
3.1.2 Parâmetros fixos das simulações	34
3.2 Aprimoramento da base de dados	35
3.2.1 Construção da planilha.....	35
3.2.2 Conversão da composição química em descritores	35
3.2.3 Refinamento dos hiperparâmetros e treinamento do modelo	36
3.2.3 Extrapolação do modelo.....	37
4 RESULTADOS	39
4.1 Otimização dos hiperparâmetros com Optuna e treinamento do modelo.....	39
4.1.1 Modelo <i>Support Vector Regression</i> (SVR)	39
4.1.2 Modelo <i>Random Forest</i> (RF)	41
4.1.3 Modelo <i>Gradient Boosting Regressor</i> (GBR).....	43
4.2 Avaliação do Modelo em Situação de Extrapolação	45
4.2.1 Extrapolação por Elemento Químico.....	45
4.2.2 Hiperparâmetros Otimizados por Caso de Extrapolação	48
5 DISCUSSÕES	49
5.1 Comparativo de Desempenho	49

5.1.3 Indicadores relativos (RMSE/Média e RMSE/Desvio Padrão).....	52
6 CONCLUSÕES.....	53
7.REFERÊNCIAS	55

1 INTRODUÇÃO

Os processos de conformação plástica, como a extrusão, desempenham papel estratégico na indústria metalúrgica, por possibilitarem a fabricação de peças com geometrias complexas, alta integridade estrutural e excelente desempenho mecânico [1]. No entanto, prever com precisão o comportamento do material durante esses processos representa um desafio técnico, devido à interação entre variáveis termomecânicas, propriedades da liga e condições de contorno do processo [2].

Nesse contexto, o Método dos Elementos Finitos (MEF) tem se consolidado como uma técnica fundamental para simulações numéricas de processos de conformação, permitindo a modelagem precisa de tensões, deformações e variáveis tribológicas [3]. Softwares como o QForm UK ®, especializados na simulação tridimensional de conformação, viabilizam a análise detalhada de processos industriais sob diferentes condições.

Entretanto, apesar de sua precisão, esses métodos possuem limitações importantes, como alto custo computacional, necessidade de conhecimento especializado e baixa adaptabilidade para análise de novos materiais ou condições de processo [4].

Nesse contexto, os avanços recentes em inteligência artificial, em especial na área Machine Learning, têm se mostrado promissores ao oferecer alternativas mais ágeis e adaptativas para previsão de variáveis de interesse. Modelos baseados em dados são capazes de identificar padrões ocultos e realizar previsões a partir de variáveis de entrada acessíveis, como composição química, com menor custo computacional e maior capacidade de generalização [5]. A combinação entre dados gerados por simulação numérica e algoritmos de aprendizado supervisionado podem oferecer soluções eficientes para a previsão de variáveis em processos de conformação metálica.

Portanto, o presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de modelos preditivos baseados em Machine Learning capazes de estimar, a partir da composição química de ligas metálicas, duas variáveis críticas do processo de extrusão simuladas por elementos finitos, sendo a carga máxima e triaxialidade máxima.

2 REVISÃO DE LITERATURA

A presente seção apresenta os fundamentos teóricos e os avanços recentes relacionados à aplicação de inteligência artificial na previsão de variáveis em processos termomecânicos por meio de simulações numéricas baseadas no método dos elementos finitos. Para tanto, são abordados aspectos fundamentais do processo de extrusão, o funcionamento e a aplicabilidade do método dos elementos finitos, especialmente por meio do software QForm ® UK, bem como os principais algoritmos de aprendizado de máquina empregados na modelagem preditiva desses processos, com destaque para o *Support Vector Regression (SVR)*, *Random Forest (RF)* e *Gradient Boosting (GB)*. Esta revisão busca fundamentar a escolha metodológica adotada no desenvolvimento do trabalho, contextualizando a relevância e o estado da arte nas áreas envolvidas.

2.1 Conformação mecânica e processo de extrusão em materiais metálicos

A extrusão é um processo de conformação mecânica utilizado na indústria para a fabricação de perfis metálicos com seções transversais. O método consiste na deformação plástica de um corpo metálico, geralmente na forma de lingote ou tarugo, que é forçando a escoar através de uma matriz com geometria definida, determinando a forma final do produto extrudado [6].

A extrusão pode ser classificada, principalmente, em dois tipos: extrusão direta e extrusão indireta. A extrusão direta é indicada pela imagem superior da Figura 1. Nesse processo, o material é adicionado dentro de um contêiner e um pistão força o material contra uma matriz estática, que possui um orifício de entrada com secção transversal menor que a secção transversal do material. Já a extrusão indireta é indicada pela imagem inferior da Figura 1. A grande diferença desse processo para o descrito anteriormente, é que nesse caso, a matriz se move e é forçada contra o material. Ou seja, a diferença entre ambos os processos está relacionada ao movimento ou não do contêiner/matriz.

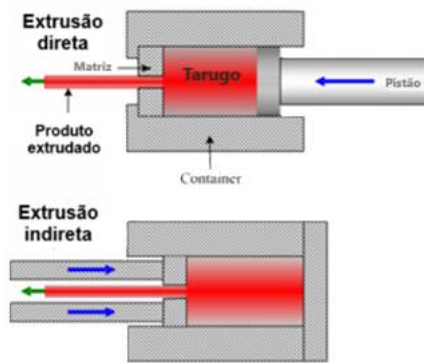


Figura 1 - Extrusão direta (superior), extrusão indireta (inferior) (Adaptado de [(SILVA, 2013 [36])])

Desta forma essa diferença na movimentação acarreta grandes diferenças de condições de processamento para os dois tipos de extrusão. Na extrusão direta, o contêiner/material que se movimenta em relação à matriz, na qual um atrito é gerado entre material e as paredes internas. Por outro lado, como no processo de extrusão indireta não há essa movimentação do material, o atrito entre material/contêiner é mínimo. Conseqüentemente, as cargas aplicadas em um processo de extrusão direta devem ser maiores que para um processo indireto. Para o desenvolvimento deste trabalho, foi utilizado a extrusão direta.

De uma maneira geral, há 5 parâmetros que afetam a extrusão, que são: tipo de extrusão (direta ou indireta), razão de extrusão, temperatura de extrusão, taxa de deformação/velocidade e condições de atrito.

2.1.1 Tipo de extrusão (Direta ou Indireta):

O tipo de extrusão afeta diretamente a intensidade da força necessária para o processo. Na extrusão direta, o atrito entre o material e o contêiner é considerável, o que aumenta a tensão de extrusão. Por outro lado, na extrusão indireta, ao minimizar o atrito entre o material e as superfícies do contêiner, a carga requerida é reduzida. Em algumas situações, a tensão de extrusão na extrusão indireta pode ser até 25% menor do que na extrusão direta, dependendo do material e das condições operacionais [6].

2.1.2 Razão de extrusão (*Extrusion Ratio*)

A razão de extrusão é definida como a razão entre a área da seção transversal inicial e a final. Quanto maior a razão de extrusão, maior será a deformação imposta

ao material e, conseqüentemente, maior a força exigida para sua conformação, tendo uma relação logarítmica entre a razão de extrusão e a tensão aplicada, com aumento progressivo da tensão à medida que a razão se eleva [7].

2.1.3 Temperatura de extrusão

A temperatura influencia diretamente a tensão de escoamento do material. À medida que a temperatura aumenta, a ductilidade do material se eleva, pois mecanismos de amaciamento são ativados, de forma que sua tensão ao escoamento diminui, facilitando a extrusão. Entretanto, temperaturas excessivas podem causar oxidação e perda de propriedades mecânicas. Dessa forma, é essencial encontrar um equilíbrio térmico que reduza a tensão sem comprometer a qualidade do produto [8].

2.1.4 Velocidade de extrusão (ou taxa de deformação)

A velocidade com que o material é forçado através da matriz também afeta a carga de extrusão. Velocidades mais altas tendem a aumentar a resistência ao escoamento devido à taxa de deformação elevada, além de elevar a temperatura por efeitos adiabáticos. Existe um ponto ótimo onde a velocidade é suficiente para maximizar a produtividade sem induzir defeitos como trincas ou sobreaquecimento localizado.

2.1.5 Condições de atrito

O atrito entre o material e o contêiner ou a matriz influencia significativamente a tensão de extrusão. Altos níveis de atrito aumentam a resistência ao movimento do material, exigindo forças maiores. O uso de lubrificantes adequados pode reduzir a tensão e melhorar a qualidade superficial do produto extrudado. A adoção de sistemas de lubrificação controlada pode reduzir a tensão de extrusão em até 30%, além de prolongar a vida útil da matriz.

2.2 Equação Constitutiva:

As equações constitutivas são expressões matemáticas que descrevem o comportamento de materiais sob diferentes condições de carregamento mecânico e térmico. Elas estabelecem a relação entre grandezas como tensão, deformação, taxa de deformação e temperatura, sendo fundamentais para prever a resposta dos materiais durante processos de conformação mecânica, especialmente em contextos

termomecânicos, como a extrusão, laminação e forjamento [6].

Essas equações são amplamente utilizadas em simulações numéricas como o Método dos Elementos Finitos (MEF), permitindo modelar com precisão o comportamento dos materiais ao longo do processo de fabricação. A qualidade dessas simulações depende da fidelidade das equações constitutivas adotadas, que podem ser obtidas experimentalmente, empiricamente ou teoricamente.

2.2.1 Obtenção das equações constitutivas

As equações constitutivas podem ser obtidas de três formas principais e a escolha do modelo depende da complexidade do material e das exigências do processo. Modelos simples podem ser aplicáveis a materiais de comportamento previsível, enquanto materiais com respostas não lineares exigem modelos mais elaborados [6].

- Experimentalmente: Por meio de ensaios mecânicos (compressão, tração, torção) realizados em diferentes condições de temperatura e taxa de deformação.
- Empiricamente: Com ajuste matemático de dados experimentais.
- Teoricamente: Com base em modelos físicos que descrevem os mecanismos internos de deformação e transformação microestrutural.

No presente trabalho, as curvas de tensão de escoamento foram extraídas diretamente das simulações realizadas no *software* QForm UK, que utilizam diferentes modelos constitutivos para representar o comportamento termomecânicos das ligas metálicas, essas equações constitutivas já estão embutidas em cada material simulado. Desta forma, foram utilizados os valores de tensão de escoamento obtidos a partir de simulações realizadas sob diferentes condições termomecânicas, variando temperatura, taxa de deformação e níveis de deformação verdadeira

Como um exemplo para algumas ligas de alumínio é comum a adoção do modelo de Johnson-Cook, que considera os efeitos combinados da deformação plástica, taxa de deformação e temperatura sobre a tensão de escoamento. Esse modelo é utilizado por sua simplicidade e capacidade de capturar o comportamento não linear em processos de conformação a quente [9].

A equação representa a expressão do modelo de johnson-cook.

$$\sigma = [a + B \cdot \varepsilon^n] \cdot [1 + C \cdot \ln(\varepsilon^*)] \cdot [1 - (T^*)^m]$$

Onde σ : tensão de escoamento (MPa); ϵ deformação ϵ^* plástica; taxa de deformação normalizada; T^* temperatura homologada (adimensional); A, B, C, n, m: constantes empíricas determinadas para cada material.

2.3 Método dos elementos finitos (MEF) na simulação de processos termomecânicos

O Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma técnica numérica amplamente utilizada na engenharia para a solução de problemas complexos envolvendo fenômenos físicos, como transferência de calor, escoamento de fluidos e, especialmente, mecânica dos sólidos [11]. No contexto deste trabalho, esse método tem papel fundamental na simulação de processos de conformação mecânica, como a extrusão, permitindo prever o comportamento do material e do ferramental antes da execução prática [10].

Esse método se baseia na subdivisão do domínio em pequenos elementos finitos, facilitando a modelagem de geometrias complexas e propriedades variadas. Essa discretização é fundamental para a construção do sistema global que representa o problema físico, onde as funções de forma são usadas para aproximar a solução dentro de cada elemento [10].

Após a montagem do sistema, as condições de contorno são aplicadas para garantir uma solução única e física. Em seguida, esse sistema é resolvido por métodos numéricos apropriados, que podem variar de técnicas diretas, como a eliminação de Gauss, a métodos iterativos, especialmente em problemas de grandes dimensões [10].

Nos processos de conformação plástica de metais, o MEF se mostra particularmente eficaz, pois permite a análise acoplada dos efeitos térmicos (como o aquecimento por deformação e transferência de calor entre peça e ferramenta), mecânicos (tensões e deformações plásticas), e tribológicos (interações de contato e atrito). Softwares comerciais especializados, como QForm ® UK, DEFORM ®, Simufact Forming ®, e Forge ®, implementam rotinas de MEF otimizadas para esse tipo de aplicação, incluindo modelos constitutivos, condições de contorno específicas, e malhas adaptativas que acompanham a deformação dos materiais.

A Figura 2 ilustra um exemplo de aplicação do MEF no software QForm UK, utilizado no presente trabalho, em que é possível visualizar tanto a malha de

elementos finitos, composta por elementos triangulares, quanto a distribuição da tensão efetiva durante o processo de extrusão. A coloração do corpo simulado representa a variação da intensidade das tensões ao longo da deformação, sendo as regiões em laranja e vermelho indicativas de concentrações mais elevadas de tensão mecânica. A sobreposição da malha com o campo de tensões demonstra a forma como o método permite acompanhar detalhadamente o comportamento mecânico do material ao longo do processo.

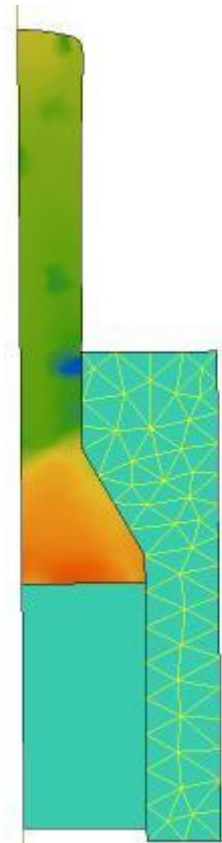


Figura 2 - Visualização da malha de elementos finitos e da distribuição de tensão efetiva em uma simulação de extrusão no QForm UK. (imagem obtida via software Qform).

2.2.1 QForm UK

O software QForm UK é uma ferramenta especializada na simulação de processos de conformação, como forjamento e extrusão, utilizando o MEF. Ele emprega uma formulação lagrangeana atualizada e integração implícita, que proporciona maior estabilidade e precisão em simulações com grandes deformações, especialmente em regime plástico [2,11]. Para aprimorar a acurácia das simulações, utiliza elementos finitos triangulares de seis nós com lados curvos, bem como malhas tridimensionais com refinamento automático em regiões com elevada complexidade geométrica ou alta concentração de tensões [23].

Desenvolvido com foco em processos de deformação plástica, o QForm UK é capaz de modelar tanto condições isotérmicas quanto termomecânicas complexas, incluindo efeitos de atrito, contato e acoplamento térmico [6]. Ele permite a utilização de malhas tridimensionais, com refinamento automático em regiões de alta complexidade geométrica ou alta concentração de tensões, além de permitir a implementação de diferentes modelos de atrito, como o de Coulomb, Siebel e o modelo de Levanov, este último utilizado no presente trabalho por sua capacidade de interpolar entre zonas de deslizamento e aderência, oferecendo previsões mais realistas sobre o comportamento do material em contato com o ferramental [23].

A utilização do software no presente trabalho, foi essencial para a construção da base de dados, sendo utilizado para simular diferentes ligas metálicas, incluindo alumínio, cobre, níquel e aço inoxidável, com o objetivo de garantir diversidade composicional e estrutural. A partir das simulações, foram extraídos a composição química das ligas, a carga máxima durante o processo de extrusão e o valor máximo da triaxialidade.

2.2.1.1 Tensão

A tensão máxima de escoamento uma variável relevante para a caracterização do comportamento mecânico de materiais metálicos durante a deformação plástica. Ela representa a menor tensão necessária para iniciar o escoamento permanente do material, ou seja, o ponto em que a deformação deixa de ser elástica e passa a ser plástica, com deformações irreversíveis [1].

Nas simulações realizadas com o QForm UK, a tensão de escoamento é calculada com base em critérios de von Mises, que é adequada para materiais dúcteis e amplamente utilizada para prever o início do escoamento em condições multiaxiais de tensão [2]. Essa formulação considera que o material entra em regime plástico quando a energia de distorção atinge um valor crítico, permitindo uma avaliação precisa do esforço necessário para conformar o material.

Quanto maior a tensão de escoamento, maior é a carga que deve ser aplicada pelo equipamento para deformar o metal através da matriz de extrusão. Materiais com alta tensão de escoamento demandam maior trabalho mecânico, o que pode elevar os custos operacionais, aumentar o desgaste do ferramental e, conseqüentemente, reduzir a vida útil dos equipamentos.

Além disso, tensões elevadas podem causar instabilidade no escoamento do material, favorecendo a formação de defeitos como trincas e fissuras, comprometendo a qualidade da peça final e a segurança do processo [1]. Por isso, o monitoramento e a análise da tensão de escoamento durante a simulação são essenciais para a otimização do processo e a prevenção de falhas.

O gráfico apresentado a seguir representa uma curva genérica de carga em função do deslocamento, típica de processos de extrusão. Observa-se que o ponto de carga máxima está relacionado ao início do escoamento plástico do material, representando a tensão máxima de escoamento.

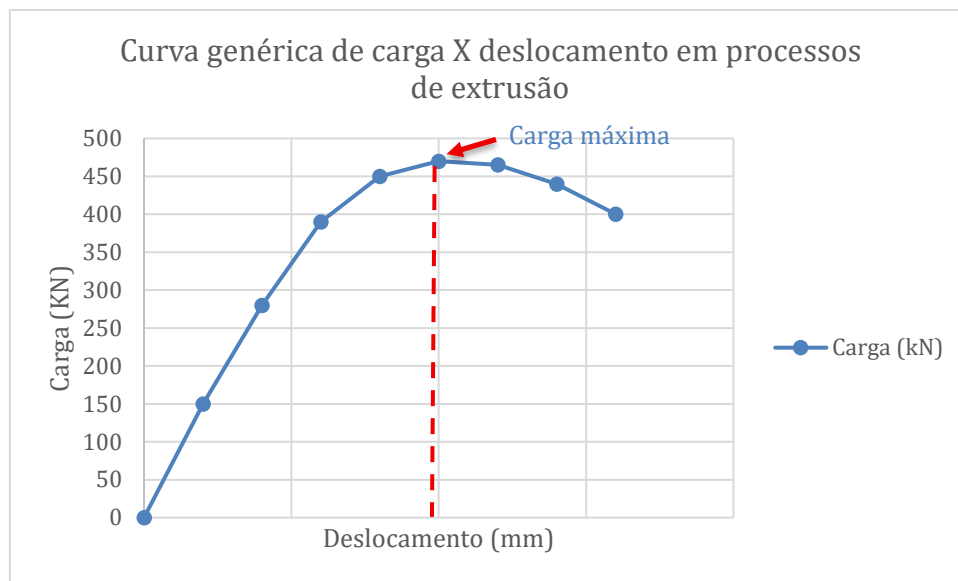


Figura 3 – Curva genérica de carga em função do deslocamento em um processo de extrusão direta.

2.2.1.2 Triaxialidade:

A triaxialidade das tensões é uma grandeza adimensional que quantifica a razão entre a tensão hidrostática média e a tensão equivalente de von Mises. Essa relação é exposta pela Equação 1:

$$n = \frac{\sigma_{méd}}{\sigma_{eq}} \quad (1)$$

Onde $\sigma_{méd} = \frac{\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z}{3}$, e representa a tensão média no material;

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_x)^2]}$$

sendo a tensão equivalente de von Mises, que reflete a intensidade das tensões para materiais dúcteis.

Quando n for igual a zero significa que o material está em um estado de tensão plana (sem triaxialidade); já para n maior que zero o material está em triaxialidade

positiva, o que indica uma tendência ao crescimento de vazios, muitas vezes associado à ruptura e para n menor que zero material está em anti-triaxialidade, com predominância de tensões compressivas.

A triaxialidade é um parâmetro crucial na análise de danos por fratura dúctil, pois influencia fortemente a formação de cavidades, iniciação de trincas e falhas por fratura em materiais metálicos submetidos à deformação plástica [12,13]. Valores elevados de triaxialidade (acima de 1/3) estão associados à concentração de tensões trativas, o que favorece a nucleação e crescimento de vazios, mecanismos que antecedem a ruptura do material.

Diversos critérios de falha baseados em dano, como os modelos de Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) e Rice–Tracey, incorporam a triaxialidade como variável central para prever o momento e o local da falha durante o processo de conformação. Por isso, esse parâmetro é amplamente utilizado em simulações computacionais para avaliar a integridade estrutural da peça conformada [14].

Nas simulações realizadas com o software QForm UK, a previsão de falha do material foi baseada no critério de falha de Ayada, proposto por Masaru Ayada, que considera que a fratura ocorre quando a triaxialidade acumulada durante a deformação atinge um valor crítico. Esse critério matemático é descrito pela Equação 2:

$$D = \frac{1}{C_{val}} \int_0^{t_{max}} \frac{\sigma_m}{\sigma_s} \cdot \varepsilon \cdot dt < 1 \quad (2)$$

Onde σ_m é a tensão média, σ_s é a tensão equivalente de von Mises, dt é o intervalo infinitesimal de tempo, t_{max} é o tempo total de deformação considerado, C_{val} é a contante de calibração experimental que normaliza o modelo de dano para que $D < 1$ indique ruptura e ε é a taxa de deformação efetiva.

A triaxialidade, nesse contexto, atua como um indicador do estado tensional local: valores altos positivos de triaxialidade sugerem tendência à formação de trincas e vazios, enquanto valores negativos indicam predominância de compressão hidrostática.

2.4 Aplicações de inteligência artificial na previsão de variáveis de processos termomecânicos

A Inteligência Artificial (IA) é um campo da ciência da computação que busca criar sistemas capazes de realizar tarefas que, normalmente, exigiram inteligência

humana, como reconhecimento de fala, tomada de decisão, e aprendizado. O avanço das técnicas de IA nas últimas décadas proporcionou uma transformação na forma como dados complexos são analisados em diversas áreas da engenharia. Dentro desse contexto, o *Machine Learning* (ML), ou aprendizado de máquina, tornou-se uma ferramenta indispensável para a construção de modelos preditivos baseados em dados, especialmente em cenários nos quais os mecanismos físicos são altamente não lineares ou parcialmente desconhecidos [15].

2.4.1. Conceitos fundamentais de *machine learning*

Machine Learning é um subcampo da Inteligência Artificial que permite que computadores “aprendam” padrões a partir de dados, sem serem explicitamente programados para executar uma tarefa específica [5]. O objetivo central é desenvolver modelos capazes de fazer previsões ou decisões com base em dados de entrada, melhorando seu desempenho à medida que são expostos a novos exemplos, essa técnica tem se consolidado como na ciência dos materiais, acelerando o desenvolvimento de novos materiais e a previsão de suas propriedades com alta acurácia. O aprendizado supervisionado, em particular, tem sido aplicado para prever propriedades mecânicas, térmicas e químicas de ligas metálicas e compósitos, por meio da análise de descritores físicos e químicos extraídos experimentalmente ou computacionalmente.

As técnicas de ML são classificadas em três tipos principais, conforme o tipo de supervisão durante o treinamento, sendo elas aprendizagem supervisionada, aprendizagem não-supervisionada e aprendizagem por reforço[5,17].

- **Aprendizado supervisionado:** O modelo é treinado com dados rotulados (entrada e saída conhecidas), buscando prever ou classificar novos dados;
- **Aprendizado não supervisionado:** O modelo identifica padrões ou agrupamentos sem conhecimento prévio das saídas;
- **Aprendizado por reforço:** Baseado em interações com um ambiente, no qual o modelo recebe recompensas ou punições conforme suas ações.

O processo de treinamento de um modelo de ML envolve uma série de etapas sequenciais e interdependentes que visam garantir a construção de algoritmos preditivos eficazes e generalizáveis. Segundo Janiesch, Zschech e Heinrich, [5] o processo pode ser dividido em pelo menos dez etapas principais, que vão desde a

concepção do problema até o monitoramento contínuo do modelo. Essas etapas são descritas a seguir:

- 1- Definição do problema:** Consiste em compreender e delimitar claramente a tarefa a ser solucionada pelo modelo, classificando-a como regressão, classificação, agrupamento, entre outras. Essa definição influencia diretamente as escolhas subseqüentes, como a seleção do algoritmo e as métricas de avaliação.
- 2- Coleta e integração de dados:** A coleta de dados pode ser realizada por meio de sensores industriais, simulações numéricas (como o uso do QForm), bases de dados públicas ou registros históricos. A qualidade e representatividade dos dados são determinantes para o desempenho do modelo.
- 3- Pré-processamento dos dados:** Nesta etapa, os dados são organizados, tratados e transformados para remover inconsistências, normalizar escalas, codificar variáveis categóricas e lidar com dados ausentes. A limpeza e padronização garantem que o modelo receba entradas coerentes.
- 4- Seleção de atributos (*Features*):** Nem todas as variáveis disponíveis são relevantes para o modelo. Assim, realiza-se a seleção de atributos com base em técnicas estatísticas, heurísticas ou automatizadas, como PCA (Análise de Componentes Principais), correlação, ou algoritmos como RFE (*Recursive Feature Elimination*).
- 5- Escolha do algoritmo:** A escolha do modelo depende da natureza do problema e da estrutura dos dados. Modelos supervisionados como Regressão Linear, SVM (*Support Vector Machine*) e *Random Forest* (RF) são comuns, bem como métodos não supervisionados como *K-Means* e DBSCAN.
- 6- Treinamento do modelo:** Com os dados preparados, o modelo é treinado com um subconjunto (conjunto de treinamento), ajustando seus parâmetros internos para minimizar uma função de erro ou maximizar a acurácia da predição.
- 7- Validação e ajuste de hiperparâmetros:** Os hiperparâmetros, que não são aprendidos diretamente durante o treinamento, como profundidade de árvores ou taxa de aprendizado, são ajustados com técnicas como *Grid*

Search, *Random Search* ou algoritmos como *Optuna*.

- 8- Avaliação final:** Após o ajuste, o modelo é testado com dados que ele nunca viu antes (conjunto de teste). Métricas como precisão, *recall*, *F1-score* (para classificação) e R^2 (para regressão) são aplicadas para medir sua eficácia.
- 9- Implementação (*Deploy*):** A etapa de *deploy* consiste em integrar o modelo a um sistema operacional ou ambiente de produção. Isso pode incluir sua incorporação em sistemas de controle industrial, *dashboards* analíticos ou APIs.
- 10-Monitoramento e re-treinamento:** Com o tempo, os dados de entrada podem mudar, fenômeno conhecido como *data drift* ou *concept drift*. Assim, é essencial monitorar a performance do modelo e reprocessar o treinamento com novos dados quando necessário.

No presente estudo, foi utilizado aprendizado supervisionado para construir modelos que pudessem prever variáveis de saída (como carga e triaxialidade máxima) a partir de descritores extraídos das composições químicas das ligas metálicas e o uso dos modelos: *Support Vector Regression* e (SVR), *Random Forest* (RF) e *Gradient Boosting Regressor* (GBR) e ajustados com a biblioteca *Optuna* que são detalhados nos tópicos a seguir.

2.3.1.3 *Support Vector Regression* (SVR)

O *Support Vector Machine* (SVM) é um algoritmo de aprendizado supervisionado amplamente utilizado tanto para classificação quanto para regressão, sendo neste último caso denominado *Support Vector Regressor* (SVR). Inicialmente desenvolvido por Vladimir Vapnik, o SVM se baseia em princípios matemáticos robustos de maximização de margem e otimização convexa, buscando identificar o hiperplano ótimo que melhor separa os dados no espaço de características [16].

O principal objetivo do SVM é encontrar o hiperplano que separe as classes com a maior margem possível, o que aumenta a capacidade de generalização do modelo, isto é, sua habilidade de classificar corretamente novos dados. Quando aplicado à regressão (SVR), o objetivo passa a ser encontrar uma função que se ajuste aos dados dentro de uma margem de tolerância ϵ (epsilon), onde os erros menores que ϵ (epsilon) não são penalizados, permitindo robustez a ruídos e outliers, (dados atípicos que se desviam significativamente do padrão observado e que, se

não tratados, podem distorcer a aprendizagem do modelo) [16].

A fronteira de decisão desses algoritmos é determinada com base em um subconjunto específico dos dados de treinamento chamado de vetores de suporte. Estes vetores são cruciais, pois influenciam diretamente a construção do modelo. A Figura 4 ilustra o funcionamento de um modelo SVR.

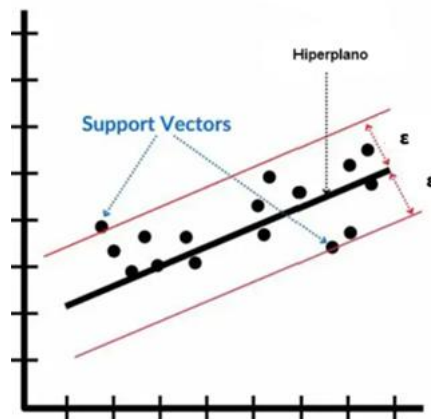


Figura 4 - Esquemática-gráfica do funcionamento do algoritmo *Support Vector Regression* (SVR). Os pontos em preto representam os dados de treinamento, enquanto o hiperplano (linha central) é ajustado de forma a maximizar a margem entre as duas linhas paralelas (em vermelho), dentro das quais os erros são tolerados. (Adaptado de (SPOT INTELLIGENCE, 2024) [38])

Os hiperparâmetros controlam o comportamento dos modelos de *machine learning* e são definidos antes do treinamento. A escolha correta desses valores influencia diretamente a performance do modelo. Os principais hiperparâmetros do modelo *Support Vector Regression* são:

- **Kernel:** Define a função que transforma os dados para um espaço dimensional superior onde eles possam ser separados ou ajustados linearmente. Os *kernels* mais comuns são:
 - *Linear:* modelo simples, boa escolha para dados lineares;
 - *RBF (Radial Basis Function):* transforma os dados para um espaço infinito dimensional, capaz de modelar relações altamente não lineares;
 - *Polynomial:* utiliza uma função polinomial, para captar relações não lineares específicas [18].
- **C (penalidade):** Controla o *trade-off* entre a suavidade da função e a tolerância a erros de treinamento. Valores altos de C forçam o modelo a penalizar mais

os erros, buscando ajustar os dados de forma mais rígida, podendo levar ao *overfitting*, fenômeno no qual o modelo se ajusta aos dados de treinamento, aprendendo não apenas os padrões reais, mas também os ruídos e flutuações aleatórias presentes nos dados. Valores baixos relaxam essa penalização, gerando modelos mais generalizados. [18]

- **ϵ (épsilon):** Define a margem dentro da qual os erros não são penalizados. Quanto maior o ϵ , mais tolerante o modelo é a desvios, o que pode aumentar a suavidade da função, mas reduzir a precisão [18].
- **Gamma (γ):** Específico para kernels não lineares, como RBF. Controla o alcance da influência de um único exemplo de treinamento. Valores pequenos implicam em influência ampla (função mais suave), valores grandes implicam em influência localizada, aumentando o risco de *overfitting* [18].

A Tabela 1 apresenta de forma resumida as principais funções, *ranges* e significado dos hiperparâmetros apresentados para o método SVR.

Tabela 1 – Resumo com as principais diferenças dos hiperparâmetros do *Support Vector Regression*

Hiperparâmetro	Função	Range	Interpretação
Kernel	Função que transforma os dados para um espaço de maior dimensão.	'rbf', 'linear', 'poly', 'sigmoid'	Rbf → relações não lineares, mais utilizado Linear → relações simples Poly → relação não linear mais específica
C	Penaliza erros fora da margem épsilon. Controla o trade-off entre erro de treinamento e generalização.	0,01 - 1000	Valores pequenos → modelo mais suave (menos <i>overfitting</i>); Valores grandes → tentam ajustar cada ponto (risco de <i>overfitting</i>)
Épsilon	Largura da margem de tolerância onde nenhum erro é penalizado.	0,001 – 1	Valores pequenos → exigem mais precisão (podem levar a <i>overfitting</i>), Valores maiores → ignoram mais o ruído.
Gamma	Controla a influência de cada ponto de dados no kernel.	'scale', 'auto'	scale (padrão) → equilibra sensibilidade em função da variância dos dados; auto → mais global

2.3.1.4 *Random Forest* (RF)

O *Random Forest* (RF) é um método de aprendizado supervisionado baseado em conjuntos de árvores de decisão (*decision trees*). Introduzido por Leo Breiman em 2001, ele se tornou amplamente utilizado devido à sua robustez, precisão e

capacidade de lidar com dados altamente dimensionais [16]. O modelo tem capacidade de capturar relações não lineares complexas, lidar bem com dados ruidosos e realizar a seleção de atributos implicitamente, indicando a importância de cada variável na previsão. Além disso, o RF é notavelmente eficaz mesmo com conjuntos de dados relativamente pequenos, desde que haja variabilidade suficiente nas características.

Em materiais, é utilizado para classificar fases ou prever propriedades mecânicas em função da composição química e microestrutura [16].

O método em si consiste em um conjunto (floresta) de árvores de decisão independentes, cada uma treinada com uma amostra aleatória (com reposição) do conjunto de dados de treinamento, técnica conhecida como *bootstrap aggregating* ou *bagging*. Durante o treinamento de cada árvore, apenas um subconjunto aleatório das variáveis é considerado em cada ponto de divisão (*split*), o que introduz diversidade entre as árvores e reduz o risco de *overfitting*.

No processo de predição, para classificação, cada árvore vota em uma classe, e a classe mais votada é escolhida como resultado. Para regressão, a média das saídas de todas as árvores é calculada. Essa abordagem melhora significativamente a estabilidade e a capacidade de generalização do modelo, superando limitações das árvores de decisão individuais que tendem a se ajustar excessivamente aos dados de treino. A Figura 5 representa uma esquemática do raciocínio por trás do RF.

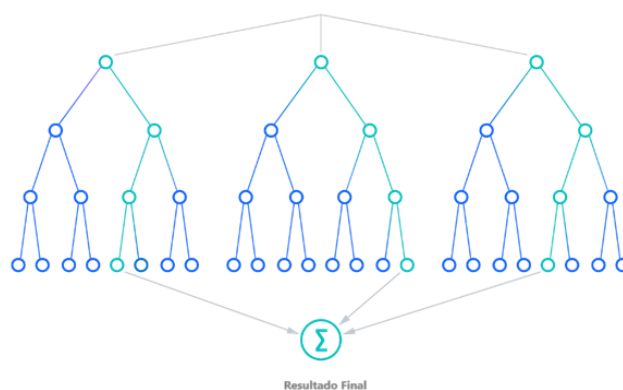


Figura 5 - Esquemática da técnica de *Random Forest* (Adaptada de (IBM, [s.d.])[25])

O desempenho do *Random Forest* depende de alguns hiperparâmetros principais, sendo eles:

- **n_estimators:** Número de árvores na floresta. Mais árvores normalmente melhoram a performance, porém aumentam o custo computacional e o tempo de treino.
- **max_depth:** Profundidade máxima permitida para cada árvore. Controlar a profundidade ajuda a prevenir que as árvores se tornem muito específicas (*overfitting*).
- **min_samples_split:** Número mínimo de amostras necessárias para dividir um nó. Aumentar esse valor força as árvores a serem mais simples e generalizarem melhor.
- **min_samples_leaf:** Número mínimo de amostras que um nó na folha deve conter. Também auxilia na prevenção de *overfitting*.
- **Max features:** Número máximo de características consideradas para divisão em cada nó. Reduzir esse número aumenta a diversidade das árvores, ajudando a melhorar a generalização do modelo.

A Tabela 2 apresenta de forma resumida as principais funções, *ranges* e significado dos hiperparâmetros apresentados para o método RF.

Tabela 2 – Resumo com as principais diferenças dos hiperparâmetros do *Random Forest*

Hiperparâmetro	Função	Range	Interpretação
n_estimators	Número de árvores na floresta.	10 – 300	Mais árvores tendem a aumentar a performance até certo ponto, mas aumentam o tempo de computação
max_depth	Profundidade máxima de cada árvore.	2 – 30	Limita o crescimento das árvores. Profundidades maiores podem levar a <i>overfitting</i>
min_samples_split	Mínimo de amostras para dividir um nó interno.	2 – 10	Aumentar esse valor faz as árvores mais conservadoras
min_samples_leaf	Mínimo de amostras exigidas em cada folha.	1 – 10	Previne folhas muito pequenas (<i>overfitting</i>)
max_features	Número máximo de features consideradas por divisão.	'auto', 'sqrt', 'log2'	Controla a diversidade entre as árvores

2.3.1.5 Gradient Boosting Regressor (GBR)

O *Gradient Boosting Regressor* (GBR) é uma técnica de aprendizado supervisionado baseada em *ensemble learning*, mais especificamente no método de *boosting*. Trata-se de uma abordagem que combina múltiplos modelos fracos, geralmente árvores de decisão rasas, para formar um modelo preditivo robusto e

altamente preciso, especialmente em problemas de regressão com relações não lineares complexas [16].

Diferentemente do *Random Forest*, onde as árvores são treinadas de forma paralela e independente, o *boosting* opera de forma sequencial, onde cada novo modelo é treinado para corrigir os erros do modelo anterior. O GBR aplica o gradiente descendente como mecanismo de otimização, ajustando iterativamente as previsões de modo a minimizar uma função de perda, geralmente o erro quadrático médio (MSE) em tarefas de regressão. Ou seja, o GBR aprende a prever os resíduos (erros) do modelo anterior e os adiciona ao modelo final. A soma de todos os aprendizados gradualmente melhora a capacidade preditiva da regressão. A Figura 6 apresenta um modelo do funcionamento do GBR.

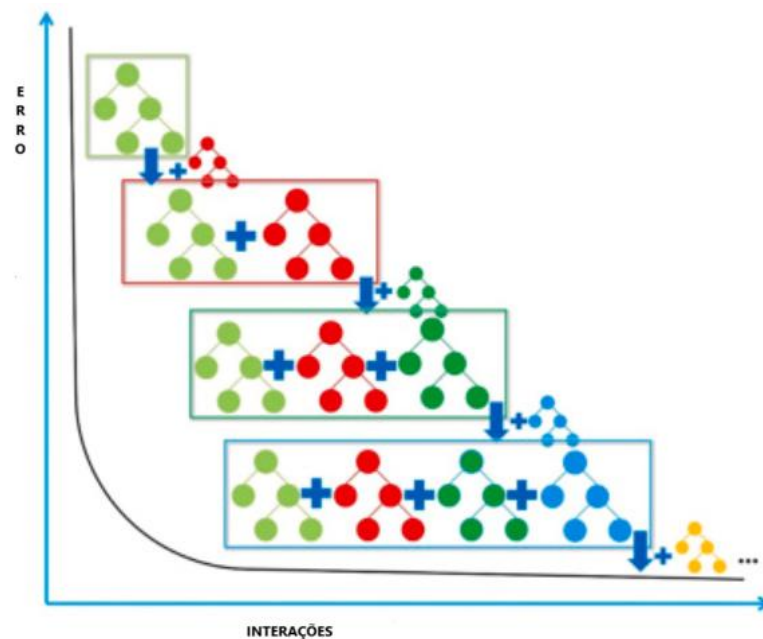


Figura 6 – Esquemática da técnica de *Gradient Boosting Regressor* (Adaptado de (HE et al., 2024)[17])

O GBR tem sido amplamente utilizado para capturar interações complexas entre variáveis; trabalhar com bases de dados reduzidas ou moderadamente ruidosas e lidar com dados heterogêneos e multivariados, comuns em processos termomecânicos e previsão de propriedades de ligas metálicas.

Estudos como os de He et al. (2024) [17], demonstram o uso bem-sucedido do GBR para prever propriedades mecânicas de ligas de alta entropia, estimar limites de resistência à tração e projetar ligas com base em bases de dados simuladas ou

experimentais.

O desempenho do GBR depende de diversos hiperparâmetros que devem ser cuidadosamente ajustados, sendo eles:

- **n_estimators:** Quantidade de árvores construídas sequencialmente. Mais árvores podem aumentar a capacidade de aprendizado, mas também podem levar a *overfitting* se não controlado.
- **learning_rate:** Fator que reduz o impacto de cada árvore adicionada. Valores menores tornam o aprendizado mais conservador, exigindo mais árvores, mas geralmente resultam em modelos mais robustos.
- **max_depth:** Profundidade máxima de cada árvore. Controla a complexidade dos modelos individuais, equilibrando viés e variância.
- **subsample:** Fração das amostras usadas para treinar cada árvore. Valores menores podem reduzir *overfitting* ao introduzir aleatoriedade no treinamento (também chamado de *stochastic gradient boosting*).
- **min_samples_split e min_samples_leaf:** Semelhante ao RF, também regulam a complexidade da árvore e ajudam a evitar *overfitting*.

A Tabela 6 apresenta de forma resumida as principais funções, *ranges* e significado dos hiperparâmetros apresentados para o método GBR.

Tabela 3 – Resumo com as principais diferenças dos hiperparâmetros do *Gradient Boosting Regressor*

Hiperparâmetro	Função	Range	Interpretação
n_estimators	Número de árvores a serem somadas.	50 – 300	Mais árvores aumentam capacidade, mas também risco de <i>overfitting</i> se não regular
learning_rate	Peso de cada árvore adicionada.	0,01 – 0,5	Taxas menores fazem o modelo aprender mais devagar, o que pode aumentar a precisão se compensado com mais árvores
max_depth	Profundidade máxima das árvores.	2 – 20	Árvores rasas capturam padrões gerais; profundas capturam detalhes (com risco de <i>overfitting</i>)
min_samples_split	Mínimo de amostras para dividir um nó.	2 – 10	Similar ao Random Forest. Evita que as árvores cresçam demais
min_samples_leaf	Mínimo de amostras em cada folha.	1 – 10	Garante que as folhas não fiquem superajustadas
Subsample	Fração dos dados usada em cada árvore.	0,5 – 1,0	Reduz o <i>overfitting</i> . 0.5 → mais regularização 1.0 → usar tudo
max_features	Máximo de features para cada divisão.	'auto', 'sqrt', 'log2'	Reduz correlação entre árvores

A análise dos três algoritmos, *Support Vector Regression* (SVR), *Random Forest* (RF) e *Gradient Boosting Regressor* (GBR), evidencia que cada modelo apresenta vantagens e limitações distintas, tornando sua escolha altamente dependente das características do problema em questão. Assim, a Tabela 4 sintetiza essas diferenças de forma objetiva.

Tabela 4 - Tabela comparativa dos principais algoritmos utilizado neste trabalho.

Característica	<i>Support Vector Regression</i>	<i>Random Forest</i>	<i>Gradient Boosting Regressor</i>
Tipo de Algoritmo	Modelo baseado em margens (máx. margem).	<i>Ensemble</i> de Árvores (<i>bagging</i>)	<i>Ensemble</i> sequencial (<i>boosting</i>)
Capacidade de lidar com não linearidade	Alta (com kernels)	Moderada	Alta
Tendência ao <i>overfitting</i>	Média (ajustada por C e kernel)	Baixa	Alta (se mal ajustado)
Facilidade de interpretação	Baixa	Média (importância de atributos)	Baixa
Tempo de treinamento	Moderado	Rápido (paralelizável)	Lento
Sensível a outliers	Baixa	Baixa	Alta
Requisitos de pré-processamento	Escalonamento é crucial	Pouco necessário	Recomendado (para estabilidade)
Melhor desempenho com dados	Dados com margem clara de separação	Bases com ruído e variáveis irrelevantes	Bases pequenas/médias com alta complexidade

2.3.1.5 Optuna

Os modelos foram otimizados por meio da biblioteca *Optuna*, especializada em ajuste de hiperparâmetros por métodos bayesianos, que são técnicas baseadas no Teorema de Bayes, que atualizam as estimativas de probabilidade à medida que novas evidências são observadas. Em otimização de hiperparâmetros, isso significa usar os resultados anteriores para prever quais combinações têm maior chance de funcionar bem, evitando tentativas aleatórias ou desnecessárias [21].

O *Optuna* ajusta os parâmetros de forma inteligente e sequencial, aprendendo com os testes anteriores em vez de depender de métodos exaustivos ou aleatórios. Ele permite explorar de maneira eficiente o espaço de configurações possíveis, reduzindo o número de experimentos necessários para alcançar modelos com alto desempenho. Sua arquitetura flexível facilita a integração com diferentes *frameworks* de *machine learning* e é especialmente eficaz em problemas com múltiplos parâmetros. A biblioteca foca em evitar combinações de hiperparâmetros que apresentaram baixo desempenho em experimentos anteriores, direcionando os testes subsequentes para regiões mais promissoras do espaço de busca. [21].

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Os materiais e métodos adotados neste projeto serão detalhados nos tópicos subsequentes, com ênfase nos procedimentos adotados e nas ferramentas empregadas. Vale ressaltar que a metodologia aplicada foi a mesma tanto para a determinação e previsão da carga máxima e da triaxialidade máxima, a exceção da extrapolação dos modelos, que foi aplicado somente para a carga máxima e os códigos empregados na metodologia tiveram o apoio da Ma. Caroline Binde Stoco.

3.1 Criação da Base de Dados

3.1.1 Obtenção dos dados brutos via QForm

Os dados utilizados neste trabalho foram obtidos por meio do QForm UK, um software de simulação numérica baseado no Método dos Elementos Finitos, que permitiu analisar de forma bidimensional o comportamento do material durante a deformação, considerando efeitos térmicos, mecânicos e tribológicos.

A simulação adotada foi definida com geometria simétrica 2D, representando uma extrusão direta com redução simples de diâmetro, a geometria adotada consistiu em um tarugo cilíndrico com diâmetro inicial de 50 mm e um diâmetro final de 25,33 mm, resultando em uma razão de extrusão de aproximadamente 3,90. A Matriz foi modelada com um ângulo de 30° e as simulações foram executadas a partir de diferentes ligas metálicas, com uma seleção de 85 ligas metálicas, sendo 22 ligas de alumínio, 14 de cobre, 22 de níquel e 27 ligas de aço inoxidável, materiais usualmente empregados em processos de extrusão, capazes de fornecer uma diversidade composicional e estrutural à base de dados construída. Além disso os parâmetros fixos, estão detalhados no tópico 3.1.2.

A partir da escolha do material, foram extraídos dados diretamente do QForm UK, como composição química das ligas; carga máxima durante a extrusão e triaxialidade máxima.

3.1.1.1 Carga:

A Figura 9 mostra um exemplo genérico de como foi obtido a carga máxima para os diferentes sistemas. Neste caso, girou em torno de aproximadamente 1,6 MN.

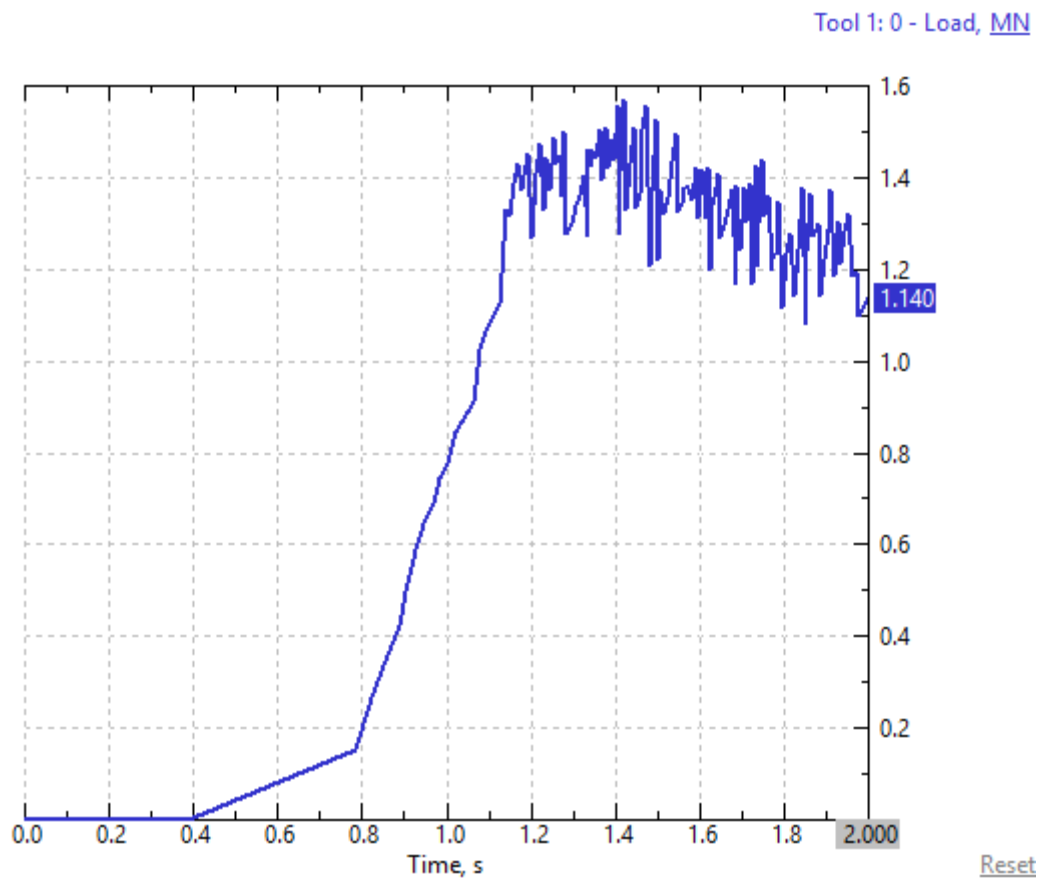


Figura 7 – Curva carga *versus* tempo genérica criada pelo software para obtenção da carga máxima (imagem obtida via software QForm) [23].

3.1.1.2 Triaxialidade:

A triaxialidade calculada pelo Software QForm segue a equação 1.

A Figura 8 ilustra um exemplo do processo de obtenção dos valores de máximo da triaxialidade para o processo.

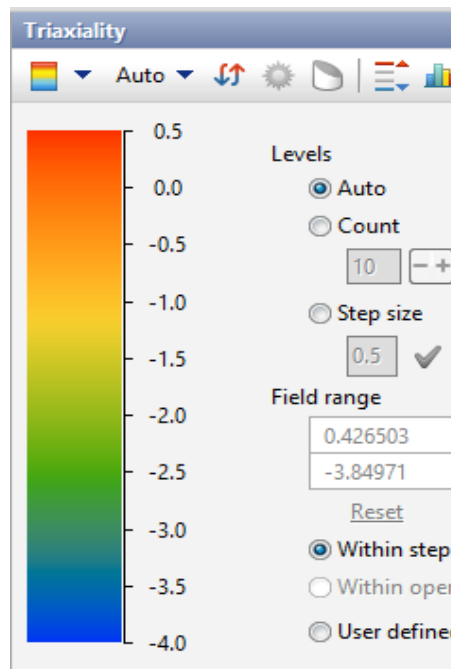


Figura 8 – Representação da obtenção dos valores de triaxialidade (imagem obtida via software QForm) [23].

3.1.2 Parâmetros fixos das simulações

Para garantir consistência e controle experimental nos dados, alguns parâmetros foram mantidos contantes para todas as simulações de diferentes ligas. Os principais parâmetros mantidos como contantes foram:

- a) Temperatura do molde (ferramenta): fixada em $0,5 * TH$, onde “TH” representa a temperatura de fusão da liga metálica, expressa em kelvin.
- b) Temperatura do material (tarugo): fixada em $0,7 * TH$, sendo “TH” a temperatura de fusão da liga metálica em questão, expressa em kelvin.;
- c) Velocidade de extrusão: mantida constante a 50 mm/s;
- d) Condições de atrito: adotado o modelo de atrito adesivo total no contato peça-ferramenta, caracterizado por um coeficiente de aderência próximo de 1 ($m \approx 1$), o que representa forte aderência entre as superfícies e mínima possibilidade de deslizamento;
- e) Coeficiente de atrito do lubrificante considerando o modelo de levanov: fixado em 1,25, valor que quantifica o efeito lubrificante na interface, considerando variações de pressão e velocidade na simulação;
- f) Coeficiente de troca de calor do lubrificante igual a $30000 \text{ W/m}^2.\text{k}$;
- g) Coeficiente de transferência de calor entre a peça e o molde fixado em

3000W/m². K;

- h) Material do molde: Liga H13 HRC50. Aço comum para aplicações que exigem alta resistência a calor, desgaste e cargas mecânicas. Com dureza entre 45 e 55 HRC, combina tenacidade, estabilidade dimensional e excelente resistência térmica.

3.2 Aprimoramento da base de dados

O processamento dos dados extraídos do QForm seguiu uma metodologia dividida em três etapas: construção de uma planilha com os dados, engenharia de características e modelagem preditiva via aprendizado de máquina.

3.2.1 Construção da planilha

Previamente ao trabalho realizado, construiu-se uma base de dados via planilha em Excel pegando os valores de carga máxima, triaxialidade máxima e composição química das ligas de alumínio, cobre, níquel e ferro, em que cada linha da base representa uma simulação única com uma composição química distinta e os valores correspondentes das propriedades extraídas do QForm

3.2.2 Conversão da composição química em descritores

Para viabilizar o uso de algoritmos de *Machine Learning*, as composições químicas foram convertidas em descritores físico-químicos com base nos elementos constituintes de cada liga. Esses descritores capturam características fundamentais relacionadas à estrutura atômica e comportamento térmico dos materiais, sendo fundamentais para possibilitar a extrapolação de previsões para novas ligas.

As propriedades utilizadas como base para a geração dos descritores foram extraídas da base de dados publicada por Ward et al. (2016) [22], reconhecida por reunir um conjunto abrangente e confiável de propriedades físico-químicas de elementos puros, amplamente empregada em aplicações de *machine learning* na ciência dos materiais. A escolha dessa base garante consistência e reprodutibilidade aos modelos desenvolvidos.

Os descritores utilizados foram a média ponderada pela composição química e o desvio padrão ponderado pela composição química das seguintes propriedades:

- a) Número atômico
- b) Raio atômico

- c) Volume molar
- d) Massa atômica
- e) Densidade
- f) Temperatura de fusão e de ebulição
- g) Eletronegatividade
- h) Entalpia e entropia de fusão

3.2.3 Refinamento dos hiperparâmetros e treinamento do modelo

Com a base de dados final devidamente estruturada, os dados foram utilizados para treinar três algoritmos preditivos de aprendizado supervisionado: *Support Vector Regression* (SVR), *Random Forest* (RF) e *Gradient Boosting Regressor* (GBR). Para maximizar o desempenho de cada modelo, foi realizado um processo de otimização de hiperparâmetros utilizando a biblioteca Optuna.

A avaliação da performance dos modelos foi realizada por meio de validação cruzada *k-fold*, utilizando como métrica principal o Erro Quadrático Médio (RMSE). Separou-se os dados em 20% para teste e 80% para treino. Essa metodologia permite estimar a capacidade preditiva do modelo em dados não vistos, reduzindo o risco de *overfitting* e garantindo uma comparação justa entre os algoritmos.

Assim, a combinação da otimização inteligente de hiperparâmetros com uma validação rigorosa assegurou a seleção do melhor conjunto de parâmetros para cada modelo, garantindo resultados preditivos mais precisos e confiáveis.

As Tabelas 5, 6 e 7 apresentam de forma resumida os principais hiperparâmetros e suas respectivas faixas de otimização e descrição para os modelos SVR, RF e GBR.

Tabela 5 – Principais hiperparâmetros utilizados para o modelo SVR

Modelo	Hiperparâmetro	Faixa de Otimização	Descrição Resumida
Support Vector Regression	C	0,01 – 1000	Penaliza erros fora da margem; controla ajuste vs. Generalização
	ϵ (epsilon)	0,001 – 1	Largura da margem onde erros não são penalizados
	γ (gamma)	scale, auto	Controle da influência dos pontos nos dados no kernel
	Kernel	rbf, linear, poly, sigmoid	Tipo de função kernel para transformação dos dados

Tabela 6 – Principais hiperparâmetros utilizados para o modelo RF

Modelo	Hiperparâmetro	Faixa de Otimização	Descrição Resumida
Random Forest	n_estimators	50 – 300	Número de árvores na floresta
	max_depth	3 – 30	Profundidade máxima de cada árvore
	min_samples_split	2 – 10	Número mínimo de amostras para dividir um nó
	min_samples_leaf	1 – 10	Número mínimo de amostras para formar uma folha
	max_features	auto, sqrt, log2	Número de atributos considerados para divisão

Tabela 7 - Principais hiperparâmetros utilizados para o modelo GBR

Modelo	Hiperparâmetro	Faixa de Otimização	Descrição Resumida
Gradient Boosting Regressor	n_estimators	50 – 300	Número de árvores sequenciais
	learning_rate	0.01 - 0.5	Taxa de aprendizado para correção dos erros
	max_depth	2 – 10	Profundidade máxima das árvores
	min_samples_split	2 – 10	Número mínimo de amostras para dividir um nó
	min_samples_leaf	1 – 10	Número mínimo de amostras para formar uma folha
	Subsample	0.5 - 1.0	Fração de amostras usadas por interação
	max_features	auto, sqrt, log2	Número de atributos considerados para divisão

3.2.3 Extrapolação do modelo

Para avaliar a capacidade dos modelos de *machine learning* em extrapolar para composições químicas fora do intervalo observado no treinamento, foi adotada uma metodologia baseada na separação das bases de dados conforme o elemento químico predominante de cada liga metálica.

Inicialmente, foi selecionado o modelo com melhor desempenho preditivo em termos de erro quadrático médio (RMSE), considerando a validação cruzada realizada com os dados originais. Em seguida, as ligas foram agrupadas segundo o seu principal constituinte (Al, Cu, Fe, Ni). A partir disso, foi realizada uma divisão intencional dos dados, onde as ligas com predominância de um determinado elemento, por exemplo, alumínio, foram completamente excluídas do conjunto de treinamento e utilizadas exclusivamente para teste. Esse procedimento foi repetido para diferentes agrupamentos de elementos principais, permitindo uma análise sistemática da capacidade de generalização e extrapolação dos modelos.

O RMSE obtido nessas condições foi comparado com o erro de validação cruzada tradicional, permitindo identificar possíveis limitações dos modelos ao prever composições significativamente distintas daquelas vistas durante o treinamento. Essa abordagem simula de maneira mais realista o uso do modelo em cenários práticos,

como o projeto de novas ligas, onde é desejável que o algoritmo consiga inferir resultados para materiais inovadores e ainda não testados.

4 RESULTADOS

4.1 Otimização dos hiperparâmetros com Optuna e treinamento do modelo

A etapa inicial da modelagem preditiva consistiu na otimização dos hiperparâmetros dos algoritmos de regressão. Para isso, foi utilizada a biblioteca Optuna, que emprega estratégias de busca eficientes como *Tree-structured Parzen Estimator* (TPE), permitindo explorar de forma inteligente o espaço de hiperparâmetros.

4.1.1 Modelo *Support Vector Regression* (SVR)

4.1.1.1 Carga

A configuração otimizada que apresentou o menor erro quadrático médio (RMSE = 4.5003 MN) para a previsão da carga máxima está apresentada na Tabela 8.

Tabela 8 – Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo SVR no processo de predição da carga máxima

Hiperparâmetro	Valor otimizado
C	11.456971143745308
Épsilon	0.0010175997866214662
Gamma	Auto
Kernel	Rbf

Com o modelo SVR treinado, foram realizadas análises comparativas entre os valores reais e os previstos de carga máxima, tanto para os dados de teste quanto para o conjunto completo de dados.

A Figura 9 ilustra o desempenho do modelo sobre o conjunto de teste, ou seja, dados que não foram apresentados durante o treinamento. Os pontos se encontram coloridos de acordo com o elemento predominante na liga metálica.

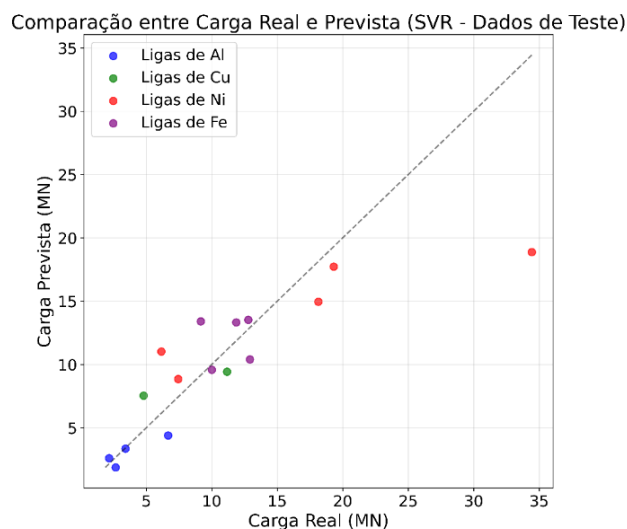


Figura 9 – Gráfico comparativo entre a carga máxima real e prevista para o modelo SVR com os dados de teste.

4.1.1.2 Triaxialidade:

Assim como realizado para a variável carga máxima, o modelo *Support Vector Regression* também foi avaliado para a predição da triaxialidade máxima, utilizando os mesmos procedimentos de otimização e validação.

A Tabela 9 apresenta os valores dos hiperparâmetros do SVR que resultaram no menor valor de Erro Quadrático Médio (RMSE), com base no processo de otimização conduzido via Optuna. O modelo apresentou um desempenho insatisfatório com $RMSE = 0.2843$ MN.

Tabela 9 - Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo SVR no processo de predição da triaxialidade máxima

Hiperparâmetro	Valor otimizado
C	19.879028184741077
Épsilon	0.050898879939679426
Gamma	Scale
Kernel	Poly

A Figura 10 apresenta os resultados do modelo SVR aplicados apenas sobre os dados de teste, ilustrando a comparação entre os valores reais e previstos da triaxialidade máxima.

Comparação entre Triaxialidade Máxima Real e Triaxialidade Máxima Prevista (SVR - Dados de Teste)

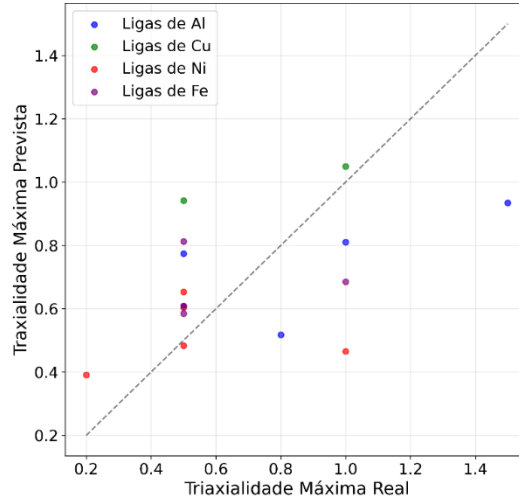


Figura 10 - Gráfico comparativo entre a triaxialidade máxima real e prevista para o modelo SVR com os dados de teste.

4.1.2 Modelo *Random Forest* (RF)

4.1.2.1 Carga:

O modelo *Random Forest Regressor* também foi avaliado quanto à sua capacidade de prever a carga máxima durante o processo de extrusão. Por meio da biblioteca Optuna, foram ajustados os principais hiperparâmetros do modelo, de forma a minimizar o Erro Quadrático Médio (RMSE). Com essa configuração, o modelo obteve um RMSE = 5.2265 MN.

A Tabela 10 apresenta os valores obtidos na configuração de menor valor de RMSE.

Tabela 10: Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo RF no processo de predição da carga máxima.

Hiperparâmetro	Valor otimizado
n_estimators	300
max_depth	3
min_samples_split	5
min_samples_leaf	7
max_features	log2

A Figura 11 apresenta o desempenho do modelo *Random Forest* sobre os dados de teste, com os valores previstos comparados aos valores reais da carga máxima. Os dados foram coloridos conforme o elemento predominante na

composição química da liga.

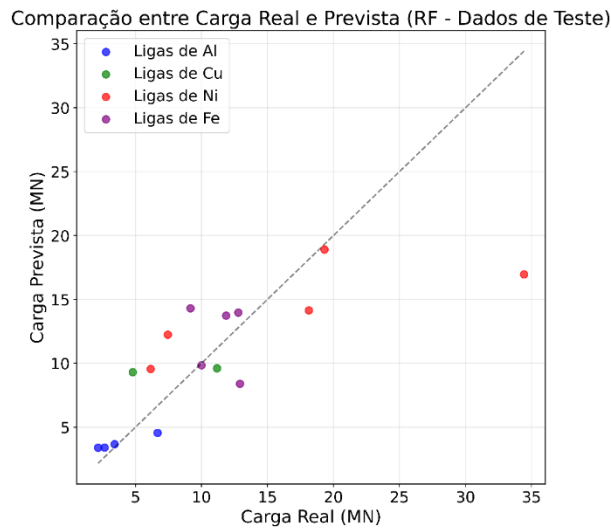


Figura 11 – Gráfico comparativo entre a carga máxima real e prevista para o modelo RF com os dados de teste.

4.1.2.2 Triaxialidade:

A aplicação do modelo *Random Forest* na predição da triaxialidade máxima também passou por um processo de otimização de hiperparâmetros com o auxílio da biblioteca *Optuna*. A Tabela 11 apresenta os melhores valores obtidos, que resultaram em um RMSE = 0.3113.

Tabela 11- Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo RF no processo de predição da triaxialidade máxima.

Hiperparâmetro	Valor otimizado
n_estimators	240
max_depth	15
min_samples_split	9
min_samples_leaf	10
max_features	log2

A Figura 12 apresenta a comparação entre os valores reais e previstos de triaxialidade máxima, considerando apenas os dados de teste. Assim como nos modelos anteriores, as cores representam as diferentes classes de ligas conforme seu elemento químico predominante.

Comparação entre Triaxialidade Máxima Real e Triaxialidade Máxima Prevista (RF - Dados de Teste)

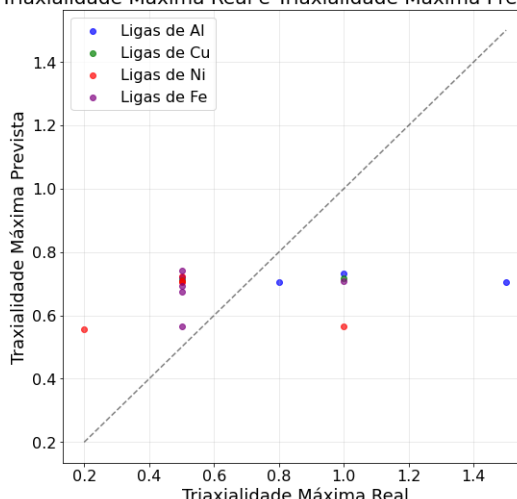


Figura 12 - Gráfico comparativo entre a triaxialidade máxima real e prevista para o modelo RF com os dados de teste.

4.1.3 Modelo Gradient Boosting Regressor (GBR)

4.1.3.1 Carga

O modelo GBR foi ajustado com o objetivo de minimizar o erro quadrático médio (RMSE) por meio da biblioteca Optuna, que realizou a exploração do espaço de hiperparâmetros com alta eficiência. A Tabela 12 apresenta os valores otimizados para o modelo que apresentou o melhor desempenho, com RMSE = 4.4299.

Tabela 12 - Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo GBR no processo de predição da carga máxima.

Hiperparâmetro	Valor otimizado
n_estimators	59
learning_rate	0.10895428613861842
max_depth	2
min_samples_split	8
min_samples_leaf	6
Subsample	0.5002901218163532
max_features	Sqrt

A Figura 13 mostra a comparação entre os valores reais e previstos de carga máxima utilizando o modelo GBR, considerando apenas os dados de teste. Como nos modelos anteriores, os pontos estão coloridos de acordo com o elemento predominante em cada liga metálica.

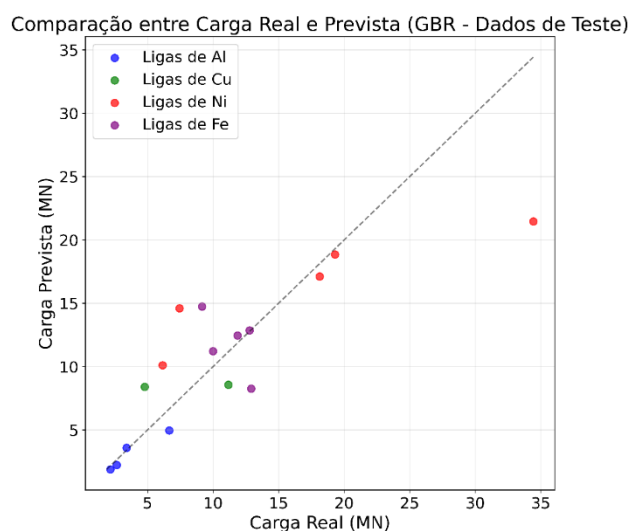


Figura 13 - Gráfico comparativo entre a carga máxima real e prevista para o modelo GBR com os dados de teste.

4.1.3.2 Triaxialidade

A modelagem da triaxialidade máxima utilizando o algoritmo GBR também passou por um processo de otimização de hiperparâmetros com a biblioteca Optuna. Os valores otimizados resultaram em um desempenho insatisfatório, com RMSE = 0.3081MN.

A Tabela 13 apresenta os hiperparâmetros correspondentes ao modelo final.

Tabela 13 – Tabela com os resultados dos principais hiperparâmetros para o modelo GBR no processo de predição da triaxialidade máxima.

Hiperparâmetro	Valor otimizado
n_estimators	56
learning_rate	0.0168710568375791
max_depth	19
min_samples_split	7
min_samples_leaf	6
Subsample	0.5002901218163532
max_features	0.557563084176958

A Figura 14 representa a comparação entre os valores reais e previstos da triaxialidade máxima, utilizando apenas os dados de teste. Os pontos, como nas análises anteriores, estão identificados por cores que indicam o elemento predominante em cada liga metálica.

Comparação entre Triaxialidade Máxima Real e Triaxialidade Máxima Prevista (GBR - Dados de Teste)

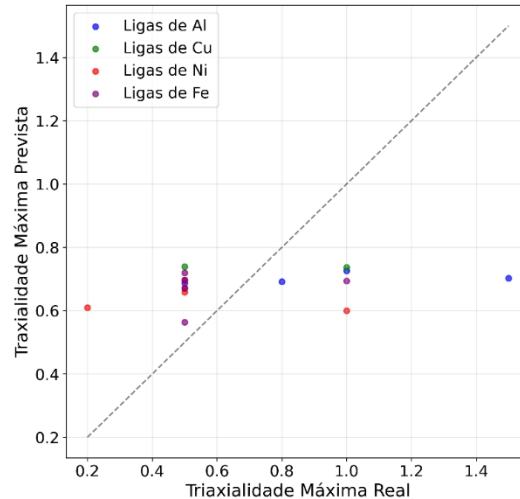


Figura 14 - Gráfico comparativo entre a triaxialidade máxima real e prevista para o modelo GBR com os dados de teste.

4.2 Avaliação do Modelo em Situação de Extrapolação

Importante destacar que a extrapolação foi realizada apenas para a variável “carga máxima”, pois a variável triaxialidade, não apresentavam variabilidade suficiente para permitir uma análise de extrapolação significativa.

4.2.1 Extrapolação por Elemento Químico

Para avaliar a capacidade de extrapolação do modelo GBR, foram realizados quatro experimentos nos quais o modelo foi treinado sem a presença de um dos elementos principais (Al, Cu, Fe ou Ni), e posteriormente testado exclusivamente com ligas contendo esse elemento. Isso simula uma situação realista em que se deseja prever o comportamento de uma nova liga, cuja composição principal não estava presente no treinamento.

Os resultados comparando as cargas previstas e reais para cada elemento são apresentadas nas Figuras 15, 16, 17, 18.

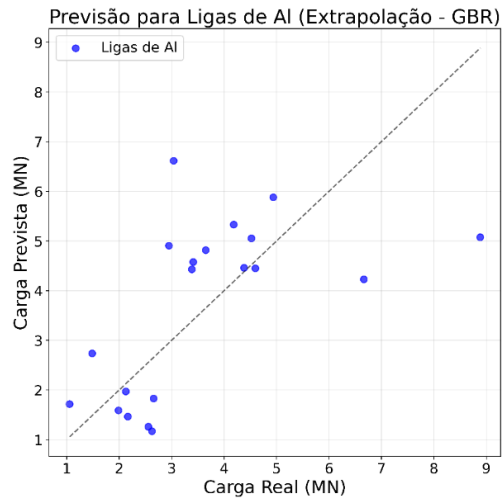


Figura 15 – Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Al por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.

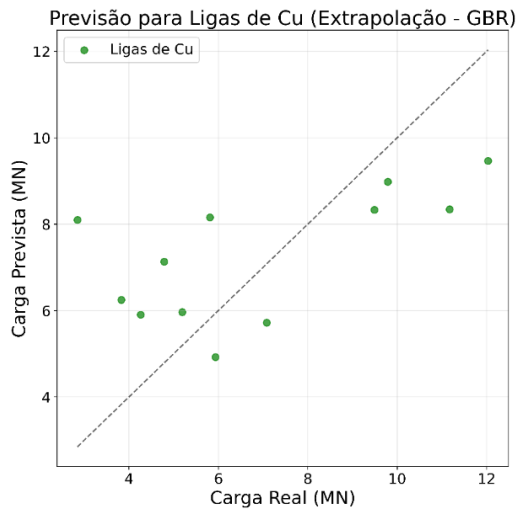


Figura 16 – Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Cu por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.

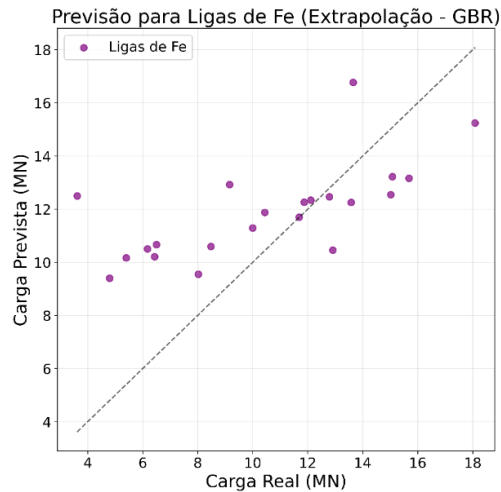


Figura 17 - Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Fe por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.

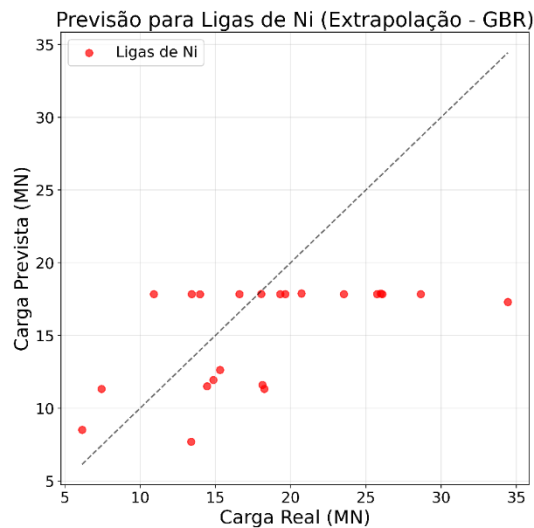


Figura 18 - Gráfico comparativo entre carga máxima prevista e real para ligas de Ni por extrapolação utilizando o algoritmo GBR.

A tabela 14 apresenta os resultados da extrapolação por elemento químico do modelo GBR de forma resumida.

Tabela 14 – Resultados da extrapolação por elemento químico do modelo GBR.

Elemento extrapolado	Carga Média das Ligas μ	Desvio Padrão da Carga das Ligas σ	RMSE	RMSE/Média	RMSE/Desvio Padrão	Número de dados para treino
Al	3.5623	1.8268	1.5896	0.4462	0.8701	56
Cu	6.8527	3.0433	2.3647	0.3451	0.7770	64
Fe	10.5218	3.9730	3.2997	0.3136	0.8305	54
Ni	18.4127	6.9128	6.4142	0.3484	0.9279	54

4.2.2 Hiperparâmetros Otimizados por Caso de Extrapolação

Foi realizado uma otimização dos hiperparâmetros do modelo GBR para o caso de extrapolação das ligas no cálculo da carga máxima. Os resultados estão representados de forma resumida na Tabela 15.

Tabela 15 - Hiperparâmetros otimizados para cada extrapolação com GBR

Elemento extrapolado	Hiperparâmetros otimizados						
	n_estim ators	learning _rate	max_d epth	min_sampl es_split	min_sampl es_leaf	Subsa mple	max_fea tures
Al	138	0.2593	11	4	5	0.5130	auto
Cu	282	0.03590	18	6	2	0.8689	auto
Fe	117	0.0101	2	5	5	0.8463	log2
Ni	126	0.3671	13	4	1	0.9852	auto

5 DISCUSSÕES

5.1 Comparativo de Desempenho

5.1.1 Carga:

Foram avaliados três algoritmos de aprendizado supervisionado para a tarefa de regressão da carga máxima: GBR, SVR e RF. Todos os modelos foram treinados com a mesma base de dados e submetidos aos mesmos dados de teste, garantindo uma comparação justa. Os valores de erro médio quadrático (RMSE) obtidos foram:

- *Gradient Boosting Regressor* (GBR): RMSE \approx 4,43 MN
- *Support Vector Regression* (SVR): RMSE \approx 4,50 MN
- *Random Forest* (RF): RMSE \approx 5,23 MN

O GBR apresentou o menor erro absoluto, seguido de perto pelo SVR. O RF, apesar de mais simples e com menor sensibilidade a ruídos, teve desempenho inferior, especialmente em valores extremos de carga. Essa proximidade nos resultados revela que todos os modelos foram capazes de capturar parte relevante da relação entre a composição química das ligas e a carga máxima simulada via elementos finitos.

A análise gráfica entre valores reais e previstos mostra que GBR e SVR apresentaram pontos mais bem distribuídos ao longo da reta ideal ($y = x$), inclusive para valores mais elevados de carga, como os observados em ligas com predominância de níquel, o que indica capacidade de extrapolação moderada e boa adaptação a diferentes faixas dos dados.

Ainda assim, em ligas de Ni observam-se os maiores desvios, indicando que essas composições específicas representam maior complexidade para os modelos. A presença de dispersões localizadas, sem padrão sistemático, reforça que não há sinais evidentes de *overfitting*, o que evidencia uma boa capacidade de generalização dos algoritmos.

O modelo *Random Forest*, por sua vez demonstrou tendência de suavização das previsões, com subestimação de valores altos e superestimação de valores baixos. Um comportamento característico de modelos baseados em árvores com regularização forte ou baixa profundidade. Essa “compressão” dos valores é especialmente visível nas ligas de níquel e, em menor grau, nas de ferro.

Uma análise mais aprofundada por tipo de liga revela diferenças importantes

no desempenho preditivo. As ligas de alumínio (Al) e níquel (Ni) apresentaram os maiores erros relativos, com valores de RMSE correspondendo a cerca de 35% a 45% da média ($RMSE/\mu$), o que indica desafios adicionais na extrapolação e aprendizado em regiões com menos diversidade ou maior complexidade. No caso do Al, a pequena amplitude da variável carga dificulta a diferenciação pelas features, fazendo com que o modelo não consiga fazer uma distinção clara entre as amostras. Já para o níquel, observa-se o oposto: há uma ampla variação na carga (com valores que chegam a ultrapassar 35 MN), mas pouquíssimas amostras representam essas regiões extremas, o que limita a capacidade dos modelos de aprender e generalizar adequadamente nesses pontos. Embora Al e Ni tenham bases de treino de tamanho semelhante (54-56 amostras), o desempenho foi significativamente distinto. Isso evidencia que não é apenas a quantidade, mas também a distribuição dos exemplos e a complexidade da relação carga–descritor que impactam a extrapolação. O Níquel, em particular, apresentou curva mais não linear e instável, exigindo maior capacidade de ajuste do modelo.

Esse comportamento ficou claro na otimização dos hiperparâmetros para cada caso de extrapolação, feita por meio da biblioteca *Optuna*. Para Ni, o modelo GBR ajustou uma maior profundidade de árvore ($max_depth = 13$) e taxa de aprendizado mais elevada ($learning_rate = 0,3671$), possivelmente como tentativa de capturar variações mais abruptas dos dados. Já para ligas como Fe, com comportamento mais regular, os hiperparâmetros refletiram menor complexidade ($max_depth = 2$; $learning_rate = 0,0101$). Esses ajustes indicam que o modelo se adapta estruturalmente conforme a dificuldade da extrapolação.

No caso do cobre (Cu), os modelos apresentaram o melhor desempenho absoluto entre todos os subgrupos, tanto em RMSE quanto nas métricas relativas. Isso pode ser atribuído, ao menos em parte, à maior quantidade de dados disponíveis para treinamento, o que confere maior representatividade das variações dentro do conjunto. Esse resultado reforça a importância de bases de dados bem distribuídas e suficientemente amplas, especialmente para tarefas que envolvem extrapolação.

Desta forma a presença de dispersões localizadas nos gráficos de previsão reforça que os modelos não estão sofrendo *overfitting*. Esses desvios são esperados em problemas reais com alta variabilidade e indicam que os algoritmos estão conseguindo generalizar razoavelmente bem sem memorizar os dados de treino.

5.1.2 Triaxialidade:

Três algoritmos de regressão supervisionada foram avaliados na tarefa de prever a triaxialidade máxima das ligas metálicas simuladas via elementos finitos. O desempenho foi medido por meio do erro médio quadrático (RMSE) sobre o conjunto de teste. Os resultados são apresentados a seguir:

- *Support Vector Regression* (SVR): RMSE \approx 0,28
- *Gradient Boosting Regressor* (GBR): RMSE \approx 0,31
- *Random Forest* (RF): RMSE \approx 0,31

O modelo SVR obteve o menor erro absoluto, com GBR e RF apresentando resultados similares entre si, ligeiramente acima do SVR. Ainda assim, os valores de RMSE ficaram muito próximos, o que indica que nenhum modelo se destacou de forma significativa em relação aos demais nesta tarefa.

A análise dos gráficos de dispersão reforça essa constatação: todos os modelos mostraram um padrão comum de previsões agrupadas verticalmente, com diversos pontos sobrepostos e distantes da linha de identidade ($y = x$), indicando uma má capacidade de generalização do modelo para dados não vistos.

Esse comportamento é justificado pela baixa variabilidade da variável triaxialidade na base de dados: a média geral da variável é de aproximadamente 0,68, com um desvio padrão de 0,28. Essa faixa de variação é estreita e pouco expressiva, o que limita a capacidade de aprendizado dos modelos. Os valores de RMSE obtidos pelos modelos foram da mesma ordem de magnitude do desvio padrão da variável, sugerindo que os algoritmos conseguiram, no máximo, aprender o comportamento médio da triaxialidade, com pouco ganho real de predição em relação à simples estimativa pela média.

Outro fator relevante é a repetitividade dos dados simulados, que pode ter surgido pela manutenção das mesmas condições de processo nas diferentes ligas (como temperatura, velocidade de extrusão e atrito), o que leva a previsões similares para materiais distintos. Isso acaba limitando a variação da resposta (triaxialidade) e gera um conjunto de dados menos informativo para fins de regressão.

Desta forma, pode-se observar que os valores de RMSE ficaram muito próximos, o que indica que nenhum modelo se destacou de forma significativa em relação aos demais nesta tarefa.

5.1.3 Indicadores relativos (RMSE/Média e RMSE/Desvio Padrão)

Para complementar a análise, foram utilizados indicadores relativos de erro para variável de carga máxima, pois o RMSE e o desvio padrão ($RMSE/\sigma$) ajuda a avaliar se o modelo está de fato captando padrões ou apenas "chutando" valores próximos à média dos dados.

Em todos os casos extrapolados, $RMSE/\sigma$ foi menor que 1, indicando que os modelos foram capazes de capturar padrões além da simples média. No entanto, o níquel novamente se destaca negativamente, com $RMSE/\sigma \approx 0,93$, muito próximo do limite. Já alumínio teve $RMSE/\sigma \approx 0,87$, influenciado pela baixa variabilidade interna. Por outro lado, ferro e cobre apresentaram melhores indicadores relativos, com $RMSE/\sigma$ entre 0,77 e 0,83, confirmando maior previsibilidade.

6 CONCLUSÕES

Este trabalho investigou o uso de algoritmos de aprendizado de máquina para prever variáveis críticas em processos de conformação termomecânica, com base em dados obtidos por simulação numérica via software QForm. As variáveis de interesse foram a carga máxima aplicada durante o processo e a triaxialidade máxima, ambas fundamentais para compreender o comportamento das ligas metálicas sob deformação. Três modelos supervisionados foram avaliados: *Gradient Boosting Regressor* (GBR), *Support Vector Regression* (SVR) e *Random Forest* (RF).

Na tarefa de predição da carga máxima, os três algoritmos apresentaram desempenho razoável, com RMSE entre 4,43 e 5,23 MN. O modelo GBR se destacou com o menor erro absoluto, mostrando-se mais eficaz na captura da relação entre os descritores físico-químicos e a variável alvo. A análise gráfica confirmou a maior aderência de GBR e SVR à linha de identidade, enquanto o RF exibiu tendência a “suavizar” previsões, especialmente em faixas extremas. A ausência de padrões sistemáticos de erro indicou que os modelos não apresentaram *overfitting*, mesmo em ligas mais complexas.

Ao analisar os subgrupos por tipo de liga, observou-se que as ligas de alumínio (Al) e níquel (Ni) representaram maior desafio para os modelos, com erros relativos (RMSE/ μ) entre 35% e 45%, em contraste com ferro (Fe) e cobre (Cu), que apresentaram erros entre 30% e 34%. Esse comportamento foi atribuído não apenas ao tamanho da base de treino, mas também à complexidade da curva carga-descritor, amplitude da variável e distribuição das amostras. O cobre apresentou o melhor desempenho absoluto, mas também possuía o maior número de exemplos no conjunto de treino. A comparação entre Fe e Ni, que possuem o mesmo número de amostras, evidenciou o impacto da complexidade dos dados na capacidade de generalização dos modelos.

A avaliação dos indicadores relativos (RMSE/ μ e RMSE/ σ) confirmou que os modelos foram capazes de aprender padrões reais além da simples média dos dados, uma vez que em todos os casos $RMSE/\sigma < 1$, indicando que as previsões ficaram dentro da faixa natural de variação dos dados. Esses indicadores se mostraram úteis para comparar a dificuldade de previsão entre diferentes ligas.

No caso da triaxialidade máxima, os modelos apresentaram desempenho muito próximo entre si (RMSE entre 0,28 e 0,31), com erros da mesma ordem de

magnitude do próprio desvio padrão da variável. A baixa variação e a concentração dos valores em torno de uma média limitada dificultaram o aprendizado de padrões complexos. Como resultado, os modelos aprenderam principalmente a prever a média da variável, com pouca capacidade de diferenciação entre diferentes ligas.

A avaliação em cenários de extrapolação, realizada apenas para a variável carga máxima, reforçou a importância da estrutura e representatividade dos dados de treino. A exclusão de um elemento químico por vez permitiu observar a degradação do desempenho dos modelos ao enfrentar regiões não cobertas pelo treinamento. Ligas como níquel apresentaram os maiores erros em extrapolação, associados a sua grande amplitude e à escassez de exemplos em regiões críticas. Por outro lado, o bom desempenho para Cu e Fe reforçou o valor de bases equilibradas e bem distribuídas.

Os hiperparâmetros otimizados individualmente por cenário de extrapolação mostraram que o modelo GBR, em especial, adapta-se estruturalmente às dificuldades de generalização. Situações mais complexas, como as ligas de Ni, exigiram maior profundidade de árvore e taxas de aprendizado mais altas, em uma tentativa do algoritmo de ajustar-se às variações mais abruptas dos dados.

Em suma, os resultados obtidos demonstram que o uso de algoritmos de aprendizado supervisionado em conjunto com dados simulados pode fornecer estimativas robustas e consistentes de variáveis termomecânicas, desde que os dados de entrada sejam suficientemente representativos e bem distribuídos.

7.REFERÊNCIAS

- [1] CALLISTER JUNIOR, William D. Fundamentos da ciência e engenharia dos materiais. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.
- [2] ZIEGLER, H.; THOMAS, P. Introduction to Thermomechanics. Berlin: Springer, 2006.
- [3] BATHE, K.-J. Finite Element Procedures. 2. ed. Watertown, MA: Klaus-Jürgen Bathe, 2006. Disponível em: <https://books.google.com/books?id=rWvefGICfO8C>. Acesso em: 20 mai. 2025.
- [4] LIN, J. et al. Data-driven modeling and simulation of plastic deformation in metallic alloys. *Computational Materials Science*, v. 150, p. 387–399, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.04.031>. Acesso em: 20 mai. 2025
- [5] C. Janiesch, P. Zschech, K. Heinrich, Machine learning and deep learning, *Electron Markets* 31 (2021) 685–695. <https://doi.org/10.1007/s12525-021-00475-2>
- [6] ALTAN, T.; SHIVPURI, R.; GEGEL, H. L. Metal forming: fundamentals and applications. 1. ed. Ohio: American Society of Metals (ASM International), 1983
- [7] TATE, A. W. Extrusion: Theory and Practice. 2. ed. New York: Cambridge University Press, 1996.
- [8] SURYAWANSHI, M.; RATHOD, S. Principles of Metal Forming and Processing. 3. ed. New Delhi: McGraw-Hill, 2012.
- [9] JOHNSON, G. R.; COOK, W. H. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures. In: *Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics*, 1983, The Hague. p. 541–547.
- [10] COOK, R. D. et al. Concepts and Applications of Finite Element Analysis. 4. ed. New York: Wiley, 2002.
- [11] ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals. 7. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2013.
- [12] GURSON, A. L. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I—Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *Journal of Engineering Materials and Technology*, v. 99, n. 1, p. 2–15, 1977.
- [13] RICE, J. R.; TRACEY, D. M. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 17, n. 3, p. 201–217, 1969.
- [14] TVERGAARD, V. Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions. *International Journal of Fracture*, v. 17, p. 389–407, 1981.
- [16] M. Awad, R. Khanna, *Efficient Learning Machines: Theories, Concepts, and Applications for Engineers and System Designers*, 2015.
- [17] J. He, Z. Li, P. Zhao, H. Zhang, F. Zhang, L. Wang, X. Cheng, Machine learning design of high-entropy alloys with superior mechanical properties, *Journal of Materials Research and Technology* 33 (2024) 260–286. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.09.014>.

- [18] RADHIKA, N.; NIKETH, M. S.; AKHIL, U. V.; ADEDIRAN, A. A.; JEN, T.-C. High entropy alloys for hydrogen storage applications: A machine learning-based approach. *Results in Engineering*, v. 23, p. 102780, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2024.102780>. Acesso em: 02 abr. 2025.
- [19] BEN CHAABENE, W. et al. Machine learning for materials: An application in predicting mechanical properties of steel. *Materials Today: Proceedings*, v. 26, p. 2738–2744, 2020.
- [20] ALMEIDA, G. T. de et al. Uso de Gradient Boosting em modelagem preditiva de parâmetros termomecânicos. *Anais do Congresso Nacional de Engenharia Mecânica*, 2023.
- [21] BREIMAN, L. Random forests. *Machine Learning*, v. 45, n. 1, p. 5–32, 2001.
- [22] ELKATATNY, S. et al. Machine-learning synergy in high-entropy alloys: A review. *Journal of Materials Research and Technology*, v. 33, p. 3976–3997, 2024.
- [23] QFORM UK. QForm User Manual: Simulation of metal forming processes. QuantorForm Ltd., 2020.
- [24] FRIEDMAN, J. H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *Annals of Statistics*, v. 29, n. 5, p. 1189–1232, 2001.
- [25] IBM. O que é random forest? In: IBM Think. IBM, [s.d.]. Disponível em: <https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/random-forest>. Acesso em: 24 jun. 2025.
- [26] JEFFREY, H.; MICHAEL, K.; VADIM, M. *Fundamentals of Data Visualization*. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2010.
- [27] KEIM, D. A. et al. Challenges in visual data analysis. *Information Visualization*, v. 8, n. 4, p. 233–243, 2006.
- [28] L'HEUREUX, A. et al. Machine learning with big data: challenges and approaches. *IEEE Access*, v. 5, p. 7776–7797, 2017.
- [29] MEDEIROS, D. P. de et al. Aplicação de Random Forest na predição de propriedades mecânicas em processos de extrusão. *Revista Brasileira de Engenharia Mecânica*, v. 45, n. 2, p. 112–120, 2022.
- [30] MITCHELL, T. M. *Machine Learning*. New York: McGraw-Hill, 1997.
- [31] MOHRI, M.; ROSTAMIZADEH, A.; TALWALKAR, A. *Foundations of Machine Learning*. Cambridge, MA: MIT Press, 2012.
- [32] REDDY, J. N. *An Introduction to the Finite Element Method*. 3rd ed. New York: McGraw-Hill, 2006.
- [33] RICE, J. R.; TRACEY, D. M. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 17, p. 201–217, 1969.
- [34] RUSSELL, S.; NORVIG, P. *Artificial Intelligence: A Modern Approach*. 3. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2017.
- [35] SCHAPIRE, R. E. The boosting approach to machine learning: An overview. In: *Nonlinear Estimation and Classification*. Springer, 2008.

- [36] SILVA, José Cláudio da. Processos de conformação – Parte II. SlideShare, 2013. Disponível em: <https://pt.slideshare.net/slideshow/processos-de-conformao-parte-ii-24015182/24015182#3>. Acesso em: 24 jun. 2025.
- [37] SMOLA, A. J.; SCHÖLKOPF, B. A tutorial on support vector regression. *Statistics and Computing*, v. 14, n. 3, p. 199–222, 2004.
- [38] SPOT INTELLIGENCE. Support Vector Regression (SVR) Simplified & How To Tutorial. Spot Intelligence, 08 maio 2024. Disponível em: <https://spotintelligence.com/2024/05/08/support-vector-regression-svr/>. Acesso em: 24 jun. 2025.
- [29] TURKAY, C.; LARAMEE, R. S.; HOLZINGER, A. *Explainable AI: Interpreting, Explaining and Visualizing Deep Learning*. Cham: Springer, 2017.
- [30] VAPNIK, V. N. *Statistical Learning Theory*. New York: Wiley, 1998.
- [31] WEI, J. et al. Machine learning in materials science. *InfoMat*, v. 1, p. 338–358, 2019.
- [32] ZIEGLER, James R.; THOMAS, Richard. *Fundamentals of Metal Forming*. New York: McGraw-Hill, 2006.