



# OTIMIZAÇÃO DOS PARÂMETROS DE PROCESSO PARA PRODUÇÃO DE LIGAS DE TITÂNIO VIA MANUFATURA ADITIVA

**Palavras-Chave:** Manufatura do Titânio, Programação Linear, Programação Multiobjetivo, Programação por Metas

**Autores/as:**

**JAQUELINE DA CONCEIÇÃO OLIVEIRA, FCA – UNICAMP**

**Prof. Dra. ALESSANDRA CREMASCO, orientadora, FCA – UNICAMP**

**Prof. Dr. WASHINGTON ALVES DE OLIVEIRA, FCA – UNICAMP**

---

## INTRODUÇÃO:

A área biomédica é um dos segmentos mais importantes para a garantia da saúde e bem-estar das pessoas, principalmente entre os idosos devido ao aumento da expectativa de vida. Dessa forma o titânio é muito requerido nesta área por apresentar alta biocompatibilidade, módulo de elasticidade e densidade reduzidas, além de uma melhor resistência à corrosão se comparado a outros materiais, como aço inoxidável e ligas de cobalto-cromo, por exemplo [Pires et. al., 2015].

O interesse pelo aprimoramento das ligas de titânio, então se tornam alvo de estudos pelas suas vantagens biomédicas e busca-se otimizar o processo de manufatura dele, diminuindo custos e elevando suas propriedades. O processo de manufatura aditiva estudado nesta pesquisa, *Selective Laser Melting* (SLM), é capaz de alcançar níveis satisfatórios de ligas de titânio para aplicações médicas e, portanto, utilizar modelagem matemática e métodos de otimização como ferramenta de melhoria do processo é interessante e desafiador. Modelos de programação multi-objetivos (programação por metas), a Programação Linear (PL) e a Regressão Linear (RL) podem ser combinados para alcançar melhorias no processamento das ligas de titânio, principalmente, como é a finalidade desse trabalho, na tentativa de diminuir o número de experimentos em laboratório, podendo tornar a manufatura mais rápida e menos custosa.

Nesse sentido este resumo direcionado ao XXXI Congresso de Iniciação Científica da Unicamp, objetiva elaborar um procedimento para antecipar os próximos parâmetros para realizar um novo experimento utilizando um banco de dados que inclui várias experiências anteriores utilizando uma abordagem de empregar um método de modelagem caixa-preta em duas etapas. Na primeira etapa, são definidas as funções a serem otimizadas por meio do ajuste de curvas. Na segunda etapa, os parâmetros do próximo experimento são obtidos ao resolver um modelo de programação por metas.

Os dados foram obtidos por meio de pesquisa bibliográfica do processamento de manufatura aditiva SLM dos parâmetros de entrada: potência do laser, espessura de camada, tamanho de partícula do pó, velocidade de varredura, densidade de energia e distância entre camadas; e dados de saída: porosidade, densidade, dureza e rugosidade.

Foram coletados dados de diversas ligas de titânio, e a mais usual é a Ti-6Al-4V, devido a sua larga escala de utilização em implantes médicos. Os dados obtidos por meio de revisão bibliográfica do Ti e

suas ligas foram analisados pelo ajuste de curva da regressão linear, calculando-se o  $R^2$ , que, de acordo com Chein (2019), entre 0 e 1, o maior valor de  $R^2$  melhor será o ajuste da curva pela regressão e os parâmetros (pelo método dos mínimos quadrados) que definem a função a ser encontrada e que descreve os dados de saída dos experimentos do processo SLM.

Em seguida, utilizando o método Simplex, realiza-se a resolução de modelos de programação por metas (*Goal Programming*) descrito como um PL, onde existe mais de um objetivo a ser alcançado. Na medida em que a alteração dos diferentes dados de entrada do SLM fornece diferentes dados de saída, para a aplicação desejada, valores ótimos (*targets*) precisam ser alcançados [Simon, 1957].

## METODOLOGIA:

Em Pesquisa Operacional, um dos principais objetivos se concentra na resolução de problemas de programação linear, otimizando o uso de recursos escassos para alcançar um objetivo em específico, por meio da maximização ou minimização de uma função linear sujeita a uma ou mais restrições lineares [Bastos et. al., 2007].

O processo de fabricação via manufatura aditiva (MA) avaliado neste estudo foi o PFB - *Powder Bed Fusion* (Fusão em Leito de Pó), um processo onde o raio laser une os pós metálicos numa fusão, formando camadas de pó, "Leito de Pó" que é o principal equipamento do mercado *Selective Laser Melting* (SLM). Assim, inicialmente, os dados coletados dos parâmetros de entrada e saída do SLM para as diversas ligas de titânio foram organizados em uma planilha eletrônica. Os dados foram coletados da literatura nos seguintes trabalhos: Gu et al., (2012); Sun et al., 2022; Zhang et al., (2011); Sing et al., (2018); Elsayed et al., (2018); Oyesola et al. (2021). A planilha com os dados gerais podem ser consultados no seguinte link: <https://acrobat.adobe.com/id/urn:aaid:sc:VA6C2:dcd0edbb-363c-4f94-b204-bf1d8b147c92>

A pesquisa na literatura resultou em um conjunto de dados com quatro dados de entrada, onde  $x_1$  representa a Potência do Laser (W),  $x_2$  representa a Velocidade do Laser (mm/s),  $x_3$  representa a Espessura da Camada do Pó (mm) e  $x_4$  representa a Distância entre Camadas (mm). Em uma primeira fase, as informações tabeladas para  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$  e  $x_4$  foram usadas para ajustar os dados coletados de saída, ou seja, para cada saída foi obtido uma função que descreve as saídas de acordo com as entradas por meio de uma Regressão Linear Múltipla (ajuste de curvas). Os dados de saída a serem ajustados consistem em  $f_1(x)$  que representa a Porosidade (%),  $f_2(x)$  que representa a Densidade Relativa (%),  $f_3(x)$  que representa a Dureza Vickers (HV) na direção XY e  $f_4(x)$  que representa a Rugosidade ( $\mu\text{m}$ ) no topo da superfície. Portanto, para cada função ajustada que foi estudada consiste da seguinte função  $f(x)=a_0 + a_1*x_1 + a_2*x_2 + a_3*x_3 + a_4*x_4$ , onde a regressão linear determina as constantes  $a_0$ ,  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $a_4$ .

Em uma segunda fase, o vetor de funções ( $f_1(x)$ ,  $f_2(x)$ ,  $f_3(x)$ ,  $f_4(x)$ ) será usado para construir um modelo de programação linear multiobjetivo. O modelo escolhido consiste do seguinte modelo de programação por metas.

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & \sum_{j=1}^4 \left( \frac{u_j n_j}{k_j} + \frac{v_j p_j}{k_j} \right) \\ \text{S.a} \quad & \hat{y}_j(x) + n_j - p_j = t_j, \quad j = 1, \dots, 4, \\ & x \in \Omega, \\ & n_j p_j = 0, \quad j = 1, \dots, 4, \\ & n_j, p_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, 4, \end{aligned}$$

onde cada  $y_j(x)$  representa a aproximação feita pela regressão linear para cada  $f_j(x)$ , ou seja,  $y_j(x)$  é um objetivo conflitante que tem  $t_j$  como valor de alvo a ser alcançado;  $n_j$  e  $p_j$  são as variáveis de desvio negativo e positivo em relação ao alvo  $t_j$ . A essência da programação por metas envolve a minimização de variáveis de desvio indesejadas, onde essas variáveis precisam ser combinadas por meio de uma função de realização cujo objetivo é minimizá-las e assim garantir que seja encontrada uma solução que seja “o mais próxima possível” do conjunto de metas (alvos) almejadas (Jones and Tamiz, 2010).

Em particular, neste trabalho os valores dos alvos foram escolhidos de acordo com valores de referência coletadas da literatura, selecionados dos seguintes trabalhos: Song et al.(2023) para  $t_1$  (porosidade) no intervalo [5%,10%] e  $t_2$  (densidade relativa) no intervalo [95%, 100%]; Zhang e Chen (2019) para  $t_3$  (dureza) igual a 261 HV; e Ronald et al. (2003) para  $t_4$  (rugosidade) no intervalo [3.62 $\mu$ m, 3.90 $\mu$ m]. Note que no contexto de programação por metas existem três tipos de caminhos para alcançar o alvo, “menos é melhor”, “mais é melhor” e “igual é melhor” se a finalidade é obter soluções que tenham como valor de função objetivo abaixo, acima ou igual ao alvo, respectivamente. Assim, no primeiro caso a desvio positivo  $p_j$  é indesejável, no segundo caso o desvio negativo  $n_j$  é indesejável, e ambos são indesejáveis no último caso. Desta forma, os desvios indesejáveis são penalizados na função de realização, onde geralmente é escolhido um esquema de ponderação das metas que representa a vontade do tomador de decisão. Para os alvos que estão em um intervalo, o conjunto de metas é dobrado na formulação (“mais é melhor” e “menos é melhor” para cada extremo do intervalo) e, assim, no caso da dureza tentamos alcançar a igualdade.

Portanto, as entradas da solução ótima  $x^*=(x_1^*, x_2^*, x_3^*, x_4^*)$  do modelo de programação por metas consistem dos valores dos parâmetros obtidos para a realização de um próximo experimento.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A metodologia desenvolvida neste trabalho descrita na seção anterior foi implementada e validada por meio de um conjunto de testes computacionais que envolveu uma combinação de código em Python (para resolver a regressão linear) e planilha eletrônica (para resolver o modelo de programação por metas). A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos dos testes computacionais. Nela, as duas primeiras colunas indicam a referência de onde os dados foram coletados e a liga estudada. A amostra de dados coletados tem 104 experimentos no total, sendo que depois de um processo de filtro das informações na planilha (dados faltantes e diferentes tipos de ligas), foi decidido dividir o estudo computacional em seis testes. As colunas Teste e #dados da tabela informam qual teste e a quantidade de dados nesse teste. A coluna  $f(x)$  indica qual função foi ajustada, enquanto que as cinco próximas colunas descrevem o valor para cada coeficiente  $a_0, a_1, a_2, a_3, a_4$  obtido da regressão linear. Nessa tabela, uma célula vazia indica que aquele dado, parâmetros de entrada ( $x_1, x_2, x_3, x_4$ ) ou de saída ( $f_1(x), f_2(x), f_3(x), f_4(x)$ ) não foi estudado. Por exemplo, no Teste 1, as funções  $f_1(x)$  e  $f_2(x)$  foram estudadas para apenas o dado de entrada  $x_2$ . O valor na coluna  $R^2$  tenta explicar o ajuste feito na regressão, ele é uma métrica que varia de 0 a 1, sendo que  $R^2$  é igual a 0 significa que o modelo não explica nada da variação dos dados, enquanto que  $R^2$  igual a 1 indica que o modelo explica toda a variação dos dados. Ou seja,  $R^2$  é um representante da porcentagem da variação nos dados que é explicada pelo modelo. A coluna Alvo fornece os valores de alvo para as metas. Enquanto que as quatro últimas colunas fornecem a resposta obtida pela nossa metodologia, valores para  $x_j^*$  são aqueles que poderiam ser usados em um próximo experimento.

Note que depois de filtrar os dados 63 dos 104 experimentos coletados foram utilizados nos nossos testes, sendo o Teste 6 o maior deles. Proporcionalmente, os Testes 4 e 6 são aqueles que avaliam mais informações de entrada e saída. Pela coluna  $R^2$ , vemos que a variação dos dados foi melhor explicada no Teste 3, o que não ocorreu no Teste 1 (teste com menor quantidade de dados analisados).

As respostas da nossa metodologia, colunas  $x1^*$ ,  $x2^*$ ,  $x3^*$  e  $x4^*$ , fornecem uma sugestão de um próximo experimento a ser analisado em laboratório. Do ponto de vista prático, o interessante é realizar o experimento em laboratório utilizando as respostas encontradas, avaliar as funções de saída desse novo experimento e, caso ainda não seja totalmente interessante, inserir essas respostas no conjunto de dados (realimentar o processo metodológico) e obter um novo conjunto de parâmetros. Observe que esta metodologia pode ser usada de forma sistemática na tentativa de diminuir a quantidade de experimentos realizados em laboratório, uma vez que o conflito entre as funções de saída foi avaliado por um método de otimização multicritério, portanto as respostas encontradas têm potencial de fornecer boas ligas em laboratório.

Tabela 1: Resultados obtidos dos testes computacionais

Referência	Liga	Teste	#dados	f(x)	a0	x1	x2	x3	x4	R <sup>2</sup>	Alvo (f(x))	Parâmetros previstos			
						a1	a2	a3	a4			x1*	x2*	x3*	x4*
Gu et al. (2012)	Titânio Puro (Grau 2)	1	4	f1(x)	4.23333		-0.01400			0.65	[0.05, 0.1]	295.000			
				f2(x)	96.16667		0.01250		0.65	[95, 100]					
Sun et al. (2022)	Ti-6Al-4V (grau 23)	2	5	f1(x)	4.69290		-0.00373			0.73	[0.05, 0.1]	1246.416			
				f2(x)	4.22228		0.00015		0.76	[95, 100]					
Oyesola et al. (2021)	Ti6Al4V e Ti grau 5	3	11	f3(x)	281.88185	0.35367	0.01893			0.99	400	268.400	1225.390		
				f4(x)	22.21378	-0.02314	-0.00194		0.98	[13.62, 13.90]					
Sing et al. (2018)	TiTa (Ti grau 2)	4	10	f1(x)	0.50000	-0.01934	0.01422			0.94	[0.05, 0.1]	624.526	821.648		
				f2(x)	99.50000	0.01934	-0.01422		0.94	[95, 100]					
				f3(x)	256.00000	-0.05701	0.04557		0.72	400					
				f4(x)	15.25000	0.03399	-0.00301		0.81	[13.62, 13.90]					
Zhang et al. (2011)	Ti-24Nb-4Zr-8Sn	5	12	f1(x)	231.01854	-0.10634	-0.37043	-0.05600		0.92	[95, 100]	228.156	557.887	0.0100	
				f3(x)	61.52385	1.96450	-0.19670	-0.01183		0.97	400				
Elsayed et al. (2018)	Ti6Al4V	6	21	f1(x)	11.50909	-0.32991	0.08136		0.28514	0.93	[0.05, 0.1]	56.162	87.282		0.0648
				f2(x)	99.49091	0.12991	-0.08136		-72.28514	0.90	[95, 100]				
				f4(x)	49.14283	-0.56900	-0.03860		-3.05000	0.97	[13.62, 13.90]				

O próximo passo é fazer um estudo criterioso sobre os erros cometidos na regressão linear para tentar avaliar o efeito na solução final. Além disso, a primeira fase da metodologia usada neste trabalho aproximou funções desconhecidas por uma função linear. No entanto, aproximações não lineares nos dados de entrada e aproximações não lineares nos coeficientes de uma regressão não linear precisam ainda ser estudadas.

## CONCLUSÕES:

Diante dos resultados obtidos preliminarmente, verifica-se que o uso da regressão linear se mostra interessante ao prever um próximo experimento, uma vez que o  $R^2$  teve boas aproximações da função encontrada, para testes a partir de 10 amostras. Além disso, o conflito existente entre as funções de saída foi avaliado por um método de otimização multicritério. Conforme os dados da planilha em anexo, verifica-se que o próximo valor a ser considerado em um experimento de laboratório representa satisfatoriamente os valores de experimentos já realizados e coletados da literatura. Por exemplo, no Teste 3, a potência encontrada foi 268,4 W ficou em um valor razoável dentro dos experimentais que variava de 225W a 900W, para a liga Ti-24Nb-4Zr-8Sn, sendo seu  $R^2$  maior que 0,9.

Desse modo, pode-se notar que os experimentos podem ser otimizados e previstos a partir da modelagem matemática proposta, ficando como próximos passos, a realização do experimento com os valores de  $x^*$  encontrados para a verificação prática desta teoria, que poderá ser desenvolvida ao final desta pesquisa. Com isso, e também com novas aproximações não lineares a serem estudadas, este trabalho mostra-se promissor em otimizar o processo de manufatura de ligas de titânio via processo de SLM.

## BIBLIOGRAFIA

Bastos, L. D. S. L., Mendes, M. L., Ribeiro, V. G., Assuncao, M. H. C. & Santos, Y. B. I. Programação Linear de Produção para Maximização de Receita: Estudo de Caso em uma Cervejaria Artesanal. In XXXIII Encontro Nacional de Engenharia de Produção. Salvador, BA, 2013.

Chein, F. Introdução aos Modelos de Regressão Linear: um passo inicial para compreensão da econometria como uma ferramenta de avaliação de políticas públicas / Flávia Chein. Brasília: Enap, 2019. Disponível

em:<[https://repositorio.enap.gov.br/bitstream/1/4788/1/Livro\\_Regress%C3%A3o%20Linear.pdf](https://repositorio.enap.gov.br/bitstream/1/4788/1/Livro_Regress%C3%A3o%20Linear.pdf)>.

Acesso em: 18 jun. 2023.

Dylan Jones and Mehrdad Tamiz. Practical goal programming, volume 141. Springer, 2010.

Elsayed, M., Ghazy, M., Youssef, Y., Essa, K. Optimization of SLM process parameters for Ti6Al4V medical implants. Rapid Prototyping Journal, vol. 25, p. 433–447, 2018.

Gu, D., Hagedorn, Y-C., Meiners, W., Meng, G., Batista, R. J. S., Wissenbach, K., Poprawe, R. Densification behavior, microstructure evolution, and wear performance of selective laser melting processed commercially pure titanium. Elsevier, vol. 60, p. 3849–3860, 2012.

Oyesola, M., Mpofo, K., Mathe, N., Fatoba, S., Hoosain, S., Daniyan, I. Optimization of selective laser melting process parameters for surface quality performance of the fabricated Ti6Al4V. Springer, vol. 114, p. 1585–1599, 2021.

Pires, R. A. L., Bierhalz, C. K. A., Moraes, M. A. Biomateriais: tipos, aplicações e mercado. Química Nova, Vol. 38, p. 957-971, 2015.

Ronald, H.J., Lyngstadaas, S.P., Ellingsen, J.E. Analysing the optimal value for titanium implant roughness in bone attachment using a tensile test. Elsevier, vol. 24, p. 4559–4564, 2003.

Simon, H. A. Models of man; social and rational. Wiley, 1957.

Sing, S. L., Wiria, F. E., Yeong, W. Y. Selective laser melting of titanium alloy with 50 wt% tantalum: Effect of laser process parameters on part quality. Elsevier, vol. 77, p. 120-127, 2018.

Song, C., Liu, L., Deng, Z., Lei, H., Yuan, F., Yang, Y., Li, Y., Yu, J. Research progress on the design and performance of porous titanium alloy bone implants. Elsevier, vol. 23, p. 2626 - 2641, 2023.

Sun, Q-D., Sun, J., Guo, K., Waqar, S., Liu, J-W., Wang, L-S. Influences of processing parameters and heat treatment on microstructure and mechanical behavior of Ti-6Al-4V fabricated using selective laser melting. Springer, vol. 10, p. 520–540, 2022.

Zhang, L.C., e Chen, L-Y. A Review on Biomedical Titanium Alloys: Recent Progress and Prospect. Advanced Engineering Materials, vol. 21, p. 1801215, 2019.

Zhang, L.C., Klemm, D., Eckert, J., Hao, Y.L., Sercombe, T.B. Manufacture by selective laser melting and mechanical behavior of a biomedical Ti–24Nb–4Zr–8Sn alloy. Elsevier, vol. 65, p. 21–24, 2011.