

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

JÉSSICA TITO VIEIRA

**OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO EVOLUTIVA DO TORNEAMENTO  
INTERNO DE TUBOS DE PEEK POR MEIO DE MODELOS DE  
REFORÇO EXTREMO DE GRADIENTE**

TESE

ITAJUBÁ

2024

JÉSSICA TITO VIEIRA

**OTIMIZAÇÃO MULTI OBJETIVO EVOLUTIVA DO TORNEAMENTO  
INTERNO DE TUBOS DE PEEK POR MEIO DE MODELOS DE  
REFORÇO EXTREMO DE GRADIENTE**

**Multi-Objective Evolutionary Optimization of Internal Turning of PEEK  
Tubes through Extreme Gradient Boosting Models**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da Universidade Federal de Itajubá como requisito para obtenção do título de Doutora em Engenharia de Produção - Área de Concentração: Engenharia de Produção.

Orientador: Prof. Dr. João Roberto Ferreira

Coorientador: Prof. Dr. Robson Bruno Dutra  
Pereira

ITAJUBÁ  
2024

*A Deus, o maior orientador da minha vida e aos meus pais Luiz e Joseli, pilares da minha formação como ser humano.*

## AGRADECIMENTOS

Àquele a quem sempre recorreremos nas horas difíceis, a quem devemos nossas vidas e que sempre nos atende. Deus, obrigada pela sabedoria concedida para que fosse possível concluir mais esta etapa.

Agradeço especialmente aos meus pais Luiz Alberto Alves Vieira e Joseli Auxiliadora Tito Vieira pelo apoio imensurável em todos os momentos da minha vida e da minha educação, e por sempre acreditarem na minha capacidade.

Ao meu namorado Henrique, pela força transmitida, pela paciência e pelo amor demonstrado em todo o caminho que já percorremos juntos.

A todos os meus familiares pelo apoio, suporte e por sempre estarem orando por mim.

Ao meu orientador João Roberto Ferreira pelas sábias orientações, por todo conhecimento compartilhado, pelo incentivo, por sempre estar de prontidão, manifestando boa vontade e pelo exemplo de profissional.

Ao meu coorientador Robson Bruno Dutra Pereira pela imensa ajuda na realização do trabalho de doutorado, pela paciência, atenção, amizade, pelas experiências, ensinamentos compartilhados e, sobretudo, pelo respeito e confiança. Serei sempre grata a você.

Aos amigos do grupo de pesquisa CIMS, em especial aos professores Carlos Henrique Lauro e Lincoln Cardoso Brandão e ao técnico Camilo Léllis dos Santos, pelo apoio, pelas ideias, pelo auxílio na condução dos experimentos de torneamento e pelas dicas e sugestões que agregaram muito à pesquisa.

A todos meus amigos em geral, que sempre incentivaram a buscar o novo e sempre tiveram papel importante em aliviar o peso das cobranças do dia a dia com boas risadas e momentos inesquecíveis.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa de Minas Gerais (FAPEMIG), pelo apoio na realização deste trabalho e pela concessão da bolsa de estudos.

À UNIFEI pelo programa de pós-graduação em Engenharia de Produção e por permitir e possibilitar a realização de mais este trabalho de pesquisa. Ao DEMEC/UFSJ pelos laboratórios utilizados durante os ensaios.

*"Não podemos prever o futuro, mas podemos criá-lo." (Paul Pilzer)*

## RESUMO

VIEIRA, Jéssica. **Otimização Multiobjetivo Evolutiva do Torneamento Interno de Tubos de PEEK por meio de Modelos de Reforço Extremo de Gradiente.** 2024. 133 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2024.

O torneamento é um dos processos de usinagem mais utilizados na indústria. Sua grande aplicação faz com que cada vez mais estes processos sejam utilizados para a produção de peças de alta qualidade, buscando associar eficiência, precisão e produtividade. Os desafios de se obter um acabamento de alta precisão são ainda maiores se o torneamento interno for aplicado em materiais modernos como polieterecetonona (PEEK). Para alcançar as melhores condições de processo, os modelos preditivos devem ser estimados e a otimização deve ser realizada. Este trabalho apresenta uma abordagem de aprendizado estatístico para modelagem e otimização do processo de torneamento interno em tubos de PEEK. A rugosidade ( $R_a$ ) e os desvios de circularidade ( $R_{ont}$ ) foram medidos para quantificar a qualidade do furo. Considerado um importante indicador de usinabilidade, a força de corte ( $F_c$ ) também foi medida. A velocidade de corte ( $v_c$ ), taxa de avanço ( $f$ ) e posição de fixação da peça na placa ( $f_p$ ) foram consideradas como parâmetros de entrada. Para modelagem, um procedimento de aprendizado foi proposto considerando regressão de superfície de resposta polinomial, métodos aditivos generalizados, métodos baseados em árvores, regressão de vetores de suporte e o reforço extremo de gradiente. A validação cruzada foi aplicada para aprendizado e seleção de modelos, incluindo abordagens k-dobras e *bootstrap*. Os resultados apontaram que o modelo de reforço extremo de gradiente foi o método que apresentou melhor capacidade de previsão. Para  $R_a$  os resultados finais das métricas de previsão foram  $RMSE = 0,1395$ ,  $MAE = 0,1126$ , e  $R^2 = 1,0000$ , para  $F_c$ ,  $RMSE = 1,8609$ ,  $MAE = 0,9311$ , e  $R^2 = 0,9280$ , e para  $R_{ont}$ ,  $RMSE = 21,3084$ ,  $MAE = 17,8053$ , e  $R^2 = 0,6562$ . A otimização multiobjetivo evolutiva foi realizada considerando os modelos de reforço extremo de gradiente para rugosidade, circularidade, força de corte e o modelo determinístico da taxa de remoção de material ( $MRR$ ). Considerando o hipervolume, o método NSGA-II foi selecionado para realizar as otimizações de três objetivos. A abordagem de pseudopeso foi aplicada para selecionar soluções de alto *trade-off*, facilitando a escolha em cenários práticos de produção. Para otimização  $R_a$  vs  $R_{ont}$  vs  $MRR$ , o equilíbrio entre as três respostas foi alcançado com  $v_c$  mais alto,  $f = 0,12 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 15,14 \text{ mm}$ . Para otimização  $F_c$  vs  $R_{ont}$  vs  $MRR$ , o equilíbrio entre as três respostas foi alcançado com  $v_c = 378,78 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,10 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 13,00 \text{ mm}$ . A abordagem de aprendizado e as otimizações propostas possibilitaram a obtenção dos melhores resultados do processo de torneamento interno no PEEK.

**Palavras-chave:** Torneamento interno, polieterecetonona, aprendizado estatístico, aprendizado de máquina, reforço extremo de gradiente, otimização multiobjetivo evolutiva.

## ABSTRACT

VIEIRA, Jéssica. **Multi-Objective Evolutionary Optimization of Internal Turning of PEEK Tubes through Extreme Gradient Boosting Models**. 2024. 133 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2024.

Turning is one of the most widely used manufacturing processes in the industry. Its extensive application means that turning processes are increasingly focused on producing of high-quality parts, aiming to associate efficiency, precision, and productivity. The challenges of achieving high-precision surface finishes are even greater when internal turning is applied to modern materials such as polyetheretherketone (PEEK). To achieve the best process conditions, predictive models must be estimated, and optimization must be conducted. This work presents a statistical learning approach for modeling and optimizing the internal turning process in PEEK tubes. Average roughness and roundness of the hole were measured to quantify the hole quality. The cutting force, considered an important indicator of machinability, was also measured. Cutting speed, feed rate, and fixture position were considered as input parameters. For modeling, a learning procedure was proposed, considering polynomial response surface regression, generalized additive methods, tree-based methods, support vector regression and extreme gradient boosting. Cross-validation was used for learning and model selection, including k-fold and bootstrap approaches. The results indicated that the extreme gradient boosting model was the best for all predictors. For  $R_a$  the final prediction metrics results were  $RMSE = 0.1395$ ,  $MAE = 0.1126$ , and  $R^2 = 1.0000$ , for  $F_c$ ,  $RMSE = 1.8609$ ,  $MAE = 0.9311$ , and  $R^2 = 0.9280$ , and for  $R_{ont}$ ,  $RMSE = 21.3084$ ,  $MAE = 17.8053$ , and  $R^2 = 0.6562$ . Multi-objective evolutionary optimization was performed, considering the extreme gradient boosting models for average roughness, roundness, and cutting force, in addition to the deterministic model of material removal rate. The NSGA-II method was selected considering the hypervolume for the three-objective optimizations. The pseudo-weight approach is used to select high trade-off solutions, facilitating selection in practical production scenarios. For optimization of  $R_a$  vs  $R_{ont}$  vs  $MRR$ , the balance between the three responses was achieved with a higher  $v_c$ ,  $f = 0.12 \text{ mm}/v$ , and  $f_p = 15.14 \text{ mm}$ . For optimization of  $F_c$  vs  $R_{ont}$  vs  $MRR$ , the balance between the three responses was achieved with  $v_c = 378.78 \text{ m}/min$ ,  $f = 0.10 \text{ mm}/v$ , and  $f_p = 13.00 \text{ mm}$ . The proposed learning and optimization approach enabled the achievement of the best results for the internal turning process in PEEK and can be applied to other intelligent manufacturing applications.

**Keywords:** Internal turning, polyetheretherketone, statistical learning, machine learning, extreme gradient boosting, multi-objective evolutionary optimization.

## LISTA DE FIGURAS

|           |   |  |     |
|-----------|---|--|-----|
| Figura 1  | – | Representação geral do processo de torneamento interno   | 20  |
| Figura 2  | – | Fatores que afetam a tendência de vibrações  | 23  |
| Figura 3  | – | Cilindro do sistema de direção fabricado de TECAPEEK PVX <i>black</i>  | 30  |
| Figura 4  | – | Implante de PEEK no fêmur e na tíbia de um coelho  | 31  |
| Figura 5  | – | Conectores elétricos fabricados em PEEK  | 32  |
| Figura 6  | – | Planejamento CCD   | 38  |
| Figura 7  | – | Representação da amostragem de Faure   | 39  |
| Figura 8  | – | Validação cruzada via k-dobras   | 42  |
| Figura 9  | – | Modelo de árvore de regressão  | 51  |
| Figura 10 | – | Árvores ensacadas para regressão   | 52  |
| Figura 11 | – | (a) Função perda $\varepsilon$ -insensitiva; (b) Modelo de regressão SVR   | 54  |
| Figura 12 | – | Representação do cálculo da distância de aglomeração   | 64  |
| Figura 13 | – | Algoritmo genético de seleção não dominada II (NSGA-II)  | 65  |
| Figura 14 | – | Algoritmo de calibração multiobjetivo por combinação de regras de geração de parâmetros estocásticos e gradientes (caRamel)  | 67  |
| Figura 15 | – | Classificação da pesquisa  | 68  |
| Figura 16 | – | Fluxograma do método   | 69  |
| Figura 17 | – | Centro de torneamento ROMI GL 240-M  | 75  |
| Figura 18 | – | Setup experimental com (a) placa de três castanhas, (b) corpo de prova de PEEK, (c) barra de torneamento, (d) inserto de metal duro, (e) suporte de fixação, (f) dinamômetro e (g) ar comprimido | 76  |
| Figura 19 | – | Posição de fixação do tubo de PEEK na placa  | 77  |
| Figura 20 | – | Experimento de filtragem $F_c$ N <sup>o</sup> 04, $vc = 335$ m/min, $f = 0,17$ mm/v e $f_p = 7$ mm   | 79  |
| Figura 21 | – | Set up para a medição de circularidade e rugosidade  | 80  |
| Figura 22 | – | Resultados da validação cruzada via <i>leave-one-out</i> dos modelos de RSM  | 84  |
| Figura 23 | – | Resultados da validação cruzada via <i>leave-one-out</i> dos modelos de GAM  | 85  |
| Figura 24 | – | Resultados da validação cruzada via k-dobras dos modelos baseado em árvores  | 87  |
| Figura 25 | – | Boxplot do desempenho <i>bootstrap</i> para $Ra$   | 90  |
| Figura 26 | – | Boxplot do desempenho <i>bootstrap</i> para $F_c$  | 90  |
| Figura 27 | – | Boxplot do desempenho <i>bootstrap</i> para $Ront$   | 90  |
| Figura 28 | – | Gráficos de efeitos principais para $Ra$ considerando os modelos de RSM e XGB  | 93  |
| Figura 29 | – | Gráficos de interação para $Ra$ considerando o modelo XGB  | 94  |
| Figura 30 | – | Gráficos de efeitos principais para $F_c$ considerando os modelos de RSM e XGB   | 95  |
| Figura 31 | – | Gráficos de interação para $F_c$ considerando os modelos de RSM e XGB  | 97  |
| Figura 32 | – | Gráficos de efeitos principais para $Ront$ considerando os modelos de RSM e XGB  | 98  |
| Figura 33 | – | Gráficos de interação para $Ront$ considerando os modelos de RSM e XGB   | 99  |
| Figura 34 | – | Importância das variáveis de entrada nos modelos de XGB  | 100 |

|   |     |
|---|-----|
| Figura 35 – Gráficos de contorno para $Ra$ , $F_c$ e $Ront$ considerando o modelo XGB | 101 |
| Figura 36 – MOEA de $Ra$ , $Ront$ e $MRR$ por meio de NSGA-II                         | 103 |
| Figura 37 – Soluções de Pareto para otimização $Ra$ vs $Ront$ vs $MRR$                | 105 |
| Figura 38 – MOEA de $F_c$ , $Ront$ e $MRR$ por meio de NSGA-II                        | 106 |
| Figura 39 – Soluções de Pareto para otimização $F_c$ vs $Ront$ vs $MRR$               | 107 |

## LISTA DE TABELAS

|           |   |   |     |
|-----------|---|---|-----|
| Tabela 1  | – | Validação cruzada via $k$ -dobras para a seleção do <i>kernel</i> SVR | 71  |
| Tabela 2  | – | Hiperparâmetros dos métodos de otimização multiobjetivo               | 73  |
| Tabela 3  | – | Propriedades mecânicas do polímero PEEK                               | 76  |
| Tabela 4  | – | Variáveis de controle e seus níveis                                   | 78  |
| Tabela 5  | – | Planejamento experimental com as respostas                            | 82  |
| Tabela 6  | – | AIC para modelos RSM e GAM  | 83  |
| Tabela 7  | – | Teste de Wilcoxon para os modelos de RSM                              | 84  |
| Tabela 8  | – | Teste de Wilcoxon para os modelos de GAM                              | 86  |
| Tabela 9  | – | Seleção dos hiperparâmetros para SVR.                                 | 87  |
| Tabela 10 | – | Seleção dos hiperparâmetros para XGB                                  | 88  |
| Tabela 11 | – | Desempenho aparente dos métodos                                       | 88  |
| Tabela 12 | – | Desempenho de teste (TP) dos modelos                                  | 89  |
| Tabela 13 | – | Desempenho com otimismo ou viés corrigido dos modelos                 | 91  |
| Tabela 14 | – | Hipervolume (média (std)) dos métodos multiobjetivos                  | 102 |
| Tabela 15 | – | Pseudopesos para soluções Pareto ótimas de $Ra$ , $Ront$ e $MRR$      | 104 |
| Tabela 16 | – | Pseudopesos para $F_c$ vs $Ront$ vs $MRR$                             | 107 |
| Tabela 17 | – | Dados de Treino genéricos, $\mathbf{Z}$                               | 130 |
| Tabela 18 | – | Reamostragem via <i>Bootstrap</i> , $\mathbf{Z}_b^*$                  | 131 |

## LISTA DE SIGLAS

|          |   |
|----------|---|
| CAPES    | Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior   |
| CNPq     | Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico   |
| FAPEMIG  | Fundação de Amparo à Pesquisa de Minas Gerais   |
| UNIFEI   | Universidade Federal de Itajubá   |
| PEEK     | <i>Polyetheretherketone</i> (Polietereetercetona)   |
| RSM      | <i>Response Surface Methodology</i> (Metodologia de Superfície de Resposta)   |
| MRR      | <i>Material Removal Rate</i> (Taxa de Remoção de Material)  |
| DOE      | <i>Design of Experiments</i> (Planejamento de Experimentos)   |
| CCD      | <i>Central Composite Design</i> (Planejamento Composto Central)   |
| MAE      | <i>Mean Absolute Error</i> (Erro Absoluto Médio)  |
| RMSE     | <i>Root Mean Square Error</i> (Raiz do Erro Quadrático Médio)   |
| AIC      | <i>Akaike Information Criteria</i> (Critérios de Informação de Akaike)  |
| GAM      | <i>Generalized Additive Models</i> (Modelos Aditivos Generalizados)   |
| GLM      | <i>Generalized Linear Models</i> (Modelos Lineares Generalizados)   |
| BAG      | <i>Bagging - Bootstrap Aggregated</i> (Árvores Ensacadas)   |
| RF       | <i>Random Forest</i> (Floresta Aleatória)   |
| SVR      | <i>Support Vector Regression</i> (Máquinas de Vetores de Suporte para Regressão)  |
| GBM      | <i>Gradient Boosting Machine</i> (Máquinas de Reforço por Gradiente)  |
| XGB      | <i>Extreme Gradient Boosting</i> (Máquinas de Reforço Extremo de Gradiente)   |
| MOEA     | <i>Multiobjective Evolutionary Algorithm</i> (Algoritmo Multiobjetivo Evolutivo)  |
| PSO      | <i>Particle Swarm Optimization</i> (Método de Otimização de Enxame de Partículas)   |
| MOPSO    | <i>Multi-Objective Particle Swarm Optimization</i> (Otimização Multiobjetivo por Enxame de Partículas)  |
| MOPSO-CD | <i>Multi-Objective Particle Swarm Optimization with Crowding Distance</i> (Otimização de Enxame de Partículas Multiobjetivo com Distância de Aglomeração)   |
| NSGA-II  | <i>Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II</i> (Algoritmo Genético de Seleção Não Dominada II)   |
| caRamel  | <i>Multi-objective Calibration by Combination of Stochastic and Gradient-like Parameter Generation Rules</i> (Calibração multiobjetivo por combinação de regras de geração de parâmetros estocásticos e gradientes) |
| DEMEP    | Departamento de Engenharia Mecânica e Produção  |
| UFSJ     | Universidade Federal de São João del-Rei  |

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Símbolos do Processo de Torneamento Interno

|       |  |
|-------|--|
| $v_c$ | velocidade de corte [ $m/min$ ]                          |
| $f$   | avanzo [ $mm/v$ ]  |
| $f_p$ | posição de fixação da peça na placa [ $mm$ ]             |
| $D$   | diâmetro do suporte da ferramenta de corte [ $mm$ ]      |
| $L$   | comprimento em balanço do suporte da ferramenta [ $mm$ ] |
| $n$   | número de rotações por minutos [ $rpm$ ]                 |
| $D_w$ | diâmetro interno do furo [ $mm$ ]                        |
| $v_f$ | velocidade de avanço [ $mm/min$ ]                        |
| $F_p$ | força passiva [ $N$ ]                                    |
| $E$   | módulo de elasticidade de <i>Young</i> [ $GPa$ ]         |
| $I$   | momento de inércia [ $kg \cdot m^2$ ]                    |
| $Ra$  | rugosidade média [ $\mu m$ ]                             |
| $RSm$ | distância entre os sulcos deixados na peça [ $mm$ ]      |
| $Rz$  | rugosidade Máxima [ $\mu m$ ]                            |
| $Rq$  | desvio médio quadrático [ $\mu m$ ]                      |
| $Rt$  | rugosidade total [ $\mu m$ ]                             |
| $F_c$ | força de corte [ $N$ ]                                   |
| $k_s$ | pressão específica de corte [ $Pa$ ]                     |
| $A$   | área da seção de corte [ $mm^2$ ]                        |
| $a_p$ | profundidade de usinagem [ $mm$ ]                        |

### Símbolos do Planejamento de Experimentos

|                           |  |
|---------------------------|--|
| $y$                       | resposta de interesse                                  |
| $x_1, \dots, x_k$         | conjunto de variáveis independentes, $i = 1, \dots, k$ |
| $\beta_1, \dots, \beta_k$ | coeficientes de regressão, $i = 1, \dots, k$           |
| $k$                       | número de variáveis independentes                      |
| $\epsilon$                | vetor do erro experimental                             |
| $n_c$                     | número de pontos centrais                              |
| $\rho$                    | raio da região experimental de um CCD                  |
| $m$                       | número primo para gerar amostragem de Faure            |
| $n$                       | tamanho da amostra                                     |

### Símbolos Gerais do Aprendizado Estatístico para Regressão

|                               |                                    |
|-------------------------------|------------------------------------|
| $\hat{f}(\mathbf{x}, \alpha)$ | modelo de regressão                |
| $k$                           | números de partições               |
| $\alpha$                      | hiperparâmetro de ajuste do modelo |
| $N$                           | número de eventos de treinamento   |

|                        |   |
|------------------------|---|
| $\mathbf{Z}$           | conjunto de treinamento <i>bootstrap</i>  |
| $B$                    | número de modelos de treinamento          |
| AP                     | desempenho aparente                       |
| BP                     | desempenho <i>bootstrap</i>               |
| TP                     | desempenho do teste                       |
| Opt                    | otimismo                                  |
| OCP                    | otimismo corrigido                        |
| $R_{aj}^2$             | coeficiente de determinação ajustado      |
| $C_p$                  | medida de capacidade                      |
| $R^2$                  | coeficiente de determinação               |
| $\hat{y}$              | valores previstos para a resposta $y$     |
| $\bar{y}$              | média dos valores reais para resposta $y$ |
| $\sigma_\varepsilon^2$ | verossimilhança da variância dos resíduos |
| $K$                    | número de parâmetros do modelo            |
| $n$                    | número de observações                     |

### Símbolos do Modelo Aditivo Generalizado

|             |  |
|-------------|--|
| $h_m(x)$    | transformação de $x$ , $m = 1, \dots, M$ |
| $m$         | número de transformação de $x$           |
| $t_+$       | região positiva do domínio               |
| $p$         | número de regiões                        |
| $g$         | número de nó                             |
| $\lambda$   | termo de penalização                     |
| $S_j$       | <i>spline</i> cúbica, $j = 1, \dots, k$  |
| $\hat{f}_j$ | estimativa do preditor                   |

### Símbolos dos Métodos Baseados em Árvores

|            |  |
|------------|--|
| $J$        | números de regiões   |
| $\gamma_j$ | constante em cada região, $j = 1, \dots, J$                    |
| $x_k$      | variáveis, $k = 1, \dots, k$                                   |
| $s$        | valor da variável na divisão                                   |
| $B$        | número de conjunto de treinamento obtidos por <i>bootstrap</i> |
| $m$        | número de preditores   |

### Símbolos da Máquina de Vetores de Suporte

|                                 |                           |
|---------------------------------|---------------------------|
| $C$                             | termo de regularização    |
| $\varepsilon$                   | função perda              |
| $\alpha_i$                      | multiplicador de Lagrange |
| $\alpha_i^*$                    | multiplicador de Lagrange |
| $\eta_i$                        | multiplicador de Lagrange |
| $\eta_i^*$                      | multiplicador de Lagrange |
| $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ | <i>kernel</i>             |

## Símbolos do Aprendizado por Reforço

|          |  |
|----------|--|
| $M$      | número total de iterações                                      |
| $m$      | número de iterações, $m = 1, \dots, M$                         |
| $r_{im}$ | pseudo-resíduos, $i = 1, \dots, N$                             |
| $\Omega$ | termo de regularização   |
| $\rho$   | mínima perda necessária para fazer uma divisão ou nó na árvore |
| $R_l$    | particionamento à esquerda                                     |
| $R_r$    | particionamento à direita                                      |
| $\eta$   | taxa de aprendizagem   |

## Símbolos da Otimização Multiobjetivo Evolutiva

|                          |  |
|--------------------------|--|
| $m$                      | número de funções objetivo                         |
| $\Omega$                 | espaço de decisão $k$ -dimensional                 |
| $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ | vetor de funções objetivo                          |
| $\mathbf{x}^*$           | solução Pareto-ótima                               |
| $\mathbf{P}_s$           | conjunto de soluções Pareto-ótimo                  |
| $\mathbf{P}_f$           | fronteira de Pareto                                |
| $\mathcal{L}(\cdot)$     | medida de Lebesgue                                 |
| $P_t$                    | população inicial, $t = 1, \dots, N$               |
| $N$                      | tamanho da população                               |
| $Q_t$                    | conjunto de $N$ indivíduos gerados na iteração $t$ |
| $R_t$                    | população completa na iteração $t$                 |
| $F_1, \dots, F_j$        | fronteiras de Pareto                               |
| $r_j$                    | medida de ordenação                                |

## SUMÁRIO

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| <b>1</b> | <b>INTRODUÇÃO</b>  | <b>12</b>  |
| 1.1      | CONTEXTO DA PESQUISA   | 12         |
| 1.2      | OBJETIVOS  | 14         |
| 1.2.1    | Objetivo Geral   | 14         |
| 1.2.2    | Objetivos Específicos  | 14         |
| 1.3      | CONTRIBUIÇÃO CIENTÍFICA E JUSTIFICATIVA  | 15         |
| 1.4      | DELIMITAÇÕES DO ESTUDO   | 17         |
| 1.5      | ESTRUTURA DO TRABALHO  | 17         |
| <b>2</b> | <b>REVISÃO DA LITERATURA</b>   | <b>19</b>  |
| 2.1      | TORNEAMENTO INTERNO  | 19         |
| 2.2      | POLIETERETERCETONA (PEEK)  | 29         |
| 2.3      | PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS   | 36         |
| 2.4      | ABORDAGENS DE APRENDIZADO ESTATÍSTICO PARA REGRESSÃO   | 39         |
| 2.4.1    | Validação cruzada  | 41         |
| 2.4.1.1  | Validação cruzada via k-dobras   | 42         |
| 2.4.1.2  | Validação cruzada via <i>Bootstrap</i>   | 43         |
| 2.4.2    | Modelos aditivos generalizados   | 47         |
| 2.4.3    | Métodos baseados em árvores  | 50         |
| 2.4.4    | Máquina de vetores de suporte  | 54         |
| 2.4.5    | Aprendizado por Reforço  | 57         |
| 2.5      | MÉTODOS EVOLUTIVOS DE OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO   | 61         |
| 2.5.1    | Otimização multiobjetivo por enxame de partículas (MOPSO-CD)   | 63         |
| 2.5.2    | Algoritmo genético de ordenação não-dominado II (NSGA-II)  | 64         |
| 2.5.3    | Algoritmo CaRamel  | 66         |
| <b>3</b> | <b>MÉTODO DE APRENDIZADO ESTATÍSTICO E OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO EVOLUTIVA DO TORNEAMENTO INTERNO DE PEEK</b> | <b>68</b>  |
| <b>4</b> | <b>PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL</b>   | <b>75</b>  |
| 4.1      | EQUIPAMENTOS E MATERIAIS PARA OS ENSAIOS DE TORNEAMENTO INTERNO  | 75         |
| 4.2      | VARIÁVEIS DE CONTROLE, RESPOSTAS E PROCEDIMENTOS DE MEDIÇÃO  | 77         |
| <b>5</b> | <b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>  | <b>81</b>  |
| 5.1      | AJUSTE DOS MÉTODOS SEPARADAMENTE VIA VALIDAÇÃO CRUZADA   | 83         |
| 5.2      | COMPARAÇÃO DO MODELOS  | 88         |
| 5.3      | INTERPRETAÇÃO DOS MODELOS  | 92         |
| 5.4      | OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO EVOLUTIVA   | 102        |
| <b>6</b> | <b>CONCLUSÕES</b>  | <b>109</b> |
| <b>7</b> | <b>SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</b>  | <b>111</b> |
|          | REFERÊNCIAS  | 112        |

|  |     |
|--|-----|
| Apêndice A – ETAPAS DA ESTIMATIVA DO DESEMPENHO NA<br>VALIDAÇÃO CRUZADA VIA <i>BOOTSTRAP</i> ..... | 130 |
| Apêndice B – ARTIGOS PUBLICADOS PELA AUTORA DA TESE<br>DURANTE O DOUTORADO .....                   | 132 |

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 CONTEXTO DA PESQUISA

Para se tornar competitivo, o desenvolvimento de melhores produtos, com baixo custo e alta qualidade é necessário (PARK et al., 2020). A indústria metal-mecânica de bens de consumo frequentemente utiliza componentes que passaram pelo processo de torneamento, seja para a fabricação total, parcial ou para a elaboração apenas de detalhes especiais, como regiões cilíndricas ou cônicas.

O torneamento interno busca obter furos com superfícies acabadas e precisão dimensional. No processo de torneamento interno, alcançar a qualidade desejada das superfícies é mais complicado do que no processo de torneamento externo porque a usinagem de regiões internas geralmente requer uma ferramenta com maior comprimento em balanço, que é o elemento mais flexível do sistema. Em algumas situações, o comprimento da ferramenta/suporte é o principal responsável pela ocorrência de vibrações na usinagem, podendo interferir na qualidade superficial da peça torneada. Contudo, a qualidade de uma operação de usinagem interna é determinada pela rigidez, estática e dinâmica, do sistema composto por máquina, sistema de fixação, ferramenta e peça (SUYAMA et al., 2016).

A maioria das aplicações de usinagem interna necessita de uma tolerância geométrica e de uma qualidade superficial específica para o bom funcionamento do componente; caso essas especificações não sejam atingidas, danos e prejuízos podem ser gerados (DINIZ et al., 2019). Alcançar a qualidade superficial e a tolerância geométrica desejada no torneamento interno de PEEK é mais complexo em comparação com o processo de torneamento externo. Os produtos fabricados com o tubo PEEK podem suportar temperaturas de serviço na faixa de  $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $260\text{ }^{\circ}\text{C}$ , mantendo a alta resistência mecânica (KARNIK et al., 2008). Devido a essas e outras características, o PEEK é classificado como um material inovador que apresenta grande aplicação em diversos setores industriais. Na indústria aeroespacial, por exemplo, onde a redução do peso é necessária, dependendo do diâmetro dos tubos, o peso pode ser reduzido em até 65% em comparação ao aço inoxidável, 45% em comparação ao titânio e 30% em comparação ao alumínio (SMALL, 2014). Esse termoplástico vem substituindo o alumínio devido ao seu excelente desempenho em altas temperaturas (FANG et al., 2019).

No torneamento, as ferramentas de corte e as condições de corte são os principais

parâmetros que afetam a usinabilidade do PEEK e seus compósitos (ÖZDEN et al., 2021). Assim, modelos adequados para prever as características de saída devem ser desenvolvidos. A modelagem e otimização do processo de torneamento interno são úteis para selecionar os níveis ideais de condições de corte para alcançar a estabilidade do processo e, conseqüentemente, a capacidade de atender às especificações do produto (VIEIRA et al., 2021).

Nesse sentido, muitos estudos têm sido realizados a fim de otimizar os parâmetros de usinagem e auxiliar na tomada de decisão. Saha et al. (2022) visaram encontrar um conjunto de soluções ótimas de temperatura de corte e rugosidade da peça no torneamento duro de ligas de aço 42CrMo4 na condição de refrigeração em alta pressão. Abolghasem e Mancilla-Cubides (2022) otimizaram a qualidade e a produtividade do processo de torneamento. Eles desenvolveram um modelo preditivo e de otimização acoplando Redes Neurais Artificiais e a técnica de otimização multiobjetivo *Particle Swarm Optimization*, como uma alternativa para prever a rugosidade média e, então, buscaram o valor ótimo dos parâmetros de torneamento para minimizar a rugosidade da peça e maximizar a taxa de remoção de material. Umer e Al-Ahmari (2022) estudaram a modelagem 3D do desgaste da ferramenta e otimização do torneamento duro considerando o raio da aresta de corte e raio de ponta. A otimização multiobjetivo foi realizada considerando meta-modelos baseados em funções de base radial. Um modelo 3D de elementos finitos foi desenvolvido, considerando a geometria da ferramenta, e verificado através de resultados experimentais. O modelo foi capaz de prever a morfologia do cavaco, componentes de força, desgaste da ferramenta, tensões e distribuições de temperatura.

Em processos de fabricação multiobjetivo, a modelagem e otimização são tarefas desafiadoras devido às inúmeras respostas a serem consideradas quanto à qualidade do produto, estabilidade e eficiência do processo (MELO et al., 2022). A experimentação baseada em um planejamento estatístico é uma abordagem eficaz para modelagem e otimização, que tem sido aplicada na melhoria de produtos e processos há décadas. No entanto, os métodos de modelagem paramétrica tradicional, especialmente aqueles baseados na regressão polinomial de segunda ordem por mínimos quadrados, popularmente conhecidos como métodos de superfície de resposta, podem não ser suficientes para a modelagem de processos que apresentem padrões complexos de não linearidade.

Neste contexto, para obter a melhor aproximação das respostas e dos parâmetros do processo, o presente trabalho propõe a modelagem realizada por meio de uma abordagem de aprendizado estatístico. O aprendizado estatístico é um ramo da inteligência artificial

baseado na ideia de que sistemas podem aprender com dados, identificar padrões, ajudar na obtenção de melhores resultados de previsão e na tomada de decisão. Nesta abordagem, alguns métodos de aprendizado estatístico serão comparados com a metodologia de superfície de resposta e o melhor modelo será selecionado para a otimização multiobjetivo. Empregar a abordagem proposta com sucesso no processo de torneamento interno de tubos PEEK poderá melhorar a qualidade e produtividade da usinagem interna desse material.

Com base nesse contexto, aplicar a abordagem de aprendizado estatístico e otimizar o processo de torneamento interno de tubos de PEEK proporcionará aos setores aeroespacial, automotivo, petróleo e gás, e médico competitividade e redução de custos de fabricação, permitindo ao engenheiro explorar cenários do processo e escolher o mais adequado para atender a cada situação de planejamento.

## 1.2 OBJETIVOS

Uma vez realizada a contextualização e a definição do problema de pesquisa, a seguir, são definidos os objetivos geral e específicos deste trabalho.

### 1.2.1 Objetivo Geral

Esta pesquisa tem como objetivo geral a modelagem e otimização do processo de torneamento interno de tubos PEEK através da abordagem do aprendizado estatístico, permitindo explorar vários cenários de processos para aplicação em setores aeroespacial, petróleo e gás, automotivo e médico.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

- Investigar o processo de torneamento interno para obtenção de furos de maior qualidade em tubos de PEEK;
- Realizar experimentos planejados do processo de torneamento interno de tubos de PEEK;
- Medir a qualidade do furo através da rugosidade média e da circularidade total;
- Melhorar a produtividade do processo, almejando alta produtividade, mas mantendo a qualidade;

- Definir métodos de regressão para serem aplicados na abordagem de aprendizado estatístico;
- Otimizar os hiperparâmetros dos métodos de regressão via validação cruzada *k*-dobra e *leave-one-out*;
- Comparar os métodos de regressão via validação cruzada *bootstrap* e selecionar o melhor método;
- Aplicar métodos de otimização multiobjetivo evolutivos e escolher o melhor método;
- Obter soluções Pareto ótimas a partir da abordagem pseudopeso que facilite a seleção em cenários planejados do processo de torneamento interno de tubos de PEEK.

### 1.3 CONTRIBUIÇÃO CIENTÍFICA E JUSTIFICATIVA

O estudo do processo de torneamento interno em tubos de PEEK pode ter diversas contribuições científicas significativas, que vão desde o avanço do conhecimento até melhorias práticas na indústria e em setores de alta tecnologia. Conforme mencionado anteriormente, o torneamento interno apresenta maiores desafios quando comparado ao torneamento externo. Dessa forma, o presente estudo pode impulsionar a inovação na indústria, tornando as empresas mais competitivas ao melhorar a qualidade dos produtos e reduzir custos de produção.

O PEEK é um polímero semicristalino de alto desempenho e resistente à alta temperatura, considerado um dos termoplásticos de excelência (YANG et al., 2017a). É frequentemente usado como substituto de metais em uma ampla variedade de aplicações de alto desempenho, como carros, aeronaves, bombas industriais, e etc (ZALAZNIK et al., 2016). Estudos sobre o processo de torneamento interno, principalmente em tubos de PEEK, são escassos. Esses estudos são importantes, uma vez que as peças de PEEK incluem anéis de apoio, arruelas de encosto, sedes de válvulas esféricas, sedes de válvulas borboleta, vedações de anéis de pistão, vedações de eixo rotativo, vedações energizadas por mola, vedações de lábio e outros. As aplicações abrangem os setores automotivo, petróleo e gás, saúde, esportes, entre outros. Apesar das geometrias iniciais poderem ser obtidas através da injeção de plástico, as peças acabadas e as tolerâncias rigorosas devem ser obtidas através da usinagem. No caso de superfícies revolvidas de revolução internas das peças mencionadas, o torneamento interno é uma operação de acabamento adequada.

Através da investigação do torneamento interno do PEEK, a otimização dos parâmetros do processo pode ser alcançada.

Dessa forma, otimizar o processo de torneamento interno de tubos de PEEK proporcionará à indústria de diversos setores a redução de custos de fabricação. Estudar os efeitos das variáveis de processo nas respostas de interesse é fundamental para viabilizar a correta escolha dos níveis dos parâmetros. A modelagem possibilita a previsão dos níveis de qualidade no processo, possibilitando ao engenheiro antecipar as características do processo e do furo obtido, de forma a atender bem às especificações de projeto.

A metodologia de superfície de resposta (RSM- *Response Surface Methodology*) tem sido amplamente aplicada para modelagem de processos para permitir a otimização. Como os modelos RSM são de regressão múltipla de segunda ordem, eles são baseados na estimativa paramétrica clássica. Os métodos de modelagem paramétrica tradicional, especialmente aqueles dedicados à regressão polinomial de segunda ordem por mínimos quadrados, popularmente conhecidos como métodos de superfície de resposta, podem não ser suficientes para algumas tarefas de modelagem de processos que apresentam padrões não lineares complexos. Por isso, torna-se mais apropriado empregar métodos estatísticos/computacionais de modelagem mais poderosos para obter os melhores modelos de aproximação em relação aos dados disponíveis. Os métodos de aprendizado estatístico se concentram na estimativa de modelos não paramétricos com boa capacidade de generalização. Nesse sentido, especificamente para o processo de torneamento interno em tubos de PEEK, aplicar a abordagem de aprendizado estatístico de forma adequada torna-se um desafio.

Para corroborar a importância do presente trabalho, foram selecionadas palavras-chave relevantes, sendo elas: *multi-objective optimization; internal turning; polyetheretherketone; machine learning e statistical learning*, de modo a representar os conceitos essenciais abordados na pesquisa. Realizou-se duas buscas com as palavras-chaves selecionadas nas bases de dados *Scopus* e *Web of Science*, consideradas relevantes para o campo de estudo. As consultas envolveram inserir as palavras-chave e o operador lógico "AND" nas caixas de pesquisa das bases de dados, para garantir que os termos relevantes fossem pesquisados juntos. Nenhum documento foi encontrado em ambas bases de dados.

## 1.4 DELIMITAÇÕES DO ESTUDO

A presente tese é limitada à análise, modelagem e otimização do processo de torneamento interno em tubos de PEEK. Entretanto, também pode fornecer um escopo de possibilidades para estudar o torneamento interno em outros materiais. Foi utilizada apenas um tipo ferramenta, sem mudar o material e geometria, e foram estudados os esforços de corte, rugosidade, desvio geométrico e taxa de remoção de material como respostas, não sendo avaliada as vibrações, os custos do processo, entre outras respostas.

É importante afirmar que a principal contribuição da tese é a abordagem de modelagem de aprendizado, na qual foram aplicados os métodos de regressão mais recentes, capazes e modernos com abordagens de validação cruzada. No futuro, outras abordagens de aprendizado podem ser exploradas. O algoritmo genético de seleção não dominada II (NSGA-II), a otimização de enxame de partículas multiobjetivo com distância de aglomeração (MOPSO-CD) e a calibração multiobjetivo por combinação de regras de geração de parâmetros estocásticos e gradientes (caRamel) são os métodos aplicados na otimização multiobjetivo, sendo bem descritos. Os resultados não foram comparados com outros métodos. Estudos futuros envolvendo o arranjo cruzado podem ser interessantes com a finalidade de estudar a robustez do processo de torneamento interno em tubos de PEEK, utilizando modelos de aprendizado estatístico para aproximar a média e variância.

## 1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO

Este trabalho foi dividido em seis capítulos, apresentados conforme a descrição abaixo:

1. Capítulo 1 - Introdução: contextualização sobre o tema estudado com informações sobre os objetivos e a estrutura do trabalho.
2. Capítulo 2 - Revisão da literatura: informações técnico-científicas e características do processo de torneamento interno, e do PEEK, contextualização sobre aprendizado estatístico e sobre os métodos de otimização utilizados.
3. Capítulo 3 - Método: metodologia e as etapas da abordagem de aprendizado estatístico empregada.
4. Capítulo 4 - Procedimento Experimental: apresenta o procedimento experimental, destacando o material empregado, as ferramentas, os sistemas de fixação, as máquinas

e equipamentos utilizados para execução dos experimentos. Também são descritas as variáveis de processo e respostas analisadas.

5. Capítulo 5 - Resultados e Discussão: as respostas são modeladas por meio da abordagem de aprendizado estatístico, os modelos são comparados através da validação cruzada, o melhor modelo é selecionado e os resultados são confrontados com a literatura. Realização da otimização multiobjetivo evolutiva e as soluções ótimas de Pareto obtidas são apresentadas para as respostas de rugosidade média, circularidade total, força de corte e taxa de remoção do material do processo de torneamento interno.
6. Capítulo 6 - Conclusões: apresenta as conclusões evidenciadas por meio dos resultados obtidos na otimização multiobjetivo evolutiva do processo de torneamento interno do PEEK.
7. Referências: fontes bibliográficas na forma de artigos, teses, dissertações, manuais, sites, normas, etc. utilizadas no desenvolvimento deste trabalho.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo apresenta uma revisão da literatura sobre os principais conceitos para o desenvolvimento do processo de torneamento interno em tubos de PEEK, expõe as características e propriedades do PEEK, apresenta abordagem de aprendizado estatístico, como validação cruzada, modelos aditivos generalizados, métodos baseados em árvores, máquina de vetores de suporte e aprendizado por reforço, e apresenta os métodos de otimização multiobjetivo.

### 2.1 TORNEAMENTO INTERNO

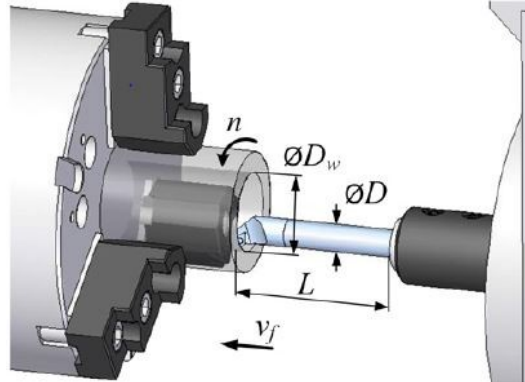
O torneamento interno é um processo de usinagem largamente aplicado para ampliar furos inicialmente feitos por meio de furação, extrusão ou injeção plástica (LAWAL et al., 2016). Esse processo tem sido aplicado na fabricação de furos profundos em eixos de motores a jato e trem de pouso (ÖSTLING et al., 2018), em cano de arma (LAWAL et al., 2016), em furos de peças de turbinas a gás (NGUYEN et al., 2018), em furos de matrizes de metal duro usadas para forjar latas de cerveja (COPPINI et al., 2018), em montagem de peças de aeronaves (GUO et al., 2016) e para minimizar erros de furos e garantir precisão das peças. Como o processo de torneamento interno é uma das últimas operações de usinagem na cadeia produtiva, a peça torneada apresenta alto valor agregado, considerando os custos de material e operações anteriores (SØRBY; SUNDSETH, 2015). Apesar de existirem outras possibilidades de ampliação para furos, o processo de torneamento interno ainda assim é atraente, pois possui baixo custo, boa flexibilidade e adaptabilidade (HAN et al., 2019).

O processo de torneamento interno difere do processo de torneamento externo em vários pontos. No torneamento externo, uma ferramenta é normalmente curta e rigidamente fixada, enquanto nas operações de torneamento interno, a ferramenta utilizada é longa e com alto comprimento em balanço. Dessa forma, torna-se bastante dinâmico, complicado e dependente dos fatores do processo atingir uma rugosidade adequada e minimizar os erros de forma no torneamento interno (MUNAWAR et al., 2011). No entanto, devido ao alto comprimento em balanço da ferramenta para fabricar furos profundos (DINIZ et al., 2019) e também devido ao diâmetro da barra de torneamento, restringido pelo diâmetro do pré-furo (ANDREN et al., 2004), a relação comprimento/diâmetro ( $L/D$ ) é um fator limitante para eficiência da usinagem (LAWAL et al., 2016). Em condições de

$L/D$  superiores a quatro, a vibração autoexcitada pode ocorrer no processo (SONG et al., 2016) e (SUYAMA et al., 2017). A vibração é um fenômeno extremamente indesejado nos processos de usinagem, pois reduz a taxa de remoção de material, prejudica a qualidade da superfície e acelera o desgaste da ferramenta de corte (BASOVICH; AROGETI, 2021). Como consequência da instabilidade, a presença de elevadas forças de corte e vibração, redução da vida da ferramenta, baixa qualidade da superfície e baixa precisão dimensional podem surgir no processo de torneamento interno (YIGIT et al., 2017). Portanto, reduzir a vibração é crucial para alcançar alta produtividade, qualidade desejada do furo e baixos custos de usinagem.

Na Figura 1 são apresentados os fatores que influenciam o processo de torneamento interno: o diâmetro do suporte da ferramenta de corte ( $D$ ) em [mm], o comprimento em balanço do suporte da ferramenta ( $L$ ) em [mm], os parâmetros de corte como o número de rotações por minutos ( $n$ ) em [rpm], o diâmetro interno do furo ( $D_w$ ) em [mm] e a velocidade de avanço ( $v_f$ ) em [mm/min]. Esses fatores devem ser adequadamente selecionados para uma melhor qualidade da peça torneada.

**Figura 1 – Representação geral do processo de torneamento interno**



Fonte: Sortino et al. (2012)

A utilização de um sistema rígido evita as vibrações que podem causar danos à usinagem interna. Contudo, a qualidade desta operação é determinada pela rigidez estática e dinâmica do sistema composto por máquina, sistema de fixação, ferramenta e peça (TEWANI et al., 1995).

Uma das principais causas de vibração no torneamento interno é a deflexão da ferramenta. A barra de torção assemelha-se a uma viga elástica engastada em uma de suas pontas e submetida a esforço na outra. A deflexão de uma barra de torneamento pode ser calculada de acordo com a Equação 1, onde ( $F_p$ ) é a força passiva que atua no

ponto de corte da ferramenta em  $[N]$ ,  $(L)$  é o comprimento em balanço da ferramenta em  $[mm]$ ,  $(E)$  é o módulo de elasticidade de *Young* em  $[GPa]$  e  $(I)$  é o momento de inércia em  $[kg \cdot m^2]$ . Portanto, abordagens distintas podem ser aplicadas para reduzir essa deflexão e, conseqüentemente, reduzir a vibração. Por exemplo, a seleção de parâmetros de corte pode reduzir a força passiva e, conseqüentemente, a deflexão da ferramenta (SØRBY; ØSTLING, 2018), reduzir o comprimento em balanço da ferramenta (PAUL et al., 2014), aplicar materiais com alto módulo de *Young*, como barras de metal duro (SUYAMA et al., 2017) e aplicação de ferramentas com geometrias de seção transversal modificadas para aumentar o momento de inércia também pode ser eficaz na redução da deflexão da ferramenta (GHORBANI et al., 2019).

$$\delta = \frac{(F_p L^3)}{3EI} \quad (1)$$

A redução do comprimento em balanço da ferramenta nem sempre pode ser aplicada, pois deve ser definida de acordo com a profundidade do furo a ser fabricado. Logo, em algumas situações, o comprimento em balanço da ferramenta não é definido pelo engenheiro, mas é determinado pelas especificações do produto. No entanto, em algumas situações em que é necessário um maior comprimento em balanço da ferramenta, pode ser difícil obter um bom desempenho no processo de torneamento interno (DINIZ et al., 2019).

Vários autores têm estudado o efeito do comprimento em balanço da ferramenta no torneamento interno. Paul et al. (2014) estudaram o efeito do comprimento em balanço da ferramenta na vibração com e sem amortecedores. Eles alcançaram o nível ideal do comprimento em balanço da ferramenta para minimizar a deflexão da ferramenta. Totis e Sortino (2014) propuseram um novo algoritmo probabilístico para uma análise robusta da estabilidade no torneamento interno. Eles investigaram a relação máxima entre o comprimento em balanço e o diâmetro da barra que garante a estabilidade do processo, considerando diferentes combinações de geometria e material da barra, condições de corte e material da peça. Suyama et al. (2016) estudaram a aplicação de barras de metal duro e amortecedores de partículas no torneamento interno de furos longos de peças de aço temperado. Os autores estudaram combinações distintas de material do porta-ferramentas e a aplicação de amortecedores de partículas para atingir o comprimento máximo em balanço da ferramenta. Liu et al. (2017) projetaram um absorvedor de vibração dinâmico de rigidez variável e estudaram o efeito do balanço da ferramenta e da frequência de excitação na razão de vibração. Os autores discutiram o ajuste do comprimento em

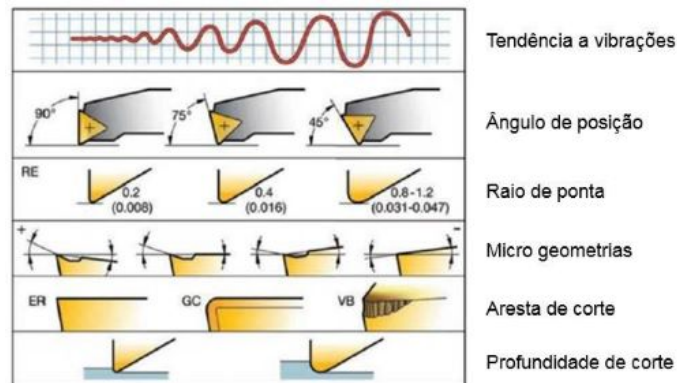
balanço da ferramenta em conjunto com as condições de corte para atingir a menor razão de vibração.

Singh et al. (2018) estudaram o efeito de barras de torneamento amortecidas por partículas, condições de corte e comprimento em balanço da ferramenta na rugosidade e no desgaste de flanco. Os resultados confirmaram o efeito estatisticamente significativo positivo do comprimento em balanço da ferramenta na rugosidade. Fallah e Moetakef-Imani (2019) propuseram um sistema adaptativo de controle de vibração para torneamento interno. O alto desempenho do sistema de controle proposto com um atuador eletromagnético e algoritmo de controle adaptativo reduziu as vibrações em barras de torneamento com longos balanços. Aguiar et al. (2020) propuseram o uso do amortecimento de partículas auxiliado pelo fluxo de ar para reduzir a rugosidade da peça no torneamento interno. Os autores mostraram o benefício da aplicação de amortecedor de partículas com fluxo de ar para reduzir a rugosidade com alto comprimento em balanço da ferramenta.

Diferentes abordagens têm sido propostas para atenuar a vibração e obter estabilidade no processo de torneamento interno. Apesar de vários trabalhos sugerirem mecanismos de amortecimento, a seleção de níveis ideais de condições de corte também pode melhorar este processo (MUNAWAR et al., 2011). O limite de estabilidade do torneamento interno depende não apenas da barra de torneamento, do dispositivo de fixação e da máquina-ferramenta, mas também das condições de corte selecionadas (KUSTER; GYGAX, 1990). Ramesh et al. (2019) concluíram que a combinação ideal de parâmetros de corte melhora a força de corte e a vida da ferramenta no torneamento interno. A modelagem e otimização do processo de torneamento interno são essenciais na seleção dos níveis ideais de condições de corte para alcançar a estabilidade do processo e, conseqüentemente, a capacidade de atender às especificações do produto.

Além dos pontos básicos, como diâmetro máximo da barra, o menor comprimento em balanço da barra e escoamento eficiente de cavacos, as características especiais das ferramentas precisam ser consideradas de modo a munir a barra de torneamento interno com todos os recursos contra a tendência a vibrações, especialmente quando as tolerâncias são estreitas e o acabamento da peça é fundamental. Na Figura 2 são apresentados alguns fatores que afetam a tendência de vibrações.

**Figura 2 – Fatores que afetam a tendência de vibrações**



**Fonte: Sandvik (2017)**

Para o torneamento interno, recomenda-se um ângulo de posição próximo a  $90^\circ$  e nunca inferior a  $75^\circ$ . Quanto mais próximo de  $90^\circ$  o ângulo de posição da aresta principal, mais baixas serão as forças de corte necessárias para usinar a peça. Forças de corte menores implicam em menor deflexão, sendo que menor força na direção radial resulta em menor deflexão radial. Na escolha da micro e macro geometria da ferramenta, indica-se o uso de uma pastilha de formato básico. Entretanto, outro fator que pode interferir nas vibrações é o desgaste da ferramenta, pois a folga entre a pastilha e a parede do furo é modificada e isso pode afetar a ação de corte e causar vibrações. As pastilhas com coberturas finas são as mais recomendadas, visto que podem reduzir as forças de corte (SANDVIK, 2017). Portanto, a escolha adequada dos parâmetros de processo é importante, pois determina o desempenho do corte, as precisões dimensionais e a qualidade superficial da peça usinada.

A qualidade da superfície usinada é uma característica que depende de uma variedade de fatores, como os parâmetros de usinagem, a seleção da ferramenta e outros elementos específicos do processo. A rugosidade pode ser definida como um conjunto de irregularidades finas, resultantes da ação inerente do processo de corte. Portanto, a rugosidade consiste em erros microgeométricos existentes nas superfícies das peças, provenientes do processo de fabricação (GADELMAWLA et al., 2002). A rugosidade influencia significativamente o desempenho das peças em trabalho. A presença de irregularidades na superfície resultante de processos de torneamento implica em uma ampla gama de impactos em diversas aplicações de engenharia. A qualidade superficial das peças usinadas é conhecida por ter uma influência significativa no desgaste, na resistência à fadiga do componente e nos custos de produção (MIKOLAJCZYK, 2014). Para garantir uma peça usinada com uma boa qualidade, estender sua vida em serviço e reduzir seus custos de produção, a rugosidade deve ser precisamente especificada no projeto

e cuidadosamente controlada na fabricação (SOUZA, 2011). Cada parâmetro de avaliação de rugosidade tem uma particularidade com relação à aplicabilidade do componente em estudo. Um dos parâmetros de rugosidade frequentemente considerados nos processos de torneamento é a rugosidade média ( $Ra$ ), que consiste na média aritmética dos valores absolutos dos afastamentos dos pontos do perfil superficial em relação à linha média dentro do percurso de medição. A norma DIN EN ISO 1302:2002 estabelece a utilização do parâmetro rugosidade média ( $Ra$ ) em especificações de projeto para caracterizar a qualidade de superfícies.

Para a correta medição dos parâmetros de rugosidade, o equipamento de medição deve realizar a separação dos elementos que compõem o perfil efetivo de uma peça: a rugosidade, ondulação e erros de forma. Essa separação é possível por meio da utilização de um filtro de sinal. O comprimento de onda do filtro, chamado de *cut-off*, determina o que deve passar e o que não deve passar. O *cut-off* a ser utilizado para as medições de rugosidade é determinado com base na norma DIN EN ISO 4288/1998. Os valores de *cut-off* diferem entre perfis periódicos de rugosidade, nos quais há o processo de torneamento, e perfis não-periódicos de rugosidade. Para a definição do *cut-off*, leva-se em consideração a distância entre os sulcos deixados na peça ( $RSm$ ) para perfis periódicos, que é aproximadamente igual ao avanço utilizado para a usinagem. Já para perfis não periódicos utiliza-se a rugosidade esperada.

A rugosidade é uma resposta presente em vários estudos devido à sua importância em qualquer componente usinado. Cabrera et al. (2013) estudaram as relações entre os parâmetros de corte (velocidade de corte e avanço) e três parâmetros de rugosidade ( $Ra$ ,  $Rz$  e  $Rq$ ) desenvolvendo modelos matemáticos de segunda ordem com base na Metodologia de Superfície de Resposta. As peças de PEEK reforçado com 30% de fibra de carbono foram usinadas usando ferramentas de metal duro recobertas com TiN. Os experimentos foram planejados seguindo um planejamento fatorial completo e os modelos desenvolvidos foram otimizados por enxame de partículas. Eles concluíram que o avanço tem um efeito positivo nas respostas de rugosidade, mas com o aumento da velocidade de corte, a rugosidade apresenta tendência de queda.

Jogi et al. (2016) implementaram a otimização multiobjetivo para o PEEK. Os experimentos seguiram um Taguchi L18 e foram realizados em um torno CNC usando pastilhas de metal duro revestidas com TiC e TiN. O desempenho do processo foi medido em termos de forças de corte e rugosidade. A análise dos resultados mostrou que velocidade de corte de 377 m/min, avanço de 0,05 mm/v, profundidade de usinagem de 2 mm e

ferramentas de metal duro recoberta com TiC apresentam melhores resultados. Hanafi et al. (2012) estudaram as respostas de rugosidade Ra e  $Rt$  durante a usinagem de PEEK reforçado com 30% de fibra de carbono usando ferramentas de metal duro revestidas com TiN. A modelagem foi realizada usando a abordagem de rede neural artificial para representar as relações complexas entre as condições de corte e os parâmetros de rugosidade. A rede foi treinada com pares de conjuntos de dados de entrada e saída gerados a partir de resultados experimentais obtidos de acordo com um planejamento fatorial completo. Os autores concluíram que os modelos baseados em redes neurais artificiais conseguiram fornecer estimativas precisas de resultados.

A força de corte ( $F_c$ ) também é uma resposta importante a ser estudada, pois é o principal fator no cálculo da potência necessária para a usinagem. A força de corte depende principalmente do material a ser usinado, das condições de usinagem, da seção de corte e do processo em si. Segundo Kienzle (1952), a força de corte teórica pode ser determinada pela Equação 2:

$$F_c = k_s \cdot A = k_s \cdot a_p \cdot f \quad (2)$$

na qual:

$k_s$  – pressão específica de corte em  $[Pa]$

$A$  – área da seção de corte em  $[mm^2]$

$a_p$  – profundidade de usinagem em  $[mm]$

$f$  – avanço

A pressão específica de corte refere-se à força necessária para remover uma área de corte equivalente a  $1 \text{ mm}^2$ . É medida em laboratório para cada par ferramenta/peça em função dos parâmetros de corte. O seu valor varia segundo estes fatores:

- Material da peça;
- Material e geometria da ferramenta;
- Área da seção de corte;
- Velocidade de corte;
- Condições de lubrificação e refrigeração;
- Desgaste da ferramenta.

Entre as equações utilizadas para encontrar a pressão específica de corte, a mais empregada é a de Kienzle, que é definida pela Equação 3.

$$k_s = k_{s1} b \cdot h^{1-z} \quad (3)$$

na qual:  $k_{s1}$  e  $1 - z$  são definidos experimentalmente para materiais específicos.

Ahmed et al. (2021) avaliaram em seu trabalho o impacto dos parâmetros de corte nas componentes da força de usinagem para o torneamento de aço inoxidável AISI 201. Foi aplicado um planejamento experimental Taguchi, com quatro fatores (velocidade de corte, avanço, profundidade de usinagem e diâmetro da barra) com quatro níveis para cada fator. A análise de variância (ANOVA) mostrou que a interação entre o avanço e a profundidade de usinagem contribuiu com 36,64% para a força passiva. A profundidade de usinagem teve forte influência nas três componentes, contribuindo para 26,94% da força de corte, 26,12% para a força de avanço e 16,28% para a força passiva. Os resultados desse trabalho indicam que a força de corte é sensível a todas as variáveis aplicadas aos parâmetros de usinagem.

Hanafi et al. (2013) aplicaram rede neural artificial para prever os componentes da força de corte no torneamento de PEEK reforçado com 30% de fibra de carbono usando ferramentas de metal duro revestidas com TiN e sem fluido de corte, onde os parâmetros de usinagem são a velocidade de corte, avanço e profundidade de usinagem. Os experimentos foram conduzidos usando experimentos de planejamento fatorial completo. Os resultados indicaram que o modelo rede neural artificial foi capaz de prever os componentes da força de usinagem. Isso indica que os modelos ANN podem ser usados para fazer previsões precisas que podem ser usadas de forma benéfica para melhorar as condições práticas de corte. A influência dos parâmetros de usinagem na força de corte foi avaliada por meio de uma análise de sensibilidade. Os resultados indicaram que a profundidade de usinagem é o parâmetro mais influente, seguido do avanço.

Özden et al. (2023) aplicaram redes neurais artificiais e o sistema de inferência fuzzy adaptativo-neural para prever as forças de corte durante a operação de torneamento de PEEK não reforçado e PEEK reforçado com 30% de fibra de carbono usando as ferramentas de corte K15 e PCD. O avanço, velocidade de corte, tipo de material e ferramentas de corte foram definidos como parâmetros de entrada. Os resultados mostram que o sistema de inferência fuzzy adaptativo-neural teve uma predição ligeiramente melhor do que as redes neurais artificiais. Em conclusão, os modelos baseados em ambos os métodos podem ser usados para prever efetivamente a força de corte durante a usinagem

do PEEK reforçado, e, ao usar estes métodos, a eficiência das peças usinadas pode ser melhorada.

A taxa de remoção de material (MRR - *Material Removal Rate*) em  $cm^3/min$  é uma resposta comumente utilizada para medir a produtividade em usinagem. Ela é considerada em estudos experimentais combinada com outras respostas, por exemplo, rugosidade e/ou força de corte (JOZIC et al., 2015). A taxa de remoção de material consiste na quantidade de material removida por unidade de tempo e essa resposta é avaliada por meio de um modelo determinístico em função dos parâmetros de usinagem (PEREIRA et al., 2017).

De maneira geral, para o processo de torneamento, o valor de  $MRR$  em  $cm^3/min$  pode ser expresso através da Equação 4:

$$MRR = v_c \cdot a_p \cdot f \quad (4)$$

na qual:

$v_c$  – velocidade de corte

$a_p$  – profundidade de usinagem

$f$  – avanço

Considerando a Equação 4, o parâmetro velocidade de corte pode ser decomposto conforme a Equação 5:

$$MRR = \pi \cdot \left( \frac{D_0 + D_f}{2} \right) \cdot a_p \cdot f \cdot N \quad (5)$$

na qual:

$D_0$  – diâmetro inicial

$D_f$  – diâmetro final

$a_p$  – profundidade de usinagem

$f$  – avanço

$N$  – rotação

A partir das Equações 4 e 5, pode-se medir a produtividade em termos da quantidade de material removida pela máquina-ferramenta em um período específico de tempo.

Gupta e Kumar (2015) investigaram a usinabilidade do plástico reforçado com fibra de vidro unidirecional (UD-GFRP) no processo de torneamento. O arranjo ortogonal Taguchi L18 foi usado para o planejamento experimental. Para modelar as duas variáveis de resposta, rugosidade da peça e taxa de remoção de material, utilizou-se Análise de Componentes Principais. Os autores evidenciam que taxa de remoção de material é um dos critérios mais importantes na determinação da produtividade em operações de usinagem, sendo sempre preferida uma taxa mais alta nessas operações.

Mia et al. (2018) analisaram os parâmetros de rugosidade ( $Ra, Rq, Rz$ ), desgaste de flanco principal e taxa de remoção de material no torneamento refrigerado por MQL utilizando ferramenta de metal duro revestido. O projeto de experimento foi baseado em matriz ortogonal de Taguchi e a otimização baseada na relação sinal-ruído. Eles concluíram que o avanço afeta predominantemente a taxa de remoção de material. Mufarrih et al. (2019) otimizaram o processo de torneamento em várias características de qualidade com o método Taguchi-GRA. Algumas das características de qualidade que foram otimizadas são circularidade, taxa de remoção de material e rugosidade. O desenho experimental utilizado foi o arranjo ortogonal L9. Eles declararam que um alto valor da taxa de remoção de material é desejável na indústria de manufatura, pois pode ser aplicado à produção em massa em um tempo menor sem sacrificar a qualidade do produto.

Os desvios de circularidade costumam ser pequenos, mas as tolerâncias de circularidade devem ser especificadas quando a precisão desejada não puder ser garantida pelos processos normais de usinagem (CATAPAN, 2013). O erro de circularidade é uma resposta importante para garantir a qualidade desejada do componente.

Boca et al. (2017) estudaram os aspectos que influenciam no desvio de cilindridade e circularidade no processo de torneamento. Os autores observaram que o comprimento em balanço da ferramenta é o parâmetro do processo que mais influencia nos erros de cilindridade e circularidade e que, devido à alta rigidez da peça próximo à placa do torno, o valor do erro é menor em comparação com a seção localizada na extremidade livre da peça de trabalho. O estudo realizado por Olvera et al. (2012) apresenta alguns aspectos relativos à avaliação da rigidez dos componentes do centro de torneamento. Os autores observaram que 21% dos erros geométricos são gerados pelo erro térmico não compensado, flexibilidade da ferramenta, instabilidade do material e aceleração do eixo, no que diz respeito às máquinas convencionais e máquinas CNC.

## 2.2 POLIETERETERCETONA (PEEK)

Os materiais modernos oferecem uma ampla gama de benefícios que tornam as soluções existentes na indústria mais eficientes e competitivas. Nos anos 1990, o PEEK (*polyetheretherketone*, em português polieteretercetona), membro dominante da família dos polímeros PAEK (*poly aryl ether ketone*, em português poli aríl éter cetona) despontou como candidato principal dos termoplásticos de alto desempenho para substituir componentes mecânicos (WENZ et al., 1990). O PEEK, com suas propriedades mecânicas, alta resistência ao calor e boa usinabilidade, é um material promissor para atender à crescente demanda por peças mais leves, mais resistentes e capazes de sobreviver por mais tempo em ambientes severos. O polieteretercetona, conhecido comercialmente como PEEK, pode oferecer uma variedade de vantagens nos setores de petróleo e gás, aeroespacial e biomédico, como reduções de peso, uma excelente combinação de boa estabilidade térmica e propriedades mecânicas, excelente resistência química e propriedades tribológicas (AWAJA; ZHANG, 2015).

Os polímeros de engenharia de alto desempenho atendem ou excedem os requisitos em aplicações aeroespaciais, energéticas e automotivas quando comparados aos termoplásticos convencionais (VANA EI et al., 2021). Esses polímeros termoplásticos de alto desempenho exibem resistência térmica superior, bom desempenho mecânico, estabilidade térmica e química, mesmo em temperaturas elevadas e sob condições severas (MAGRI et al., 2021). O PEEK é um membro importante de PAEK e um dos polímeros de engenharia mais utilizados. Magri e Vaudreuil (2023) afirmam que, graças aos grupos aromáticos lineares e à estrutura semicristalina do PEEK, este termoplástico apresenta uma temperatura de fusão de 340 °C, uma temperatura de transição vítrea de 143 °C e uma temperatura de serviço até 260 °C. O PEEK também exibe altas propriedades mecânicas com resistência à tração de 98 MPa e módulo de Young de 3,5 *GPa* (BARILE et al., 2019). Essas excelentes propriedades mecânicas e térmicas permitem que o PEEK seja usado como um substituto adequado para alumínio ou aço em uma ampla variedade de aplicações de alta temperatura (KISHOR et al., 2016).

Desde a sua introdução pela *Imperial Chemical Industries* nos anos 80, o material PEEK tem gerado muito interesse na indústria aeroespacial como um dos principais candidatos a matriz termoplástica para uso em compósitos avançados devido às suas propriedades únicas de resistência química, alta estabilidade térmica, juntamente com as propriedades satisfatórias das fibras (SHEKAR et al., 2009). O PEEK é um termoplástico de engenharia aromática semicristalina que pode ser usado como uma resina termoplástica

para aplicações aeroespaciais críticas e compósitos estruturais avançados. A Ensinger é uma empresa certificada de acordo com a AS/EN 9100 e produz complexas peças para a indústria aeroespacial. A Figura 3 apresenta um cilindro do sistema de direção de trem de pouso fabricado de PEEK PVX *black* pela Ensinger. Esse componente possui como características baixo peso, retardador de chamas inerente, boa temperatura de deflexão ao calor, boa resistência química, boas propriedades de deslizamento e desgaste e alta resistência ao escoamento.

**Figura 3 – Cilindro do sistema de direção fabricado de TECAPEEK PVX *black***



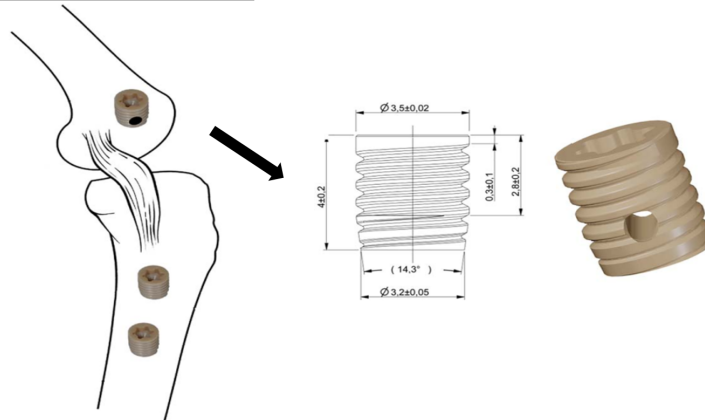
**Fonte: ENSINGER (2022)**

Na indústria biomédica, os implantes de PEEK começaram a substituir os implantes metálicos em ortopedia e trauma desde a década de 1990 e desde então ganharam novas áreas de aplicação (KURTZ; DEVINE, 2007). O interesse por polímeros poliaromáticos surgiu no desenvolvimento de próteses para o quadril e de placas de fixação de fratura com rigidez comparável à do osso (KELSEY et al., 1997). Embora os polímeros poliaromáticos puros exibam um módulo de elasticidade que varia de 3 a 4 *GPa*, esse valor pode ser modificado e se aproximar ao do osso cortical (18*GPa*) com a adição de compósitos como fibra de carbono (WILLIAMS, 2001). O PEEK e PEEK reforçados são considerados biocompatíveis de acordo com testes realizados em cultura celular, tecido subcutâneo e muscular (TOTH et al., 2006), incluindo pesquisas de cultura celular com osteoblastos sobre compostos de PEEK testados como arcabouço (HAY; KEMMISH, 1987). O PEEK hoje pode ser encontrado como gaiolas para fusão de coluna vertebral, placas cranianas e componentes de fricção em dispositivos articulados com resultados bem-sucedidos e confiáveis (RIVARD et al., 2002).

Como biomaterial, o PEEK tem muitas qualidades em comparação com as ligas metálicas, pois ele, ele é translúcido aos raios X, o que possibilita a visualização da região

óssea ao redor do local do implante sem artefatos. Ao contrário de outros termoplásticos, pode ser esterilizado usando vapor e radiação gama (LI et al., 2015). Além disso, o PEEK possui módulo de elasticidade muito próximo ao do osso e, com a adição de fibras de carbono, é possível aumentar significativamente a sua resistência. Com fibras descontínuas, o PEEK pode atingir as propriedades mecânicas das ligas metálicas (CHOU et al., 2015). O módulo de elasticidade do PEEK reduz a proteção contra estresse e pode, dessa forma, diminuir a reabsorção óssea ao redor dos implantes devido à semelhança mecânica com o osso (STEINBERG et al., 2013). O PEEK é considerado um material relativamente bioinerte e não libera íons, não corrói ou degrada em situações biológicas (JOHANSSON et al., 2018). A Figura 4 exemplifica implantes usinados de PEEK, implantados no fêmur e na tíbia de um coelho.

**Figura 4 – Implante de PEEK no fêmur e na tíbia de um coelho**



**Fonte: Adaptado de Johansson et al. (2018)**

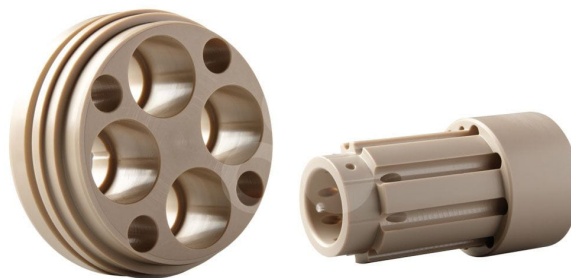
O PEEK e compostos relacionados podem ser fabricados com uma ampla gama de propriedades físicas, mecânicas e de superfície, nos mais diversos formatos, dependendo da utilização como implante (TAPOGLOU; MAKRIS, 2020). A usinagem eficiente de materiais biocompatíveis é fundamental na indústria de implantes médicos, na qual os componentes devem ser fabricados com tolerâncias rigorosas e requisitos específicos em relação à qualidade da superfície e limpeza dos componentes.

O PEEK pode ser utilizado em aplicações como anéis de vedação, conectores elétricos, bombas, pistões, revestimentos, componentes de caixas de proteção e equipamentos médicos (CALDONA et al., 2021). O PEEK é um dos polímeros mais conhecidos que pode suportar alta pressão e temperatura. Devido às suas propriedades térmicas, combinadas com fortes propriedades mecânicas, resistência ao desgaste, resistência química e à corrosão, e estabilidade hidrolítica, o PEEK se tornou um candidato ideal

para aplicações exigentes em ambientes agressivos. Na aplicação de fundo de poço, o ambiente é severo em termos de pressão, temperatura e fluidos de trabalho que podem afetar as propriedades do polímero quando submetido por muito tempo, o que reduz a integridade dos oleodutos (BADEGHAISH et al., 2022). O PEEK possui alta resistência à degradação química e ácida (COGSWELL, 2013). Outra vantagem importante do PEEK é sua baixa absorção de água, que é inferior a 0,5% a 23°C em comparação com 4% a 5% para epóxis aeroespaciais convencionais (MAZUMDAR, 2001). Na indústria de petróleo e gás, o PEEK é usado para fabricar sedes de válvulas (WU et al., 2017), e o torneamento interno é empregado para criar superfícies internas precisas exigidas nesses sistemas. O uso do PEEK pode levar a uma redução a longo prazo nos custos operacionais devido à melhoria da eficiência e durabilidade do produto (ZORKO et al., 2019).

A estabilidade térmica do PEEK em altas temperaturas foi estudada na literatura para aplicações em ambientes severos. Por exemplo, Zhu et al. (2022) avaliaram a estabilidade térmica do PEEK para usinas nucleares. Yang et al. (2017b) investigaram o envelhecimento térmico e de raios gama do PEEK e avaliaram os efeitos térmicos e mecânicos usando uma ampla variedade de técnicas de caracterização. Yuan et al. (2016) estudaram a resistência à quente e úmido de compósitos de PEEK reforçados por diferentes tipos de fibras. De acordo com as condições da EN ISO 23936-1 e NORSOK M-710, os componentes de PEEK para aplicações em condições severas precisam ser aprovados em termos de temperaturas de até 240 °C, pressão de até 300 bar, tempo de até 60 dias, assim como os altos níveis H<sub>2</sub>S (10% H<sub>2</sub>S em uma fase de gás de 30%). A Figura 5 apresenta exemplos de conectores elétricos utilizados na indústria de petróleo e gás fabricados pela Ensinger. Nessa indústria, a condução de eletricidade é um fator chave, sendo transmitida usando uma rede de cabos e conectores elétricos, que estão sujeitos ao ambiente de operação agressivo, bem como a pressões e temperaturas potencialmente altas.

**Figura 5 – Conectores elétricos fabricados em PEEK**



**Fonte: Adaptado de ENSINGER (2022)**

O PEEK pode ser disponibilizado pelo fornecedor na forma de pó ou grânulos,

que posteriormente são convertidos em produtos através de processos como moldagem por extrusão e injeção, ou na forma de barras e tubos confeccionados por extrusão ou folhas moldadas por compressão, que podem ser retrabalhados para obter o produto final desejado. A usinagem do PEEK pode ser necessária tanto na etapa de acabamento para produtos que passaram pelo processo de injeção, como empregada para a confecção dos produtos a partir das barras e tubos extrudados. O bom desempenho das operações de usinagem é afetado pelas propriedades do material de trabalho, que estão atribuídas à usinabilidade do material (MATA et al., 2015).

A rugosidade é uma medida importante da qualidade da superfície, impactando significativamente os custos de fabricação (AZIZI et al., 2012). De acordo com Chabbi et al. (2017), vários tipos de polímeros, especificamente termoplásticos, são difíceis de cortar devido às suas propriedades características, como baixo módulo de elasticidade, baixa condutividade térmica, alto coeficiente de expansão térmica e tensão interna. Porém, a principal característica do PEEK é o alto desempenho, incluindo alta resistência mecânica e ao desgaste. Ele mantém boa estabilidade dimensional e resistência química mesmo quando submetido a altas temperaturas. Devido à baixa condutividade térmica dos polímeros, a concentração de calor na aresta de corte pode acarretar dificuldade na obtenção de superfícies lisas (MASEK et al., 2021). Na usinagem do PEEK, essas altas temperaturas nas ferramentas de corte também podem acelerar os mecanismos de desgaste e prejudicam a qualidade da superfície. Xiao e Zhang (2002) apontaram que as condições ideais de processamento devem ser baseadas nas propriedades do polímero, como temperatura de transição vítrea, resistência à fratura e mobilidade molecular. Geralmente, os fabricantes de ferramentas não fornecem condições de corte para usinar polímeros. As condições operacionais podem ser alcançadas através de pesquisas experimentais sistemáticas.

Muitas investigações têm sido dedicadas à usinagem do polímero de alto desempenho PEEK, que devido à combinação de suas características têm atraído muito interesse de cientistas e engenheiros. Weng et al. (2016) afirmaram que as peças PEEK podem ser fabricadas de forma rápida e diretamente a partir do modelo CAD sem moldes caros, limitação de geometria e ferramentas específicas.

Natarajan et al. (2022), motivados a resolver problemas desafiadores de otimização multiobjetivo, incluindo a previsão de parâmetros ótimos de torneamento do PEEK, propuseram uma abordagem conhecida como Esquema de Aprendizagem Refinada e Otimização Baseada em Aprendizagem de Ensino Multiobjetivo Modificado. O algoritmo desenvolvido foi então empregado na otimização de uma função objetivo, bem como na

otimização multiobjetivo. Os autores afirmaram que o algoritmo proposto previu que  $v_c = 155 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,2 \text{ mm/v}$  e  $a_p = 0,25 \text{ mm}$  são as melhores condições para obter a rugosidade mínima de  $Ra = 0,900 \mu\text{m}$ . E a produtividade,  $v_c = 95 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,6 \text{ mm/v}$  e  $a_p = 0,6 \text{ mm}$  é a melhor condição para obter taxa máxima de remoção de material de  $MRR = 24,7884 \text{ cm}^3/\text{min}$ . O desempenho do MMTLBO-RLS comprova que essa abordagem é adequada para ser usada na indústria para produzir peças de PEEK com qualidade e quantidade de suporte, além de ser capaz de resolver outros problemas de otimização multiobjetivo com desempenho competitivo.

Kovalčík et al. (2022) abordaram a modelagem da força de corte no torneamento de dois tipos de materiais plásticos reforçados com fibras, PA12 e PEEK. Foram utilizadas ferramentas de metal duro sem revestimento, com diferentes ângulos de saída e diferentes avanços e velocidades de corte. Os autores constataram que o efeito do avanço e do ângulo de saída na força de corte foi estatisticamente significativo para ambos os materiais. Por outro lado, o efeito da velocidade de corte na força de corte foi estatisticamente insignificante. Com base nas forças de corte calculadas e previstas, os autores não encontraram diferenças estatisticamente significativa entre elas, o que indica que o modelo proposto é suficientemente preciso dentro da faixa das condições de corte testadas.

Tapoglou e Makris (2020) investigaram o efeito do dióxido de carbono supercrítico na usinagem de materiais poliméricos utilizados como implantes médicos. O impacto dos parâmetros de corte e da aplicação do meio refrigerante na rugosidade da peça resultante foi investigado em PEEK e polietileno de ultra alto peso molecular. No caso do PEEK, ao usinar com a velocidade de corte de  $200 \text{ m/min}$  ocorreu um aumento na rugosidade à medida que o avanço aumentava. Não foram observadas mudanças significativas entre os diferentes níveis de avanços, que variaram de  $0,1$  e  $0,3 \text{ mm/v}$ . Os melhores resultados foram obtidos com um avanço de  $0,2 \text{ mm/v}$ .

Mata et al. (2015) investigaram os aspectos das forças de corte durante o torneamento de PEEK não reforçado, PEEK reforçado com fibra de carbono e PEEK reforçado com fibra de vidro usando ferramentas de PCD e metal duro ISO K15. Os principais fatores, como tipo de material, ferramentas de corte, velocidade de corte e avanço, e suas interações foram avaliados estatisticamente. Os autores concluíram, em geral, que o PEEK não reforçado teve uma força de corte menor em comparação com o PEEK reforçado usando ferramentas PCD ou K15. Para obter uma força de usinagem menor para PEEK natural e PEEK reforçado, a velocidade de corte deve ser superior a  $150 \text{ mm/min}$  e o avanço inferior a  $0,09 \text{ mm/v}$ . Se for necessário o contrário (ou seja,

maior força de usinagem), a velocidade de corte deve ser inferior a 150 mm/min e o avanço superior a 0,09 mm/v. Em geral, a ferramenta de corte K15 diminui a força de usinagem do PEEK reforçado com vidro e PEEK, mas aumenta a do PEEK reforçado com carbono. Com a ferramenta de corte PCD ocorreu o oposto da ferramenta K15. Davim e Mata (2008) estudaram o torneamento de compósito termoplástico PEEK com 30% de fibra de carbono do ponto de vista das forças de corte. Os autores concluíram que a ferramenta de metal duro apresenta o pior comportamento para usinagem de compósitos de PEEK, principalmente em termos de forças de corte. Mata et al. (2009) testaram a influência das condições de corte no PEEK reforçado com fibra de carbono e verificaram que a usinabilidade piorou quando a velocidade de corte variou de 50 a 200 m/min e o avanço de 0,05 a 0,2 mm.

Os termoplásticos podem ser usinados para obter-se precisão dimensional e de forma ou para preparar superfícies funcionais. Um dos principais problemas das peças fabricadas em termoplásticos é a qualidade após a usinagem. Problemas de qualidade, como influência térmica da superfície usinada ou rugosidade, são discutidos em todos os tipos de tecnologias de usinagem (KARATAŞ; GÖKKAYA, 2018). A qualidade pode ser monitorada no processo, indiretamente, medindo a força de corte, a temperatura de corte e o desgaste da ferramenta de corte, se a relação entre essas quantidades e a qualidade superficial avaliada for conhecida (MASEK et al., 2021). Devido à baixa condutividade térmica das matrizes poliméricas, a concentração de calor na aresta de corte pode ser um sério problema para a qualidade da superfície usinada. A geração de calor também é afetada pela geometria da ferramenta de corte, mas principalmente também pela velocidade de corte (MASEK et al., 2021). Os termoplásticos também podem ser usinados para preparar superfícies funcionais, por exemplo, operações de furação são usadas para preparar furos para união. A qualidade dessas operações se concentra principalmente na qualidade de entrada e saída do furo (PANCHAGNULA; PALANIYANDI, 2018), mas uma quantidade menor também é focada na medição da temperatura durante a furação (FU et al., 2018). O torneamento das hastes ou tubos de PEEK é amplamente utilizado para criar reentrâncias no final das peças de trabalho. Os tubos compósitos são utilizados na indústria aeronáutica, energética ou petroquímica para a condução de fluidos, geralmente como combustíveis ou refrigerantes (MAALAWI et al., 2016).

É essencial entender a influência da temperatura de corte na qualidade das peças devido ao baixíssimo ponto de fusão da matriz polimérica quando o termoplástico é usinado. Acima do ponto de fusão, é possível observar uma queda acentuada nas propriedades mecânicas, manifestada pela diminuição da força de corte (SREEJITH et al., 2000). O

sucesso da usinagem de PEEK está relacionado com o uso de ferramentas e parâmetros apropriados. As variáveis como força de corte, potência, pressão específica de corte, vida da ferramenta, desgaste da ferramenta e rugosidade devem ser avaliadas para garantir uma boa usinabilidade do material PEEK.

Embora o PEEK apresente importantes características e venha sendo estudado há alguns anos, estudos relacionados ao processo de torneamento interno desse material, principalmente associados a aprendizado estatístico, receberam poucos avanços até os dias atuais.

### 2.3 PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS

O Planejamento de Experimentos (DOE - *Design of Experiments*) é um conjunto de planejamentos e métodos de análise e inferência estatística para definição de experimentos para testar a significância de variáveis de interesse, obter modelos estatísticos, minimizar o erro experimental com mínimo de experimentos e, portanto, baixo custo experimental. É uma técnica estatística eficaz para a modelagem e otimização de experimentos (ALMEIDA et al., 2018). Para o entendimento das relações de causa e efeito em um sistema, é necessária a investigação das mudanças na saída do processo causadas pela alteração das variáveis de entrada do sistema. As observações sobre um sistema ou processo podem levar a teorias ou hipóteses sobre o que faz o sistema funcionar, porém o delineamento de experimentos é fundamental para verificar se as hipóteses estão corretas (MONTGOMERY, 2013). O desenvolvimento de um modelo relacionando a resposta de interesse às variáveis de entrada geralmente abrange dois ou mais fatores a fim de verificar os efeitos em uma variável de resposta. Neste contexto, os planejamentos fatoriais são os mais eficientes, já que todas as combinações possíveis dos fatores são investigadas a cada ensaio ou replicação completa (MONTGOMERY, 2013; MYERS et al., 2016). O problema com os experimentos fatoriais está no fato de que eles restringem a modelagem a um modelo linear com termos de interação, o que inviabiliza a obtenção de soluções ótimas distintas das combinações experimentais testadas.

A metodologia de superfície de resposta é um dos métodos do DOE mais utilizados para otimização no âmbito da engenharia, atualmente aplicada em diversas áreas onde há a necessidade de modelar e otimizar uma resposta ( $y$ ) em função de ( $k$ ) variáveis de controle (PEREIRA et al., 2018). A aplicação dessa metodologia foi realizada inicialmente na indústria química, tendo seus fundamentos formalizados por Box e Draper (1987). Para estimar um modelo de superfície de resposta, geralmente utiliza-se um procedimento

sequencial. A primeira etapa da metodologia é definir o processo e identificar as variáveis de resposta e as variáveis independentes (regressoras). Se houver um grande número de variáveis de interesse, as quais não se tem certeza de sua influência, um estudo de varredura utilizando um experimento fatorial fracionado pode ser realizado. Pode-se também empregar métodos para busca de curvatura na região experimental. A modelagem consiste em encontrar uma razoável aproximação do relacionamento real entre a resposta ( $y$ ) e o conjunto de variáveis independentes ( $x_1, \dots, x_k$ ). Se a resposta for bem modelada por uma função linear das variáveis independentes, então a função de aproximação será o modelo de primeira ordem, conforme a Equação 6:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \epsilon \quad (6)$$

na qual:

$y$  – vetor da resposta de interesse

$x_1, \dots, x_k$  – conjunto de variáveis independentes,  $i = 1, \dots, k$

$\beta_1, \dots, \beta_k$  – coeficientes de regressão,  $i = 1, \dots, k$

$k$  – número de variáveis independentes

$\epsilon$  – erro experimental

Se o sistema apresentar curvatura, então a função de aproximação será um polinômio de segunda ordem, como apresentado pela Equação 7.

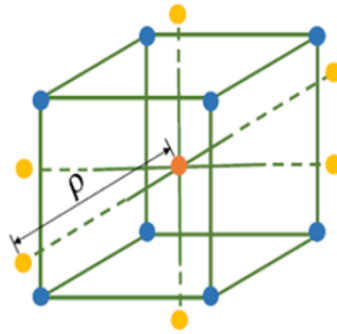
$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon \quad (7)$$

Para estimar os coeficientes ( $\beta$ ), o algoritmo tipicamente usado é o Método dos Mínimos Quadrados Ordinários. Com isso, obtém-se a função aproximada que relaciona a resposta de interesse com as variáveis do processo.

Diversos tipos de planejamentos para superfície de resposta podem ser empregados. O planejamento denominado (CCD - *Central Composite Design*), proposto por Box e Wilson (1951), é um delineamento que contém três grupos distintos de elementos experimentais: pontos da parte cúbica codificados em (- 1; +1), ou seja, um fatorial completo ou um fatorial fracionário, pontos axiais codificados para em  $(-\rho; +\rho)$  e os pontos centrais codificados para (0). O número de experimentos é dado por:  $2k$  pontos fatoriais +  $n_c$  pontos centrais +  $2k$  pontos axiais. O valor de  $\rho$ , depende da rotacionalidade

do planejamento e do número de fatores envolvidos (BOX; DRAPER, 1987). O CCD rotacionável é exposto na Figura 6. Nele, os pontos axiais estão a uma distância  $\rho$  do centro, baseada na rotacionalidade do planejamento, conforme mencionado anteriormente.

**Figura 6 – Planejamento CCD**



**Fonte: Adaptado de Pereira (2017)**

O DOE pode ser agrupado em duas categorias, ou seja, DOE Clássico e DOE Moderno (CRARY, 2002). A amostragem aleatória e a amostragem quase aleatória são abordagens do DOE Moderno. As amostras são geradas com uma probabilidade igualmente provável de ocorrência no espaço do planejamento. A amostragem de Faure utilizada neste trabalho, proposta por Faure (1982), é uma técnica bem conhecida de geração de amostras quase aleatórias.

Considere que  $m$  é o primeiro número primo tal que  $m \geq n$ , onde  $n$  é o número total de amostras. Além disso, o limite superior do tamanho da amostra é  $m^p$ . Por exemplo, se  $n = 50$ , ou seja, deseja-se uma amostra com 50 observações, a amostragem de Faure usa o primeiro número primo maior que 50, ou seja,  $m = 53$ . A principal vantagem de usar a amostragem de Faure é que esta é mais rápida para preencher as lacunas para problemas de alta dimensão (DAS; TESFAMARIAM, 2022). Além disso, evita problemas de correlação em altas dimensões. Seja  $c_{ij} = \binom{i}{j} \pmod{m}$  onde  $0 \leq j \leq i \leq p$ . Isso implica que  $\left\{ c_{ij} - \binom{i}{j} \right\}$  é o múltiplo de  $m$ . A representação base  $m$  de  $n$  é expressa conforme a Equação 8.

$$n = \sum_{i=0}^{p-1} a_i(n) m^i \quad (8)$$

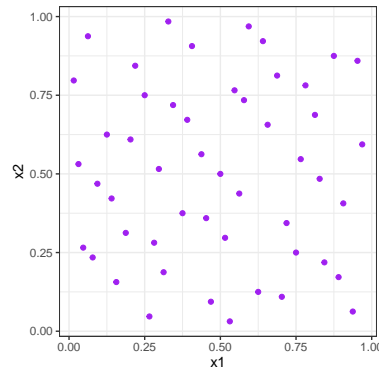
onde os coeficientes  $a_i \in [0, m)$  assumem valores inteiros. As amostras produzidas pela

sequência de Faure são denotadas na Equação 9.

$$x_n = \sum_{j=0}^{p-1} a_j(n) m^{-(j+1)} \quad (9)$$

onde o coeficiente  $a_i = \sum_{l=j}^{p-1} c_{lj} a_l(n) \pmod{p}$ ,  $j \in \{0, 1, \dots, p-1\}$ . A Figura 7 mostra as amostras geradas usando a amostragem de Faure e expõe um exemplo de planejamento obtido por amostragem de Faure para  $n = 50$  e  $k = 2$ .

**Figura 7 – Representação da amostragem de Faure**



**Fonte: Próprio autor**

## 2.4 ABORDAGENS DE APRENDIZADO ESTATÍSTICO PARA REGRESSÃO

A metodologia de superfície de resposta (RSM) tem sido amplamente aplicada para modelagem de processos planejados, a fim de permitir a otimização. Como os modelos RSM são de regressão múltipla de segunda ordem, eles são baseados na estimativa paramétrica clássica. Os métodos de aprendizado se concentram na estimativa de modelos não paramétricos com boa capacidade de generalização, em oposição às metodologias de estimativa de modelos sob suposições estatísticas. A aprendizagem de máquina, ou *machine learning*, é um assunto muito popular nos últimos anos e os avanços da computação possibilitaram a aplicação dessa teoria em diversas áreas do conhecimento. Os modelos inteligentes possibilitam a solução de problemas complexos das áreas de engenharia, médica, financeira, biológica, entre outras (BRINK et al., 2016).

Uma das abordagens de aprendizagem de máquina é chamada de Teoria do Aprendizado Estatístico ou teoria de Vapnik-Chervonenkis (CHERKASSKY; MULIER, 2007). A teoria do aprendizado estatístico busca explicar os pressupostos estatísticos para compreender como um modelo de aprendizagem, estimado a partir de uma amostra, é capaz de prever observações futuras (SMOLA; SCHÖLKOPF, 2004). O aprendizado pode

ser classificado como supervisionado e não supervisionado, de acordo com o problema a ser resolvido. No aprendizado supervisionado, o objetivo é utilizar os modelos preditivos obtidos no conjunto de treinamento, composto por variáveis de entrada e de saída, para a realização de previsões futuras de uma dada saída, em um novo conjunto de entrada. No aprendizado não supervisionado, não há variável de saída; neste caso, o interesse é descrever as associações e padrões entre as variáveis de entrada, objetivando extrair inferências que possibilitem revelar uma estrutura escondida dos dados (YAO et al., 2016; HASTIE et al., 2009; JAYANTHI; MAHESH, 2018). O presente trabalho concentra-se no aprendizado supervisionado, composto por variáveis de entrada e saídas. Os modelos podem ainda ser classificados como de regressão, caso a saída seja contínua, ou de classificação, caso a saída seja categórica.

O aprendizado é um dos temas mais estudados atualmente e vem sendo aplicado para modelar processos de fabricação. Além disso, a aplicabilidade, facilidade de implementação e custo-benefício devem ser considerados para aplicações industriais. Glatt et al. (2021) avaliaram e compararam a aplicabilidade de três métodos de aprendizado de máquina: máquina de vetores de suporte para regressão, RF para regressão e rede neural artificial; para derivar modelos que suportam a previsão de propriedades da peça com base em cargas termomecânicas. Os dados de propriedade da peça de trabalho e as respectivas forças e temperaturas do processo são usados como dados de treinamento e teste. Depois de treinar os modelos com uma amostra com 55 observações, o modelo de regressão de máquina de vetores de suporte apresentou melhor capacidade de previsão.

Wang et al. (2022) aplicaram uma abordagem de aprendizado de máquina para otimizar os parâmetros de torneamento de forma a maximizar a precisão do torneamento. Os desempenhos dos vários modelos foram avaliados e comparados usando a técnica de validação cruzada *leave-one-out*. Os resultados experimentais mostraram que o modelo XGB, combinado com outras técnicas, ofereceu o melhor desempenho, sendo uma ferramenta útil para prever a qualidade do torneamento. E o método foi capaz de reduzir o custo de obtenção dos parâmetros de torneamento otimizados correspondentes a qualidade prevista. Zhang e Xu (2022) construíram um modelo de regressão por processo gaussiano para previsões de rugosidade no processo de torneamento do latão com base na velocidade de corte, avanço e profundidade de usinagem. O modelo apresentou alta estabilidade e precisão e, portanto, os autores afirmaram que é promissor como uma ferramenta eficiente e robusta para estimativas de rugosidade.

Já o estudo de Asiltürk et al. (2023) teve como foco principal determinar o

efeito da velocidade de corte, do avanço e da profundidade de usinagem na vibração, rugosidade e emissão acústica durante a operação de torneamento a seco. Uma abordagem de aprendizado de máquina baseada em sistema de inferência *fuzzy* foi utilizada para prever as respostas. O erro percentual foi calculado para medir a precisão do modelo de previsão obtido via lógica *fuzzy*. De acordo com os resultados obtidos, a lógica *fuzzy* prevê valores de rugosidade com 88% de precisão, vibração com 86% de precisão e emissão acústica com 87% de precisão. Surya et al. (2021) investigaram a influência dos parâmetros de corte na rugosidade e taxa de remoção de material durante o torneamento Ti6Al4V usando ferramenta de metal duro revestida com TiCN. O efeito dos parâmetros de entrada nas respostas foi estudado usando RSM e rede neural artificial. O erro percentual da rede neural artificial foi menor quando comparado a RSM. Os resultados mostraram que a rede neural artificial apresentou  $RMSE = 0,291$  para rugosidade e  $RMSE = 0,397$  para taxa de remoção de material.

A seguir, são apresentados os métodos de aprendizado aplicados neste trabalho: a técnica de validação cruzada, modelos aditivos generalizados, métodos baseados em árvores, máquina de vetores de suporte e algoritmo de reforço extremo de gradiente.

#### 2.4.1 Validação cruzada

O aprendizado estatístico busca aproximar dados populacionais por meio de poucos, mas suficientes, dados amostrais. Para garantir uma boa precisão das funções estimadas, a validação cruzada é realizada e, através dela, é possível estimar o modelo por meio da fração amostral reservada para os dados de treinamento e prever a capacidade do modelo com a fração amostral separada para teste.

A validação cruzada foi introduzida por Stone (1974), Allen (1974), Geisser (1975) para seleção de modelos de regressão. Segundo Friedman et al. (2001), o método de validação cruzada é o mais usado para avaliar os erros de predição. Muito utilizada em aprendizado estatístico de máquinas, a validação cruzada tem o objetivo de testar a capacidade de previsão do modelo para novos dados, que não foram utilizados para estimar os parâmetros, com a finalidade de verificar se há sobreajuste (*overfitting*) e viés. Uma vez definido um modelo final ou um conjunto de modelos finais, é importante, então, obter sua precisão e acurácias práticas, isto é, o seu desempenho para um novo conjunto de dados (JAMES et al., 2013; FRIEDMAN et al., 2001).

Os métodos de regressão procuram encontrar um modelo  $\hat{f}(\mathbf{x}, \alpha)$  para aproximar

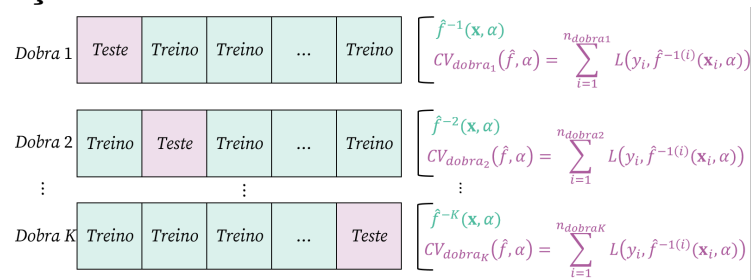
uma saída ou variável dependente  $y \in \mathbb{R}$ . Validar um modelo é uma etapa importante para se ter uma avaliação da capacidade de predição do mesmo. Ao longo do tempo, foram propostas diferentes técnicas de validação de modelos. Nesta seção será explicado como realizar a validação cruzada por meio de k-dobras e *bootstrap*.

#### 2.4.1.1 Validação cruzada via k-dobras

A validação cruzada por meio de k-dobras divide os dados em  $k$  partições. Em cada dobra,  $k = 1, \dots, K$ , um modelo obtido com os demais dados é testado para avaliar o desempenho em dados populacionais. O desempenho final do modelo é a média do desempenho obtido em todas as dobras, conforme a Equação 10. A abordagem *leave-one-out* é um caso específico do método k-dobras, onde  $k = N$ . Esta abordagem é geralmente aplicada quando os dados disponíveis apresentam um tamanho limitado. Considerando um conjunto finito de modelos ajustados com um hiperparâmetro de ajuste  $\alpha$ ,  $\alpha \in \Lambda$ , o modelo ajustado é definido como  $\hat{f}^{-k}(\mathbf{x}, \alpha)$ , calculado através dos dados com  $\alpha$ -ésimo hiperparâmetro e a  $k$ -ésima dobra. O modelo selecionado é aquele com  $\hat{\alpha}$  que minimiza  $CV(\hat{f}, \alpha)$ ,  $\alpha \in \Lambda$ . O modelo selecionado é então ajustado a todos os dados (HASTIE et al., 2009). O esquema de validação cruzada por k-dobras é ilustrado na Figura 8.

$$CV(\hat{f}, \alpha) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{f}^{-k(i)}(\mathbf{x}_i, \alpha)) \quad (10)$$

**Figura 8 – Validação cruzada via k-dobras**



**Fonte: Próprio autor**

Segundo Borra e Ciaccio (2010), o viés do método K-dobras diminui quanto maior o valor do k. Porém, um k muito elevado acaba aumentando o custo computacional da técnica, além de implicar uma amostra de teste pequena, o que aumenta a variância. Na literatura, se discute qual valor de k seria o ideal, sendo opções mais usuais os valores  $k = 2, 5$  ou  $10$ . Borra e Ciaccio (2010) trazem essa discussão e afirmam que, em seus estudos,

$k = 10$  apresentou um melhor desempenho. Borra e Ciaccio (2010), Kim (2009) também usam em seus trabalhos o valor de  $k = 10$ . Sendo  $k = 10$  o valor mais frequentemente usado nos trabalhos, será adotado também neste trabalho esse número de dobras.

#### 2.4.1.2 Validação cruzada via *Bootstrap*

A validação cruzada via *Bootstrap* é um método computacional para estimativas estatísticas proposto por Efron (1982). O *Bootstrap* não paramétrico estima uma distribuição empírica da população usando os dados amostrais disponíveis. A ideia principal desta abordagem é realizar várias reamostragens com reposição da amostra disponível e estimar ou simular as estatísticas de interesse. O *Bootstrap* não paramétrico também pode ser aplicado para realizar a validação cruzada (EFRON, 1982). Segundo Kim (2009), a estimativa do erro via *Bootstrap* tem um bom desempenho em amostras pequenas porque ela tem uma menor variância, porém demanda um maior custo computacional.

Tomando  $N$  instâncias de treinamento,  $\mathbf{Z} = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N)$ ,  $\mathbf{z}_i = (\mathbf{x}_i, y_i)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , para realizar a validação cruzada via *Bootstrap*, reamostragens das observações de treinamento são realizadas  $B$  vezes, gerando  $B$  conjuntos de treinamento *Bootstrap*,  $\mathbf{Z}_1^*$ ,  $\dots$ ,  $\mathbf{Z}_B^*$ . Então, são treinados  $B$  modelos,  $\hat{f}_1^*, \dots, \hat{f}_B^*$ , um para cada amostra de *Bootstrap* (HASTIE et al., 2009).

O desempenho médio dos  $B$  modelos obtidos na amostra de treinamento original é uma estimativa tendenciosa do desempenho em dados futuros ou do risco esperado. O viés existe devido à sobreposição de dados nas amostras *Bootstrap* e originais e deve ser corrigido (HASTIE et al., 2009; STEYERBERG, 2019). O otimismo corrigido é uma possibilidade de estimar o desempenho ao realizar a validação cruzada por *Bootstrap*. Essa abordagem pode ser realizada seguindo estas etapas (STEYERBERG, 2019):

1. Selecione o nível do hiperparâmetro de ajuste,  $\alpha$ , e construa um modelo,  $\hat{f}(\mathbf{x}, \alpha)$ , usando os dados de treinamento,  $\mathbf{Z}$ . Estime o desempenho aparente aplicando tal modelo nos dados de treinamento através da Equação 11;

$$AP(\hat{f}, \alpha) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{f}(\mathbf{x}_i, \alpha)) \quad (11)$$

2. Itere de  $b = 1$  para  $B$ :

- (a) Crie uma amostra *Bootstrap*,  $\mathbf{Z}_b^*$ , a partir da amostra original;
- (b) Estime um modelo com a amostra *Bootstrap*,  $\hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha)$ ;

- (c) Estime o desempenho *Bootstrap* aplicando o modelo  $\hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha)$  na amostra *Bootstrap*,  $\mathbf{Z}_b^*$ , conforme a Equação 12;

$$BP_b = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i^*, \hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha)) \quad (12)$$

- (d) Estime o desempenho de teste aplicando o modelo *Bootstrap*,  $\hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha)$ , nos dados de treinamento,  $\mathbf{Z}$ , através da Equação 13;

$$TP_b = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha)) \quad (13)$$

3. Estime o otimismo ou viés do erro como a diferença entre os desempenhos de *Bootstrap* e teste, através da Equação 14;

$$Opt = \overline{BP} - \overline{TP} \quad (14)$$

4. O desempenho ou erro com otimismo ou viés corrigido é obtido como a diferença entre o desempenho aparente e o otimismo, através da Equação 15;

$$OCP = AP - Opt \quad (15)$$

O desempenho com otimismo corrigido é usado para estimar o risco esperado. É essencial variar os níveis dos hiperparâmetros  $\alpha \in \Lambda$ , para selecionar o melhor modelo através dessa abordagem de validação cruzada. Breiman e Spector (1992) mostraram que as estimativas do erro sem reamostragem, como  $R_{aj}^2$  e  $C_p$ , são altamente tendenciosas, e as melhores abordagens de validação cruzada são as técnicas *bootstrap* e k-dobras. A validação cruzada via *Bootstrap* é pouco aplicada na engenharia, sendo que uma aplicação em engenharia térmica (TIAN et al., 2014) e uma aplicação recente em processo de fresamento helicoidal na liga Ti-6Al-4V podem ser referenciadas (COSTA et al., 2023). Na pesquisa médica, abordagens *Bootstrap* para validação cruzada têm sido extensivamente aplicadas (CHEN et al., 2022; RAUT et al., 2021; ANAN et al., 2019).

Algumas métricas são importantes para avaliar os modelos de regressão via validação cruzada. As métricas abordadas neste trabalho são o coeficiente de determinação ( $R^2$ ), Erro Absoluto Médio (MAE - *Mean Absolute Error*) e Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE - *Root Mean Square Error*). A métrica  $R^2 \in [0, 1]$ , denominada coeficiente de determinação, representa a proporção da variância dos dados explicados pelo modelo. Quanto maior é o valor de  $R^2$ , mais explicativo é o modelo em relação aos dados previstos.

A Equação 16 mostra o cálculo da métrica  $R^2$ , na qual  $y$  e  $\hat{y}$  são os valores reais e previstos, respectivamente, e  $\bar{y}$  representa a média dos valores reais (MONTGOMERY, 2013; MYERS et al., 2016).

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (16)$$

Se o modelo for pior do que um modelo simples que prevê a média, o  $R^2$  pode ser negativo. Isso ocorre porque o denominador na Equação 16, que representa a variabilidade total na variável dependente, pode ser menor do que o numerador, que expressa a variabilidade explicada pelo modelo. É importante lembrar que essa situação pode ocorrer com mais frequência na validação cruzada, na qual os modelos são testados em dados futuros, e, posteriormente, as métricas de precisão são calculadas. O Apêndice A detalha as etapas do processo de estimativa de desempenho para validação cruzada utilizando a abordagem de *Bootstrap* quando a métrica  $R^2$  é considerada.

Embora esta medida seja normalmente utilizada como uma indicação da adequação do modelo de regressão ao conjunto de observações inicialmente dado, ela deve ser usada com precaução, pois nem sempre um valor de  $R^2$  alto (próximo de 1) é sinal de que o modelo apresente bom ajuste aos dados (MARTINS, 2018). Do mesmo modo, um valor baixo de  $R^2$  pode ser provocado por um valor discrepante ou *outlier*, enquanto a maior parte dos dados se ajusta razoavelmente bem a uma reta (VEAUX, 2015).

O erro médio absoluto (MAE), como demonstrado na Equação 17, mede a média dos valores absolutos das diferenças entre o valor real e o valor predito. Essa métrica não é afetada por *outliers* (VICKERS, 2017). O valor de saída da Equação tem a mesma unidade de medida dos dados utilizados para previsão, logo fica mais fácil a sua interpretação. Em uma previsão futura, o MAE precisa ser levado em consideração para a tomada de decisão.

$$MAE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (17)$$

A raiz do erro quadrático médio (RMSE) é uma métrica que calcula a média da diferença entre o valor predito com o real, de forma similar ao MAE. No entanto, em vez de usar o módulo da diferença entre os valores de  $y$  e  $\hat{y}$ , nessa métrica, a diferença é elevada ao quadrado, penalizando valores de erro elevados. Quanto maior é o valor de RMSE, maior o erro associado às previsões. Para lidar com o problema da diferença entre unidades, é aplicada a raiz quadrada, como demonstrado na Equação 18 (VICKERS, 2017). Apesar do valor ter a mesma unidade da resposta em estudo, ele não costuma se

assemelhar ao MAE, demonstrando como os *outliers* podem impactar nas previsões do modelo. Por essa razão, essa métrica pode ser uma boa opção quando é preciso ter uma avaliação mais criteriosa sobre as previsões do modelo.

$$RMSE(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (18)$$

Utilizar várias métricas em conjunto, como utilizado no presente trabalho, permite uma visão mais completa do desempenho do modelo de regressão. O RMSE, MAE e  $R^2$  são importantes na etapa de validação cruzada para identificar problemas de *overfitting* e viés, visto que possibilitam a escolha do modelo mais adequado para os objetivos específicos do problema de regressão e das características dos dados.

O critério de informação de Akaike (AIC - *Akaike Information Criteria*) é uma métrica que mensura a qualidade de um modelo estatístico visando também a sua simplicidade. Esse critério é utilizado fora do contexto de validação cruzada considerando o erro geral de um modelo estimado com todo conjunto de treinamento, penalizado pelo número de parâmetros deste. A métrica visa, portanto, penalizar modelos mais complexos. Ela fornece uma medida para comparação e seleção de modelos, em que menores valores de AIC representam uma maior qualidade e simplicidade (TADDY, 2019). No contexto deste trabalho, o AIC desempenha um papel crucial na escolha inicial entre o modelo completo ou reduzido de RSM e Modelos Aditivos generalizados (GAM), optando pelo modelo que seja tanto de qualidade quanto simples.

O AIC foi proposto por Akaike (1998), que estabeleceu este como um estimador imparcial de precisão preditiva. A estimativa do AIC para um determinado modelo é dada pela Equação 19.

$$AIC = -2 \ln \sigma_\varepsilon^2 + 2K, \quad (19)$$

em que  $\sigma_\varepsilon^2$  é verossimilhança da variância dos resíduos e  $K$  é o número de parâmetros do modelo. O  $2K$  é o termo de penalização adicionado para evitar a escolha um modelo com muitos parâmetros (ANDERSON; BURNHAM, 2004). Se a estimativa de mínimos quadrados for utilizada e os erros seguirem uma distribuição normal, então  $\sigma_\varepsilon^2$  é igual à variância dos resíduos do modelo ajustado (ANDERSON; BURNHAM, 2004). A Equação 20 é utilizada neste caso:

$$AIC = n \ln \sigma_\varepsilon^2 + 2K, \quad (20)$$

onde  $n$  é o número de observações disponíveis. O modelo com menor valor de AIC é considerado o modelo de melhor ajuste. O AIC não fornece uma medida de qualidade

do modelo global, apenas uma medida relativa no que diz respeito à comparação entre modelos candidatos. Vale ressaltar que o cálculo do AIC pode ser complexo em certos métodos de aprendizado estatístico, dificultando sua aplicação na comparação de modelos de famílias distintas.

#### 2.4.2 Modelos aditivos generalizados

Dentre as alternativas correspondentes ao uso de regressão não paramétrica ou semi paramétrica, abordagens muitas vezes superiores por sua flexibilidade em relação às estruturas estritamente paramétricas, destacam-se os modelos aditivos generalizados (GAM - *Generalized Additive Models*). O GAM foi introduzido por Hastie et al. (2009) e configura uma extensão dos GLM - *Generalized Linear Models*, com um preditor linear incluindo a soma de funções de suavização não paramétrica dos preditores, configurando a possibilidade dos próprios dados guiarem sua relação com o preditor, que geralmente decorre de maneira não-linear. Os GAM permitem, casualmente, solucionar questões dos resíduos assimétricos e/ou heterocedásticos. Para falar sobre modelos aditivos generalizados, é necessário primeiro introduzir os polinômios por partes e regressão por *splines*. Considerando uma função de uma variável  $f(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^1$ , seja  $h_m(x)$  a  $m$ -ésima transformação de  $x$ ,  $m = 1, \dots, M$ . Um modelo considerando esta transformação pode ser representado pela Equação 21.

$$f(x) = \sum_{i=1}^M \beta_m h_m(x) \quad (21)$$

As funções por partes consideram  $h_m(X) = I(L_m \leq x < U_m)$  como funções indicadoras para regiões não sobrepostas para  $x$ , e para cada função indicadora pode ser considerada uma constante, um ajuste linear ou uma função polinomial. Sejam as funções de transformação  $h_1(x) = 1$ ,  $h_2(x) = x$ ,  $h_3(x) = x^2$ ,  $h_4(x) = x^3$ ,  $h_5(x) = (x - \xi_1)_+^3$ ,  $h_6(x) = (x - \xi_2)_+^3$ , onde  $\xi_1$  e  $\xi_2$  são os nós e  $t_+$  denota a parte positiva desses domínios. Considerando essas transformações na Equação 21, a função obtida é um polinômio cúbico por partes ou um *spline* cúbico. Para a região  $p$ -ésima, o modelo resultante terá a forma  $f(x)_p = \beta_{0p} + \beta_{1p}x + \beta_{2p}x^2 + \beta_{3p}x^3$ ,  $p = 1, \dots, 3$ . Para garantir a continuidade da função resultante nos nós e considerar os quatro parâmetros para cada uma das três regiões resultantes, podem ser definidas restrições de igualdade das funções nos nós. Por exemplo, para o nó  $\xi_1$ ,  $\beta_{01} + \beta_{11}\xi_1 + \beta_{21}\xi_1^2 + \beta_{31}\xi_1^3 = \beta_{02} + \beta_{12}\xi_1 + \beta_{22}\xi_1^2 + \beta_{32}\xi_1^3$ . Para uma transição suave, a continuidade nas derivadas de primeira e segunda ordem também pode ser adicionada. Para cada uma destas restrições adicionadas, um parâmetro do modelo pode ser diminuído. Portanto, neste caso, o modelo resultante terá seis parâmetros. Uma

*spline* cúbica terá  $4 + g$  graus de liberdade, onde  $g$  é o número de nós desejados (HASTIE et al., 2009).

Um problema com *splines* cúbicas está relacionado à alta variância nos limites da função estimada. Para evitar esse problema, uma abordagem chamada *splines* naturais, que apresenta duas restrições adicionais para tornar a função linear nos limites inicial e final, pode ser aplicada. As *splines* naturais liberam graus de liberdade do modelo 4, dois em cada limite. Esses graus de liberdade podem ser usados para adicionar mais nós na região interna do modelo. A posição dos nós pode ser definida dividindo os dados de treinamento em quartis e o número de nós pode ser definido através da validação cruzada. Uma abordagem para evitar o sobreajuste é suavizar as *splines*. A função perda para suavização de *splines* consiste em uma função perda quadrática penalizada de acordo com a Equação 22. O termo de penalização  $\lambda$  controla a suavização.  $\lambda = 0$  resulta em qualquer função  $f$  que interpola os dados, enquanto  $\lambda \rightarrow \inf$  ajusta mínimos quadrados ordinários já que nenhuma derivada de segunda ordem pode ser admitida. Esta abordagem também é útil para definir o número de nós (HASTIE et al., 2009; JAMES et al., 2021).

$$\sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int (f''(t))^2 dt \quad (22)$$

Os modelos aditivos generalizados estendem as *splines* a múltiplos preditores. Um modelo GAM pode ser escrito conforme a Equação 23 onde  $\alpha$  é uma constante e  $f(x_j)$ ,  $j = 1, \dots, k$  consiste em um modelo de regressão por *spline* para a  $j$ -ésima variável regressora.

$$f(x_1, x_2, \dots, x_k) = \alpha + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_k) \quad (23)$$

A função perda penalizada a ser minimizada pode ser escrita de acordo com a Equação 24. O Algoritmo 1 pode ser usado para estimar um modelo GAM. Em primeiro lugar, a constante é estimada como valores médios gerais de treinamento,  $\hat{\alpha} = \bar{y}$ . Em seguida, uma *spline* cúbica,  $S_j$ , é estimada para os preditores  $x_1, \dots, x_k$ . Para cada preditor  $x_j$ , a estimativa atual,  $\hat{f}_j$ , é obtida considerando as estimativas atuais das outras funções  $\hat{f}_l$ ,  $l \neq j$ . O processo é repetido até que  $\hat{f}_j$  estabilize (HASTIE et al., 2009).

$$\sum_{i=1}^N \left( y_i - \alpha - \sum_{j=1}^k f_j(x_{ij}) \right)^2 + \sum_{j=1}^k \lambda_j \int (f_j''(t_j))^2 dt_j \quad (24)$$

---

**Algorithm 1** Algoritmo de retroajuste para GAM. (HASTIE et al., 2009)
 

---

- 1: Inicialize  $\hat{\alpha} = \bar{y}_i$ ,  $\hat{f}_j \equiv 0$ ,  $\forall i, j$
- 2: Ciclo:  $j = 1, 2, \dots, k, \dots, 1, 2, \dots, k, \dots$

- a.

$$\hat{f}_j = S_j \left[ \{y_i - \hat{\alpha} - \sum_{l \neq j} \hat{f}_l(x_{il})\}_i^N \right]$$

- b.

$$\hat{f}_j = \hat{f}_j - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{f}_j(x_{ij})$$

- c. Até as funções  $\hat{f}_j$  mudarem menos do que um limite pré-especificado.

---

O GAM tem sido aplicado em vários estudos, como, por exemplo em Robson e Dourdet (2013). Os autores construíram modelos GAM que foram capazes de prever as concentrações de sedimentos suspensos, nutrientes dissolvidos e particulados no rio *Fitzroy* em um intervalo de tempo diário. O modelo GAM final forneceu previsões mais precisas em uma etapa de tempo diária do que os métodos disponíveis anteriormente, tanto para materiais dissolvidos quanto particulados, e foi usado para fornecer entradas de séries temporais para modelos marinhos mecanísticos. Richards et al. (2014) destacaram o uso de modelos GAM para explorar as relações funcionais entre quatro indicadores de qualidade da água comumente usados: nitrogênio total, fósforo total, amônia e nitrato; e uma variedade de fatores, incluindo fluxo de captação, velocidade do vento e marés atuais.

Ugwu e Zewotir (2020) aplicaram uma análise fatorial nos preditores para contornar a questão da multicolinearidade e um modelo GAM foi estimado para identificar os fatores de risco importantes que podem influenciar a prevalência da malária infantil na Nigéria. O GAM incorporou a complexidade dos dados da pesquisa, ao mesmo tempo em que modelou os efeitos aleatórios não lineares e espaciais para identificar de forma mais precisa os principais fatores de risco da malária que influenciam a distribuição geográfica da doença. O objetivo do artigo de Ankinakatte et al. (2013) foi desenvolver e comparar métodos para detecção precoce de mastite iminente com dados registrados automaticamente. Para prever a ocorrência de mastite, os autores aplicaram modelos de redes neurais e GAM usando o conjunto de treinamento. Os autores concluíram que, no geral, o desempenho de ambos foi semelhante, com nenhum dos métodos parecendo ser decisivamente superior. Fasiolo et al. (2020), motivados por uma aplicação industrial na previsão de carga elétrica, identificaram as áreas onde há falta de ferramentas modernas de visualização para GAM e abordaram as deficiências dos métodos existentes propondo um conjunto de ferramentas visuais que

foram rápidas o suficiente para uso interativo, dimensionáveis para grandes conjuntos de dados e que podem ser usadas em conjunto com uma ampla gama de distribuições de resposta. Os novos métodos visuais propostos pelos autores apresentaram bons resultados.

### 2.4.3 Métodos baseados em árvores

Métodos baseados em árvore são simples e úteis para interpretação. A abordagem de árvores para classificação e regressão (CART) foi proposta por Breiman et al. (1984). Esses métodos envolvem segmentar o espaço preditor em várias regiões retangulares simples e tomam como predição a média ou outra medida simples das observações de treinamento nessa região. Como o conjunto de regras de divisão usado para segmentar o espaço do preditor pode ser resumido em um diagrama semelhante a uma árvore, essa abordagem é conhecida como árvore de decisão (JAMES et al., 2013).

Considerando  $k$  variáveis de entrada e uma resposta, ou seja,  $(\mathbf{x}_i, y)$ , com  $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iK})$ , para  $i = 1, \dots, N$ , o algoritmo CART para regressão precisa em cada iteração definir a variável e o seu nível para particionar o espaço dos preditores. Considerando  $J$  regiões  $R_1, R_2, \dots, R_J$ , a resposta é uma constante  $\gamma_j$  em cada região,  $j = 1, \dots, J$ . Portanto, o modelo de árvore de regressão pode ser definido conforme a Equação 25,  $\theta = \{R_j, \gamma_j\}, j = 1, \dots, J$ , onde  $I(\mathbf{x} \in R_j)$  é uma função indicativa que recebe 1 se  $\mathbf{x}$  pertence a  $R_j$  e 0 caso contrário. O melhor  $\gamma_j$  para minimizar a soma dos quadrados é a média, para  $y_i \in R_j$ ,  $\hat{\gamma}_j = (\bar{y}_i | x_i \in R_j)$  (HASTIE et al., 2009).

$$f(\mathbf{x}) = T(\mathbf{x}, \theta) = \sum_{j=1}^J \gamma_j I(\mathbf{x} \in R_j) \quad (25)$$

Considerando todos os dados de treinamento, os semi-planos são definidos tomando uma variável para divisão  $x_k$ ,  $k = 1, \dots, k$ , e um ponto de divisão  $s$ ,  $R_1(k, s) = \mathbf{x} | x_k \leq s$  e  $R_2(k, s) = \mathbf{x} | x_k > s$ . Portanto, o algoritmo CART busca a variável para o particionamento  $k$  e o valor desta na divisão  $s$  resolvendo

$$\min_{k,s} \left[ \min_{\gamma_1} \sum_{x_i \in R_1(k,s)} (y_i - \gamma_1)^2 + \min_{\gamma_2} \sum_{x_i \in R_2(k,s)} (y_i - \gamma_2)^2 \right]. \quad (26)$$

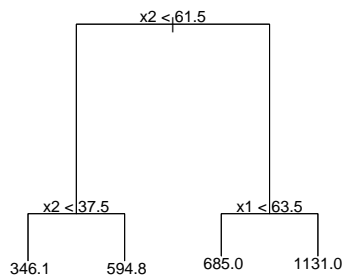
Para cada variável, o valor da variável na divisão  $s$  pode ser encontrado examinando todos os preditores, para obter o melhor par  $(k, s)$  (HASTIE et al., 2009).

A Figura 9 ilustra um modelo de árvore em função de dois regressores. Neste caso, foram realizadas três partições, representadas pelos três nós da árvore de regressão,

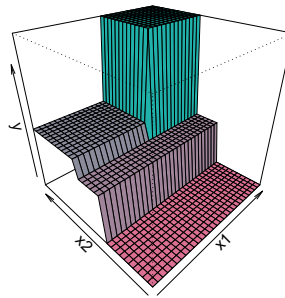
Figura 9a. Nesta representação, o primeiro nó está na parte superior, enquanto os ramos estão na parte inferior. Quatro regiões ou ramos foram obtidas no espaço dos regressores através da divisão binária recursiva, resultando em quatro valores previstos. Essas regiões retangulares podem ser observadas nas Figuras 9b e 9c, nas alturas distintas do gráfico de superfície e em cores distintas segundo o valor previsto da resposta.

**Figura 9 – Modelo de árvore de regressão**

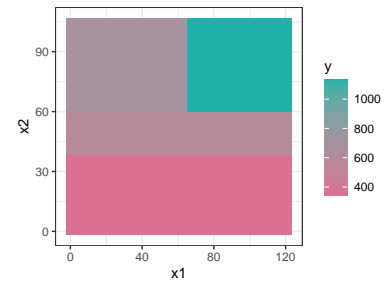
(a) Representação do modelo



(b) Gráfico de superfície



(c) Gráfico de contorno



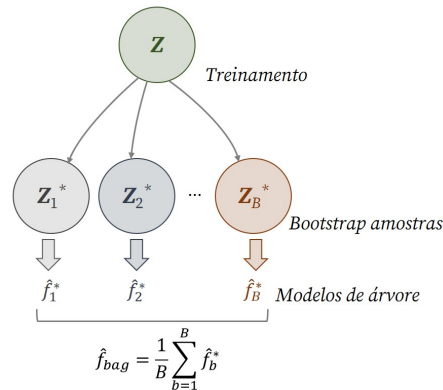
Fonte: Costa et al. (2023)

Para diminuir a variância das árvores de decisão, pode-se aplicar o método de árvores ensacadas via *bootstrap* (BAG - *Bagging Bootstrap Aggregated*). O BAG é um método para reduzir a variância e é particularmente eficiente quando aplicado a árvores de decisão (BREIMAN, 1996). Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes conjuntos de dados de treinamento por meio de *bootstrap*. Depois disso, uma árvore de decisão,  $\hat{f}^{*b}(\mathbf{x})$ , é estimada para o  $b$ -ésimo conjunto de treinamento *bootstrap*,  $b = 1, \dots, B$ , e finalmente uma previsão final é obtida através da média de todas as árvores em cada nível de  $\mathbf{x}$  de interesse, conforme a Equação 27 (JAMES et al., 2013).

$$\hat{f}_{bag}(\mathbf{x}) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \hat{f}^{*b}(\mathbf{x}) \quad (27)$$

Nas árvores ensacadas para regressão, cada árvore individual tem alta variância e baixa tendência. Seguindo o teorema do limite central, o modelo médio final apresenta variância reduzida quando comparado com as árvores individuais, entretanto com maior viés. A Figura 10 ilustra o procedimento de ensacamento.

**Figura 10 – Árvores ensacadas para regressão**



**Fonte: Próprio autor**

A partir de seu surgimento, houve muito interesse em aplicar o BAG. O estudo de Mulugeta et al. (2023) teve como objetivo prever o risco de falha do enxerto entre receptores pós-transplante na Etiópia usando os modelos de previsão de aprendizado de máquina selecionados. Foram aplicados modelos probabilísticos selecionados baseados em mérito: regressão logística, Bayes ingênuo e rede neural artificial; e baseados em árvores: RF, BAG e GBM. A comparação do modelo foi realizada em termos de desempenho de classificação. Os autores concluíram que os métodos BAG e GBM são boas escolhas para previsões de risco clínico. Mehrpour et al. (2023) realizaram um estudo para desenvolver um modelo baseado em árvore de decisão para auxiliar no diagnóstico de casos de intoxicação. Os resultados do estudo também indicaram que os modelos obtidos via BAG e árvore de decisão, forneceram melhores resultados para diagnosticar os casos de intoxicação. Lau et al. (2023) propuseram um teste estatístico que emprega BAG e RF na previsão de risco genético. Os autores mostraram que ambos os métodos tem poder estatístico na previsão de risco genético. Noguchi et al. (2023) investigaram a possibilidade de diagnosticar Síndrome de Sjögren por não contato e observação de imagem da superfície da língua. Os pesquisadores construíram modelos de previsão de diagnóstico com base no método BAG e métodos de empilhamento combinados com três modelos de aprendizado de máquina para avaliação comparativa. O método proposto permitiu auxiliar na detecção precoce da Síndrome de Sjögren de forma simples e conveniente, eliminando o risco de infecção no momento do diagnóstico, e deve ser validado e otimizado na prática clínica.

Floresta aleatória (RF - *Random Forest*) é uma abordagem mais recente que tenta melhorar os resultados do BAG decorrelacionando as árvores estimadas nas amostras de *bootstrap*. Floresta Aleatória é um modelo baseado em árvores de decisão que lida bem com conjuntos de dados de alta dimensão e com presença de multicolinearidade (BELGIU;

DRĂGUT, 2016). Esta abordagem foi proposta por Breiman (2001). Assim como em BAG, na RF, as  $B$  árvores de decisão são obtidas em amostras de treinamento *bootstrap*. A diferença é que ao construir essas árvores de decisão, em cada particionamento realizado em uma árvore, uma amostra aleatória de  $m$  preditores,  $m < k$ , é escolhida como candidata de todos os  $k$  preditores. O procedimento visa minimizar o favorecimento de preditores devido à multicolinearidade. Para regressão, é recomendado considerar  $m = k/3$  preditoras em cada particionamento binário recursivo (HASTIE et al., 2009).

O método RF é usado em diversas aplicações, como mostrado em um estudo recente realizado por Bustillo et al. (2022). Eles estudaram o efeito de uma nova estratégia para melhorar a precisão de modelos de aprendizado de máquina, ao considerar a repetição das medições como observações de treino ao invés de tomar a média das medições. O estudo se concentrou na previsão da vida da ferramenta nas operações de faceamento de discos de aço AISI 1045, considerando diferentes sistemas de refrigeração e geometrias de ferramentas. Diferentes algoritmos de aprendizado de máquina, como árvores de regressão, redes neurais artificiais, BAG e RF foram testados. Os autores concluíram que RF forneceu modelos com precisão na mesma faixa das redes neurais artificiais, mas sem procedimento de ajuste. A abordagem pode ser questionada uma vez que, ao se considerar medições como replicações, naturalmente se aumenta o número de observações de treino, diminuindo o erro dos modelos, segundo o teorema central do limite.

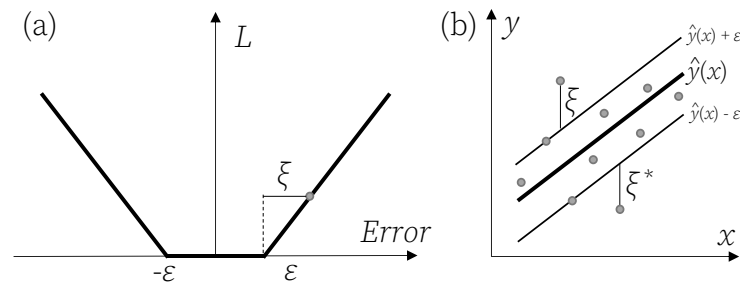
John et al. (2023) estudaram a aplicação do método RF para analisar áudio coletado por um único microfone durante operações de fresamento. O RF demonstrou uma capacidade de analisar e classificar a vibração por meio de uma abordagem de baixo custo, com dados de treinamento limitados necessários. Wang et al. (2023) conduziram um estudo que combinou um modelo genético com técnicas de aprendizado estatístico para prever placas de aterosclerose avançada. O método RF foi aplicado para filtrar os 30 principais genes que mais contribuem. Os autores concluíram que o modelo de predição estabelecido mostrou poder preditivo satisfatório em ambos os conjuntos de dados, treinamento e teste. Yang et al. (2023) aplicaram técnicas de aprendizado de máquina para prever com precisão o atraso de voos. Eles construíram e compararam o desempenho de várias abordagens para prever atrasos na partida, incluindo três métodos tradicionais de aprendizado de máquina, RF, árvore de decisão, reforço extremo de gradiente (XGB) além de modelos de rede convolucional de garfos, rede de atenção de garfos, amostragem e agregação de garfos e modelos integrados de rede convolucional de garfos e amostragem e agregação de garfos. Os resultados mostraram que as abordagens de aprendizagem de máquinas podem apoiar a previsão dinâmica e precisa de atrasos de partida e o gerenciamento refinado de voos em

trânsito para alívio de atrasos.

#### 2.4.4 Máquina de vetores de suporte

Drucker et al. (1996) propuseram as máquinas de vetores de suporte para regressão (SVR - *Support Vector Regression*), um método que confirma os conceitos da teoria de aprendizado estatístico de Vapnik (1999b). O processo de aprendizado com SVR é realizado no espaço de um subconjunto dos dados de treinamento, chamados de vetores de suporte. Sejam os dados de treinamento  $(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , com  $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ik}]^T$ . O SVR busca uma função com desvio máximo  $\varepsilon$  para os dados de treinamento. A Figura 11 ilustra a função perda  $\varepsilon$ -insensitiva.

**Figura 11 – (a) Função perda  $\varepsilon$ -insensitiva; (b) Modelo de regressão SVR**



**Fonte: Próprio autor**

Seja um modelo linear, segundo a Equação 28.

$$\hat{y}_i = \mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + b, \quad i = 1, \dots, N \quad (28)$$

Para estimar os parâmetros deste modelo, pode-se considerar uma função perda mais um termo de regularização, conforme a Equação 29, onde  $C$  é uma constante de regularização (VAPNIK, 1999a).

$$C \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{y}_i) + \mathbf{w}^T \mathbf{w} \quad (29)$$

A função perda  $\varepsilon$ -insensitiva usada em SVR é apresentada na Equação 30, com  $\xi_i = |y_i - \hat{y}_i| - \varepsilon$ .

$$L = \begin{cases} 0, & \text{if } |y_i - \hat{y}_i| < \varepsilon \\ |y_i - \hat{y}_i| - \varepsilon, & \text{ou} \end{cases} \quad (30)$$

O problema primal de SVR pode ser expresso conforme a Equação 31 (VAPNIK, 1999a).

$$\begin{aligned} & \text{Min } \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + C \sum_{i=1}^N (\xi_i + \xi_i^*) \right\} \\ & \text{s.t.: } \begin{cases} y_i - [\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + b] \leq \varepsilon + \xi_i \\ [\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + b] - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^* \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (31)$$

Para resolver este problema mais facilmente, a formulação dual pode ser considerada. Além disso, a formulação dual permitirá a extensão da regressão do vetor de suporte para problemas não lineares. Porém, antes, é adequado apresentar a formulação lagrangiana para o problema de regressão do vetor de suporte primal, conforme a Equação 32, onde  $\alpha_i$ ,  $\alpha_i^*$ ,  $\eta_i$  e  $\eta_i^*$  são os multiplicadores de Lagrange, que devem ser não-negativos (VAPNIK, 1999a; DRUCKER et al., 1996).

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + C \sum_{i=1}^N (\xi_i + \xi_i^*) - \sum_{i=1}^N \alpha_i (\varepsilon + \xi_i - y_i + \mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + b) \\ & - \sum_{i=1}^N \alpha_i^* (\varepsilon + \xi_i^* - \mathbf{x}_i^T \mathbf{w} - b + y_i) - \sum_{i=1}^N (\eta_i \xi_i + \eta_i^* \xi_i^*) \end{aligned} \quad (32)$$

Derivando a função Lagrangeana em relação às variáveis do problema primal,  $\mathbf{w}$ ,  $b$ ,  $\xi_i$  e  $\xi_i^*$ , e igualando-as a zero, as condições de otimização de primeira ordem são obtidas conforme segue (SMOLA; SCHÖLKOPF, 2004).

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial b} &= \sum_{i=1}^N (\alpha_i + \alpha_i^*) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} &= \mathbf{w} - \sum_{i=1}^N (\alpha_i + \alpha_i^*) \mathbf{x}_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i} &= C - \alpha_i - \eta_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i^*} &= C - \alpha_i^* - \eta_i^* = 0 \end{aligned} \quad (33)$$

Substituindo os resultados das Equações 33 na Equação 31, obtém-se a formulação dual do problema de SVR, conforme segue Equação 34 (VAPNIK, 1999a; DRUCKER et

al., 1996).

$$\begin{aligned} \text{Max} \quad & \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N (\alpha_i - \alpha_i^*) (\alpha_j - \alpha_j^*) \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j - \varepsilon \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha_i^*) \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^N y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \right\} \\ \text{s.t.:} \quad & \begin{cases} \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ \alpha_i, \alpha_i^* \in [0, C] \end{cases} \end{aligned} \quad (34)$$

Nesta formulação dual,  $\mathbf{w}$  é reescrito como uma combinação linear das observações de treinamento,  $\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j$ . Na formulação dual,  $\eta_i$  e  $\eta_i^*$  foram descritos considerando  $C$ ,  $\alpha_i$  e  $\alpha_i^*$  e, portanto, esses foram eliminados. Além disso,  $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^N (\alpha_i + \alpha_i^*) \mathbf{x}_i$ . Nesse sentido, na regressão do vetor de suporte, o modelo inicial apresentado na Equação 28 pode ser reescrito como combinações lineares dos dados de treinamento, segundo a Equação 35. No entanto, o modelo inclui apenas os vetores de suporte, ou seja,  $\mathbf{x}_i$  tal que  $\alpha_i > 0$  ou  $\alpha_i^* > 0$ ,  $i = 1, \dots, N$ . O SVR aumenta a dimensionalidade no espaço vetorial de suporte em vez do espaço dos preditores (VAPNIK, 1999a).

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i \mathbf{x} + b \quad (35)$$

O modelo SVR depende apenas do produto escalar dos dados de treinamento,  $\mathbf{x}_i$ . Para aproximar as funções complexas, o produto escalar  $\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j$  pode ser substituído por um kernel,  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ . Algumas opções incluem o *kernel* linear,  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j$ , o *kernel* polinomial,  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j + c)^d$ , e o kernel de base radial,  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp(-\gamma \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2)$ . Portanto, o modelo SVR final pode ser expresso conforme a Equação 36. De acordo com o *kernel* selecionado, os hiperparâmetros, como  $\gamma$  e a constante de regularização,  $C$ , devem ser escolhidos por validação cruzada.

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha_i^*) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b \quad (36)$$

Tarefas de fabricação inteligente têm usado regressão de vetor de suporte para modelagem. Bai et al. (2019) aplicaram SVR com técnicas de redução de dimensionalidade para previsão de qualidade de fabricação. Zhao et al. (2020) obtiveram modelo de previsão de rugosidade, baseado na otimização inspirada em pombos e máquina de vetores de suporte, e seu erro de previsão foi de apenas 8,69% na etapa inicial. Hui et al. (2020) apresentaram uma abordagem de modelagem orientada por dados para avaliar a qualidade de montagem de um eixo linear com base no método de seleção de variáveis de informação mútua normalizada e amostragem aleatória com reposição, técnica de *oversampling sintético*

e máquina de vetores de suporte otimizada por algoritmo genético. Mazid et al. (2023) estudaram o torneamento da liga Ti-6Al-4V usando pastilhas de metal duro revestidas e não revestidas com diferentes raios de ponta e subsequentemente aplicaram técnicas de aprendizado de máquina para modelar a rugosidade (Ra). Os resultados mostraram que o SVR como uma abordagem de aprendizado tem alta capacidade de previsão. Jassim et al. (2023) compararam os métodos de aprendizagem de máquinas para análise de sentimentos: RF, K-vizinhos mais próximos, rede neural artificial, GBM, SVR, adaptação para o reforço, XGB, árvore de decisão e BAG com *light* GBM. Os resultados obtidos indicaram que o modelo SVR apresentou maior capacidade de previsão.

#### 2.4.5 Aprendizado por Reforço

O algoritmo da máquina de reforço por gradiente (GBM - *Gradient Boosting Machine*) foi proposto por Friedman (2001). Métodos numéricos, como a descida mais íngreme, procuram aproximar os pontos de treinamento diminuindo uma função perda iterativamente na direção do gradiente. No entanto, o objetivo principal do GBM é generalizar  $f_M(\mathbf{x})$ , considerando  $m = 1, \dots, M$  iterações, para prever observações futuras.

O Algoritmo 2 apresenta a abordagem GBM para árvores de regressão. Busca-se uma função de aproximação ao negativo do gradiente  $m$ -ésima iteração. Neste caso, é considerada uma função perda quadrática. Inicia-se com uma estimativa inicial da função perda  $f_0(\mathbf{x})$  para todos os dados de treinamento. Tomando  $m = 1, \dots, M$  iterações, o método GBM para árvore de regressão começa calculando o negativo do gradiente da função perda em relação à função em busca, considerando sua estimativa anterior para todos os dados de treinamento,  $r_{im} = -\partial L(y_i, f(\mathbf{x}_i)) / \partial f(\mathbf{x}_i)$ ,  $f(\mathbf{x}) = f_{m-1}(\mathbf{x}_i)$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Para essa função perda o gradiente é justamente o resíduo. Porém, como a função perda pode ser outra, como o erro absoluto ou a função perda de Huber,  $r_{im}$  é chamado de pseudo-resíduos. Como pode ser confirmado na etapa 2(a), ao considerar uma função perda quadrática,  $L(y_i, f(\mathbf{x}_i)) = (y_i - f(\mathbf{x}_i))^2 / 2$ , o resultado do gradiente é o valor residual,  $r_{im} = -(y_i - f(\mathbf{x}_i))_{f=f_{m-1}}$ ,  $i = 1, \dots, N$ . No passo 2(b) uma árvore de regressão é ajustada aos valores negativos do gradiente,  $r_{im}$ , considerando as regiões terminais ou folhas,  $R_{jm}$ ,  $j = 1, \dots, J_m$  na  $m$ -ésima iteração. As constantes ótimas  $\gamma_{rm}$  são obtidas conforme o passo 2(c). Para a função perda quadrática estas são obtidas como a média dos resíduos em cada região,  $\gamma_{jm} = \bar{r}_{im}$ ,  $\mathbf{x}_i \in R_{jm}$ ,  $j = 1, \dots, J_m$ , para a  $m$ -ésima iteração. A última etapa do *loop* iterativo é atualizar o preditor segundo a etapa 2(d). Após executar essas etapas  $M$  vezes, o modelo otimizado é entregue como  $\hat{f}(\mathbf{x}) = f_M(\mathbf{x})$ .

---

**Algorithm 2** GBM com árvores de regressão. Friedman (2001), Hastie et al. (2009)

---

1: Inicialize  $f_0(\mathbf{x}) = \arg \min_{\gamma} \sum_{i=1}^N L(y_i, \gamma)$

2: **for**  $m = 1, 2, \dots, M$  **do**

a. **for**  $i = 1, \dots, N$  **calcule**

$$r_{im} = -(y_i - f(\mathbf{x}_i))_{f=f_{m-1}}$$

b. **for**  $j = 1, \dots, J_m$ , ajustar um árvore para  $r_{im}$  gerando  $R_{jm}$

c. **for**  $i = 1, \dots, N$  **calcule**

$$\gamma_{jm} = \arg \min_{\gamma} \sum_{\mathbf{x}_i \in R_{jm}} L(y_i, f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + \gamma)$$

d. Atualize  $f_m(\mathbf{x}) = f_{m-1}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{J_m} \gamma_{jm} I(\mathbf{x} \in R_{jm})$

3: **end for**

4: Modelo final  $\hat{f}(\mathbf{x}) = f_M(\mathbf{x})$

---

O algoritmo de reforço extremo de gradiente (XGB - *Extreme Gradient Boosting*) apresenta algumas melhorias ao GBM. O XGB foi proposto por Chen e Guestrin (2016). A função perda do XGB apresenta um termo de regularização  $\Omega$  para penalizar a complexidade do modelo. A melhoria na função perda é usada para avaliar os candidatos ao particionamento nas árvores. A Equação 37 apresenta a função perda do XGB, onde  $h_m(\mathbf{x}_i) = \sum_j \gamma_{jm} I(\mathbf{x} \in R_{jm})$  é um modelo de árvore, e  $\Omega_m(h_{mJ})$  é o termo de regularização.

$$L = \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + h_m(\mathbf{x}_i)) + \Omega_m(h_{mJ}) \quad (37)$$

Em vez de tomar o gradiente negativo da função perda como o GBM, o XGB considera uma expansão de Taylor de segunda ordem, semelhante ao método de Newton. Portanto, a função perda pode ser reescrita da seguinte forma,

$$L = \sum_{i=1}^N \left[ L(y_i, f_{m-1}) + \frac{\partial L(y_i, f_{m-1})}{\partial f_{m-1}} h_m + \frac{\partial^2 L(y_i, f_{m-1})}{\partial f_{m-1}^2} h_m \right] + \Omega_m(h_{mJ}),$$

que pode ser simplificada conforme a Equação 38, retirando o termo constante, que não contribui para a otimização, e substituindo as derivadas de primeira e segunda ordem da função perda por  $g_i$  e  $k_i$ , respectivamente.

$$L = \sum_{i=1}^N [g_i h_m + k_i h_m] + \Omega_m(h_{mJ}) \quad (38)$$

O termo de regularização das árvores,  $\Omega_m(h_{mJ}) = \rho J + 0.5\lambda \sum_j \gamma_{jm}^2$ , possui dois termos, o primeiro para controlar o crescimento da árvore e o segundo para suavizar a árvore final e evitar sobreajuste.

Substituindo  $h_m(\mathbf{x}_i)$  por um modelo de árvore e retirando o índice  $m$  para simplificar,

$$L = \sum_{i=1}^N \left[ g_i \sum_j \gamma_j I(\mathbf{x} \in R_j) + k_i \left( \sum_j \gamma_j I(\mathbf{x} \in R_j) \right)^2 \right] + \rho J + \frac{1}{2} \lambda \sum_j \gamma_j^2$$

$$L = \sum_{j=1}^J \left[ \left( \sum_{i \in R_j} g_i \right) \gamma_j + \frac{1}{2} \sum_{i \in R_j} (k_i + \lambda) \gamma_j^2 \right] + \rho J \quad (39)$$

Como esta última forma da função perda do XGB é uma função quadrática, o valor mínimo é obtido como derivada de primeira ordem em relação a  $\lambda_j$  e igualado a zero:

$$\lambda_j^* = \frac{-\sum_{i \in R_j} g_i}{\sum_{i \in R_j} (k_i + \lambda)} \quad (40)$$

Substituindo 40 em 39 resulta no valor ótimo da função perda, conforme Equação 41.

$$L^* = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \left( \frac{\left( \sum_{i \in R_j} g_i \right)^2}{\sum_{i \in R_j} h_i + \lambda} \right) + \rho J. \quad (41)$$

Como é impossível avaliar todas as estruturas da árvore em construção, é utilizado um algoritmo guloso que parte de uma única folha e iterativamente adiciona ramificações à árvore. Considerando  $R_l$  e  $R_r$  como os particionamentos (regiões) geradas à esquerda e à direita; e  $R = R_l \cup R_r$ , a redução da função perda após um particionamento é calculada conforme a Equação 42.

$$L_{split} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\left( \sum_{i \in R_l} g_i \right)^2}{\sum_{i \in R_l} h_i + \lambda} + \frac{\left( \sum_{i \in R_r} g_i \right)^2}{\sum_{i \in R_r} h_i + \lambda} - \frac{\left( \sum_{i \in R} g_i \right)^2}{\sum_{i \in R} h_i + \lambda} \right] \quad (42)$$

O Algoritmo 3 resume a abordagem XGB. Um último parâmetro importante para reduzir a importância de cada árvore nos modelos de aprendizado por reforço é a taxa de aprendizagem,  $\eta$ , a qual consiste em uma constante que multiplicada à previsão da árvore somada na  $m$ -ésima iteração na linha final de atualização do modelo em ambos algoritmos.

---

**Algorithm 3** Reforço Extremo de Gradiente (XGB). Chen e Guestrin (2016)
 

---

1: Inicialize  $f_0(\mathbf{x}) = \arg \min_{\gamma} \sum_{i=1}^N L(y_i, \gamma)$

2: **for**  $m = 1, 2, \dots, M$ ,  $i = 1, \dots, N$  **do**

a.

$$g_i = \left[ \frac{\partial L(y_i, f(\mathbf{x}_i))}{\partial f(\mathbf{x}_i)} \right]_{f=f_{m-1}}$$

b.

$$k_i = \left[ \frac{\partial^2 L(y_i, f(\mathbf{x}_i))}{\partial f^2(\mathbf{x}_i)} \right]_{f=f_{m-1}}$$

c. Determine as partições da árvore  $R_{jm}$ ,  $j = 1, \dots, J$ , para maximizar

$$L_{split}, \text{ Equação 42}$$

d. Determine a previsão  $\gamma_{jm}$  em cada região,  $j = 1, \dots, J$  como

$$\gamma_{jm} = \frac{-\sum_{i \in R_{jm}} g_i}{\sum_{i \in R_{jm}} (k_i + \lambda)}$$

e. Atualize  $f_m(\mathbf{x}) = f_{m-1}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^J \gamma_{jm} I(\mathbf{x} \in R_{jm})$

3: **end for**

4: Modelo final  $\hat{f}(\mathbf{x}) = f_M(\mathbf{x})$

---

O reforço extremo de gradiente, popularmente conhecida como o XGB, é uma técnica de aprendizado de máquina supervisionada, baseada em árvores de decisão (CHEN; GUESTRIN, 2016). Ela faz uso de processamento paralelo, manipulação de valores ausentes e regularização, evitando o *overfitting* e visando obter melhores resultados com menores recursos computacionais. Assim, é bastante utilizada para predição em diferentes contextos. Dhar et al. (2022) construíram modelos para o processo de deposição direta de energia de aço inoxidável austenítico utilizando XGB. Os autores concluíram que a adequação dos modelos desenvolvidos se mostrou aceitável. Li et al. (2023) tiveram como objetivo desenvolver um modelo de aprendizado de máquina para identificar características clínicas importantes relacionadas às rupturas do manguito rotador usando métodos de aprendizado para prever com eficiência pacientes ambulatoriais. Seis algoritmos de aprendizado de máquina foram aplicados para a previsão incluindo o XGB. O modelo XGB mostrou desempenho superior e identificou com sucesso variáveis clínicas importantes para prever pacientes com rupturas.

Prasad et al. (2022) usaram modelos de aprendizado de máquina para estimar a rugosidade durante a usinagem de hastes de aço inoxidável AISI 304. Quatro algoritmos

baseados em aprendizado de máquina foram usados para prever a rugosidade média neste estudo: GBM, árvores de decisão, XGB e RF. Os resultados confirmaram que os modelos XGB e GBM tiveram a maior precisão na previsão de  $Ra$ . Nguyen et al. (2021) aplicaram seis modelos baseados em aprendizado de máquina, incluindo o XGB, para prever a  $Ra$ . Os resultados gerais indicaram que o modelo XGB prevê  $Ra$  com a maior precisão, sendo o melhor modelo segundo as métricas de avaliação usadas.

Wu et al. (2023) construíram um modelo usado para o diagnóstico preciso da dermatite atópica usando marcadores biológicos relacionados à piroptose por meio dos métodos de aprendizado de máquina. O modelo XGB mostrou-se ideal para o diagnóstico preciso de pacientes com dermatite atópica. Zhao e Jiang (2023) compararam a capacidade de diferentes modelos de aprendizado de máquina para prever metástases em pacientes com câncer de mama masculino. Quatro modelos de aprendizado de máquina foram desenvolvidos usando dados de pacientes. O modelo XGB foi o melhor preditor de metástase e, além disso, o modelo XGB apresentou-se como um modelo poderoso para prever metástases ósseas e pulmonares. O estudo de Bjerregaard (2023) demonstrou como a modelagem flexível de aprendizado de máquina pode complementar a modelagem estatística de regressão logística multinomial, como uma análise de sensibilidade e ferramenta de modelagem preditiva na pesquisa em saúde ocupacional. Os autores concluíram que os modelos flexíveis de aprendizado de máquina, como o XGB, podem complementar métodos estatísticos tradicionais, fornecendo uma referência para desempenho preditivo e capacidade.

## 2.5 MÉTODOS EVOLUTIVOS DE OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO

A maioria dos problemas reais requer a otimização simultânea de múltiplos objetivos, ou seja, de um conjunto de  $m$  funções objetivo de interesse. Um problema de otimização multiobjetivo pode ser descrito segundo a seguinte Equação 43,

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{x}}{\text{Minimizar}} \quad & \mathbf{F}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x}))^T \\ \text{sujeito a} \quad & \mathbf{x} \in \Omega \end{aligned} \tag{43}$$

onde  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)$  é um vetor das  $k$  variáveis de decisão,  $\Omega$  é o espaço de decisão  $k$ -dimensional e  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  é o vetor  $m$ -dimensional de funções objetivo,  $f_j(\mathbf{x}), j = 1, \dots, m$ .

A solução ótima de um problema de otimização multiobjetivo não é única, mas

constitui um conjunto de soluções que compõem a fronteira de Pareto (MARTÍNEZ et al., 2009). A fronteira de Pareto é formada por um conjunto de soluções no qual a melhora de um objetivo só acontece se em pelo menos um dos demais objetivos houver uma piora (HOSSEINI et al., 2016). Uma solução  $\mathbf{x}^*$  é dita Pareto-ótima se não houver outra solução que a domine  $\mathbf{x}^*$ . O conjunto ótimo de Pareto  $\mathbf{P}_s$  é composto por todas as soluções não dominadas ou ótimas de Pareto, e a fronteira de Pareto  $\mathbf{P}_f$  inclui os valores das funções objetivo avaliadas em todas as soluções ótimas de Pareto, ou seja,  $\mathbf{P}_f = \{\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = (f_1(\mathbf{x}^*), f_2(\mathbf{x}^*), \dots, f_m(\mathbf{x}^*))^T | \mathbf{x}^* \in \mathbf{P}_s\}$  (QIAO et al., 2020; WANG et al., 2019).

Entre as abordagens disponíveis para otimização multiobjetivo, os algoritmos evolutivos multiobjetivo (MOEA - *Multiobjective Evolutionary Algorithm*) incluem operações evolutivas como cruzamento e mutação que melhoram iterativamente as soluções para atingir o conjunto de Pareto em uma única execução. Várias abordagens MOEA foram empregadas nos últimos dois anos para resolver problemas práticos (ZAPOTECAS-MARTÍNEZ et al., 2023). O método de otimização MOPSO-CD, CaRamel e NSGA-II foram aplicados neste trabalho para resolver o problema de otimização multiobjetivo.

Para comparar o desempenho de diferentes MOEA, estão disponíveis vários indicadores de desempenho. Alguns indicadores são dedicados à comparação de algoritmos na resolução de problemas de referência para otimização multiobjetivo, onde a verdadeira fronteira de Pareto é conhecida. Esses problemas de referência são concebidos matematicamente para testar a eficiência de diferentes métodos de otimização. A distância geracional e métricas relacionadas são usadas para medir a distância da aproximação da fronteira de Pareto obtida à verdadeira fronteira de Pareto (ZAPOTECAS-MARTÍNEZ et al., 2023). Em problemas práticos, o indicador de hipervolume tornou-se um dos indicadores mais populares, pois mede convergência, dispersão e uniformidade das soluções (SANDOVAL et al., 2022). Seja a fronteira de Pareto  $\mathbf{F}(\mathbf{x}_1^*), \dots, \mathbf{F}(\mathbf{x}_N^*)$  e um ponto de referência  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^m$ . O hipervolume é calculado de acordo com a Equação 44, onde  $\mathcal{L}(\cdot)$  é a medida de Lebesgue (SANDOVAL et al., 2022). (AUDET et al., 2021).

$$\mathcal{H}(\mathbf{F}(\mathbf{x}_1^*), \dots, \mathbf{F}(\mathbf{x}_N^*); \mathbf{r}) = \mathcal{L} \left( \bigcup_{i=1}^N \mathbf{F}(\mathbf{x}_i^*, \mathbf{r}) \right) \quad (44)$$

Algumas soluções podem ser selecionadas através de abordagens de tomada de decisão para discutir aspectos práticos. Para isso, a abordagem do pseudopeso é aplicada. Através desta, cada solução pode ser associada a pesos, auxiliando o tomador de decisão na seleção da solução desejada. O pseudopeso para a  $j'$ -ésima função objetivo pode ser

calculado através da Equação 45. Mais detalhes sobre essa abordagem são apresentados por Deb (2001).

$$\omega_{j'} = \frac{(f_{j'}^{max} - f_{j'}(\mathbf{x})) / (f_{j'}^{max} - f_{j'}^{min})}{\left(\sum_{j=1}^m (f_{j'}^{max} - f_{j'}(\mathbf{x})) / (f_{j'}^{max} - f_{j'}^{min})\right)} \quad (45)$$

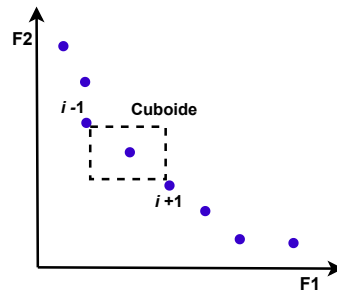
### 2.5.1 Otimização multiobjetivo por enxame de partículas (MOPSO-CD)

O método de Otimização de Enxame de Partículas (PSO *Particle Swarm Optimization*) foi introduzido em meados da década de 90 por Kennedy e Eberhart (KENNEDY; EBERHART, 1995). A técnica surgiu com base no comportamento social dos pássaros a procura de alimento ou de um local para construção do ninho. Nessa busca, todo indivíduo (partícula) pode aprender com as experiências dos integrantes do grupo (enxame) (EBERHART; SHI, 2011; RIZZI et al., 2016). A partir disso, foi apresentado um algoritmo de otimização que oferece benefícios como uso mínimo de memória, pouca velocidade de processamento e um processo de busca que é aprimorado pelo constante aprendizado das partículas (EBERHART; SHI, 2011).

Posteriormente, o PSO foi estendido em Coello e Lechuga (2002), para resolução de problemas de otimização multiobjetivo, sendo então denominado Otimização Multiobjetivo por Enxame de Partículas (MOPSO - *Multi-Objective Particle Swarm Optimization*). Finalmente, outro refinamento descrito em Raquel e Jr (2005) passa a adotar o operador de *Crowding Distance* no processo de aproximação da fronteira de Pareto. Esse último algoritmo, conhecido como Otimização de Enxame de Partículas Multiobjetivo com Distância de Aglomeração (MOPSO-CD - *Multi-Objective Particle Swarm Optimization with Crowding Distance*), será aplicado neste trabalho.

O algoritmo MOPSO-CD incorpora o mecanismo de cálculo da distância de aglomeração no algoritmo do PSO, especificamente na seleção do ótimo global e no método de exclusão de um arquivo externo de soluções não dominadas. O mecanismo de distância de aglomeração, com um operador de mutação, mantém a diversidade de soluções não dominadas no arquivo externo (RAQUEL; JR, 2005). O valor da distância de aglomeração de uma solução fornece uma estimativa da densidade de soluções em torno da solução de referência (KALYANMOY, 2000). A Figura 12 representa o cálculo da distância de aglomeração. Para cada solução na Fronteira de Pareto, a distância de aglomeração é calculada. A distância é determinada pela distância euclidiana entre as soluções vizinhas no espaço objetivo.

**Figura 12 – Representação do cálculo da distância de aglomeração**



**Fonte: Próprio autor**

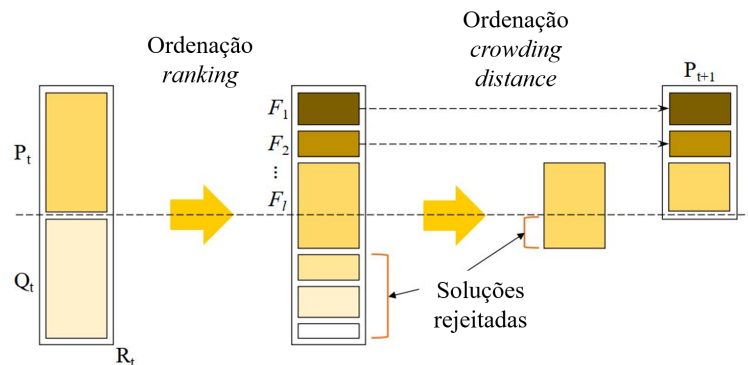
Arora (2020) aplicou a otimização multiobjetivo usando algoritmos evolutivos NSGA-II e MOPSO-CD para explorar os melhores níveis dos parâmetros de entrada e o *trade off* entre dois objetivos. Com base em três funções objetivo, incluindo potência, eficiência e coeficiente ecológico de desempenho de um motor *Stirling*, Dai et al. (2018) aplicaram o MOPSO-CD para maximizar simultaneamente as três funções objetivo. Wang et al. (2012) propuseram um novo algoritmo híbrido multiobjetivo de enxame de partículas e aprendizado Baldwiniano, MOPSOCD-BL, para resolver o problema de programação de *flow shop* com objetivo de minimizar o makespan e o tempo ocioso total das máquinas. Resultados experimentais mostraram que esse algoritmo ajuda a obter soluções mais uniformemente distribuídas. A literatura mostra que a abordagem MOPSO-CD é competitiva para a convergência na resolução de problemas multiobjetivo.

### 2.5.2 Algoritmo genético de ordenação não-dominado II (NSGA-II)

Os algoritmos evolutivos multiobjetivo são conhecidos por compor abordagens competitivas, uma vez que podem atingir um conjunto ótimo de Pareto em uma única execução, devido à sua estratégia populacional de explorar o espaço de projeto viável (DEB, 2015). O Algoritmo Genético de Seleção Não Dominada II (NSGA-II - *Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II*), proposto por Deb et al. (2002a), é a segunda versão do NSGA de Srinivas e Deb (1994), e foi proposto para resolver problemas multiobjetivo, ou seja, problemas com até três objetivos conflitantes. A ideia é classificar as fronteiras de Pareto utilizando dois procedimentos: o primeiro ordena as soluções não-dominadas e o segundo estima a densidade de soluções no entorno de um indivíduo usando o já mencionado mecanismo de distância de aglomeração.

O procedimento geral do NSGA-II está ilustrado na Figura 13, onde  $t$  refere-se à iteração corrente. Seja uma população  $P_t$  de tamanho  $N$  formada por indivíduos gerados aleatoriamente e ordenados. Os outros  $N$  indivíduos  $Q_t$  são obtidos a partir de operadores genéticos, tais como cruzamento e mutação, utilizando indivíduos escolhidos aleatoriamente do conjunto  $P_t$ . A população completa  $R_t$  é dada por  $R_t = P_t \cup Q_t$ , onde  $|R_t| = 2N$ . Os procedimentos de ordenação e de distância de aglomeração são aplicados à população  $R_t$  para classificar as fronteiras  $F_1, \dots, F_j$ . Os primeiros  $N$  elementos sobrevivem e compõem  $P_{(t+1)}$ . Operadores genéticos são aplicados, como mencionados acima, para gerar  $Q_{(t+1)}$ , e o procedimento é repetido até satisfazer um critério de parada. Dado um indivíduo  $j$ , a medida de ordenação  $r_j$  corresponde à quantidade de soluções que dominam  $j$  na iteração  $t$ . Logo, todos os indivíduos que possuem  $r_j = 0$  são armazenados em  $F_1$ ; os indivíduos com  $r_j = 1$  são armazenados em  $F_2$  e assim por diante. No final de uma iteração do NSGA-II, todos os indivíduos da população encontram-se classificados em uma fronteira. Detalhes do algoritmo são encontrados em Deb et al. (2002a).

**Figura 13 – Algoritmo genético de seleção não dominada II (NSGA-II)**



**Fonte: Adaptado de Deb et al. (2002b)**

O algoritmo NSGA-II foi utilizado por Sen et al. (2014) em um problema de otimização de portfólio biobjetivo. Três algoritmos populares de otimização multiobjetivo foram usados para resolver este problema: método de recozimento simulado multiobjetivo, NSGA-II e MOPSO-CD. Os resultados comparativos mostraram que o NSGA-II tem o melhor desempenho em comparação com os outros dois algoritmos.

Hanafi et al. (2014) otimizaram os parâmetros de corte para o processo de torneamento de PEEK com 30% de fibra de carbono usando ferramentas revestidas com TiN sob condições secas. Os autores aplicaram o NSGA-II e um conjunto de soluções não dominadas foi obtido. Saatçi et al. (2023) conduziram uma otimização para minimizar

a força resultante, rugosidade, emissão de carbono e custo total de usinagem empregando NSGA-II e tomada de decisão multicritério com Técnica para Ordem de Preferência por Similaridade com a Solução Ideal (TOPSIS). Como resultado da otimização, o uso de alta velocidade de corte  $220 \text{ m/min}$ , baixos valores de avanço entre  $0,11 \text{ mm/v}$  e  $0,14 \text{ mm/v}$  e método MQL com nanofluido reforçado com nGP (N2-MQL) no torneamento de aço inoxidável AISI 310S fornece os valores ideais de rugosidade, forças de corte, emissões de carbono e custos totais de usinagem.

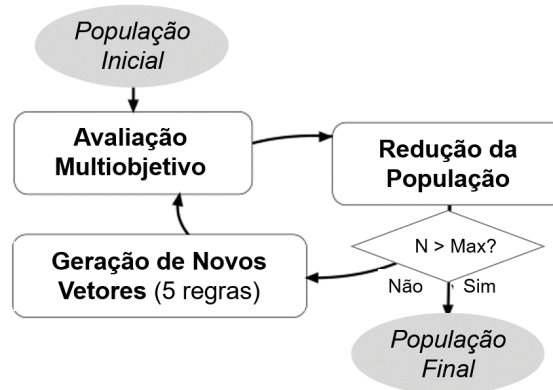
Dikshit et al. (2023) empregaram o NSGA-II acoplado com o RSM e CCD para otimizar os parâmetros de corte na usinagem por descarga elétrica de Ti6Al4V. O resultado da otimização obtido pelo NSGA-II foi validado via experimentos de confirmação em boa concordância com o valor experimental do erro absoluto de 6% e 4,8% em  $MRR$  e  $Ra$ , respectivamente.

### 2.5.3 Algoritmo CaRamel

O Algoritmo de Calibração Multiobjetivo por Combinação de Regras de Geração de Parâmetros Estocásticos e Gradientes (caRamel - *Multi-objective Calibration by Combination of Stochastic and Gradient-like Parameter Generation Rules*) é um híbrido do método simplex de recozimento multiobjetivo evolutivo (MEAS) e do NSGA-II. A ideia por trás do caRamel é contar com regras estocásticas e, ao mesmo tempo, permitir mecanismos mais “locais”, como a extrapolação ao longo de vetores no espaço de parâmetros. Ele foi inicialmente desenvolvido para calibrar modelos hidrológicos, mas pode ser usado para qualquer modelo ambiental. O algoritmo caRamel é bem adaptado para modelagem complexa e foi desenvolvido para atender ao requisito de um procedimento de calibração automática que fornece não apenas um, mas uma família de conjuntos de parâmetros ótimos em relação a um alvo multiobjetivo (MONTEIL et al., 2020b).

A ideia por trás do caRamel não é apenas manter esses mecanismos estocásticos “globais” como recombinação ou amostragem multivariada usando a covariância, mas também permitir mecanismos mais “locais”, como extrapolação ao longo de vetores no espaço dos parâmetros, que estão associados a uma melhoria em todas as funções objetivo. A Figura 14 mostra o fluxograma do algoritmo caRamel. A abordagem consiste em iniciar com um conjunto de conjuntos de parâmetros, denominado “população inicial”, e promover a evolução dessa população conforme determinadas regras de geração. Em cada geração, novos conjuntos são avaliados em relação aos objetivos, sendo mantidos apenas os conjuntos considerados mais “adequados” para construir a nova população.

**Figura 14 – Algoritmo de calibração multiobjetivo por combinação de regras de geração de parâmetros estocásticos e gradientes (caRamel)**



**Fonte:** Adaptado de Monteil et al. (2020b)

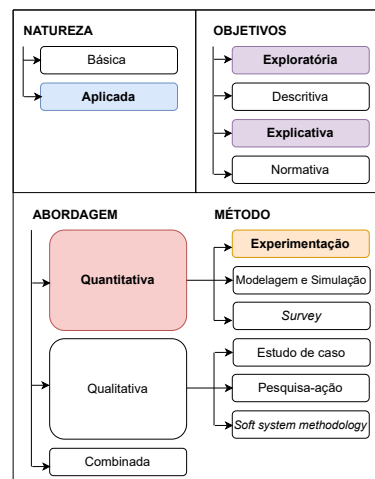
O algoritmo caRamel foi inicialmente desenvolvido e utilizado para a calibração de modelos hidrológicos em estudos como Rothfuss et al. (2012), Magand et al. (2014), Moine et al. (2015) e Monteil et al. (2015). O desempenho interessante do algoritmo caRamel nesses estudos levou Monteil et al. (2020b) a descrever o algoritmo em detalhes.

Neste capítulo, várias abordagens relacionadas ao processo de torneamento interno, características do PEEK, aprendizado estatístico, modelagem e otimização evolutiva foram apresentadas e discutidos à luz da literatura mais recente sobre os assuntos. Toda a teoria apresentada trata de conceitos considerados essenciais para corroborar com a otimização multiobjetivo evolutiva do processo de torneamento interno de tubos de PEEK. Observando as principais lacunas na literatura relacionadas ao processo de torneamento interno de tubos de PEEK, a presente tese visa preencher a falta de integração das abordagens de torneamento interno, considerando as propriedades particulares do PEEK, o desenvolvimento de modelos mais precisos para representar o processo e a implementação de uma estratégia de otimização multiobjetivo evolutiva.

### 3 MÉTODO DE APRENDIZADO ESTATÍSTICO E OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO EVOLUTIVA DO TORNEAMENTO INTERNO DE PEEK

A pesquisa é definida como um estudo planejado acerca de um problema ou situação (PRODANOV; FREITAS, 2013) e o método de abordagem do estudo é o que caracteriza o seu aspecto científico. A pesquisa pode ser classificada quanto à sua natureza, seu objetivo, sua abordagem e, por fim, quanto ao método adotado (MIGUEL et al., 2010). A pesquisa desenvolvida é classificada de natureza aplicada, exploratória e explicativa em relação aos seus objetivos, apresenta uma abordagem quantitativa e utiliza o experimento como método. A Figura 15 mostra a classificação da presente pesquisa, baseada na classificação sugerida por MIGUEL et al. (2010).

**Figura 15 – Classificação da pesquisa**



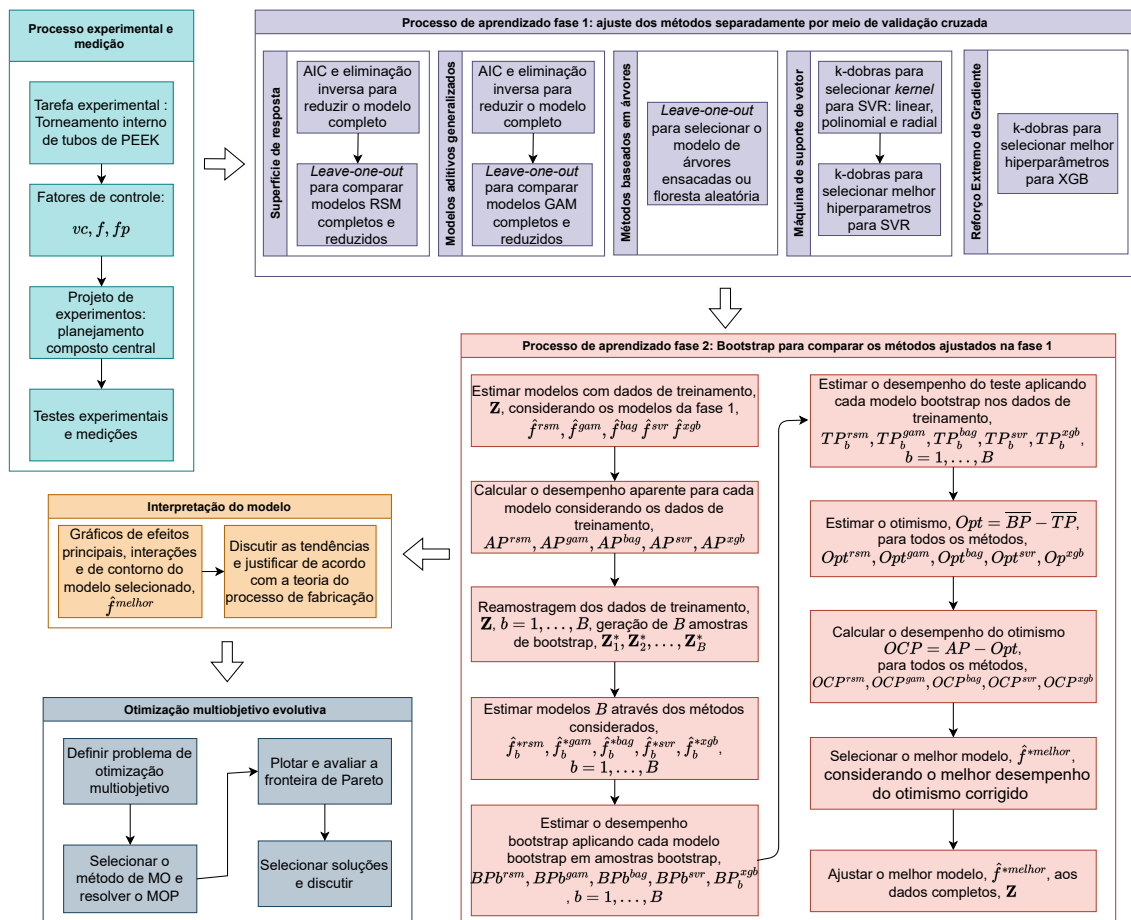
**Fonte: Próprio autor**

A presente pesquisa é classificada quanto à natureza em aplicada. Quanto aos objetivos, a pesquisa é classificada em exploratória e explicativa. Primeiramente, é considerada exploratória devido ao fato de que um dos objetivos deste trabalho é explorar na literatura o tema abordado. Por outro lado, entende-se como explicativa, já que serão analisados fenômenos de processos reais visando obter relações entre estes e seus parâmetros, bem como gerar soluções ótimas para o processo. Em relação à abordagem, é definida como quantitativa, pois traduz números, opiniões e informações a fim de analisá-los (MIGUEL et al., 2010). A abordagem quantitativa parte de teorias para posteriormente seguir para formulação de hipóteses, coleta dados a partir de observações, análise dos

dados e, por fim, geração de resultados. Por fim, quanto ao método, é baseada no método de experimentação. São realizados experimentos do processo de torneamento interno de tubos de PEEK para testar o relacionamento entre variáveis e verificar possíveis relações de causa e efeito supostamente importantes para a compreensão do processo.

A Figura 16 ilustra o fluxograma seguido para conduzir a tarefa experimental, modelagem e otimização. Este trabalho propõe uma abordagem inteligente para aprendizado e otimização. A abordagem é aplicada no torneamento interno de tubos de PEEK. Como pode ser visto, cinco grandes etapas são seguidas, a primeira relacionada ao processo experimental, a segunda relacionada à primeira fase do aprendizado estatístico, a terceira relacionada à segunda fase do aprendizado, a quarta relacionada à interpretação do modelo e a quinta relacionada à otimização multiobjetivo.

Figura 16 – Fluxograma do método



Fonte: Próprio autor

O primeiro passo é definir o planejamento de experimentos do torneamento interno de tubos de PEEK. Os fatores de controle foram definidos com relação às condições de corte do processo de torneamento interno, a saber: velocidade de corte ( $v_c$ ), avanço ( $f$ ) e a posição de fixação ( $f_p$ ). Um planejamento CCD foi utilizado para conduzir os testes experimentais. O CCD é o projeto experimental mais usado para metodologia de superfície de resposta. As estratégias tradicionais de modelagem via planejamento de experimentos buscam alcançar inferência e modelagem com baixo custo. Os métodos de aprendizado de máquina e aprendizado estatístico precisam de mais observações devido à necessidade de realizar validação cruzada para evitar o sobreajuste e garantir a capacidade do modelo em observações futuras. Para viabilizar a validação cruzada, pontos experimentais adicionais foram considerados. O planejamento de preenchimento de espaço escolhido foi a amostragem de Faure.

Posteriormente, são realizados os ensaios experimentais e as medições. A tarefa de torneamento interno de tubos de PEEK é composta de saídas relacionadas à qualidade da superfície da peça, erro geométrico, componentes da força de usinagem e taxa de remoção do material. A componente da força de torneamento mensurada foi a força de corte ( $F_c$ ), a rugosidade das peças foi avaliada através da rugosidade média ( $Ra$ ), e o erro geométrico do perfil foi avaliado através da circularidade total ( $Ront$ ). Todas as respostas devem ser minimizadas para garantir os níveis mais baixos de força de corte, melhor qualidade da superfície e melhor precisão geométrica. A taxa de remoção de material também foi considerada usando um modelo determinístico e deve ser maximizada para alcançar aumento da produtividade do processo.

Na segunda etapa do fluxograma da Figura 16, as abordagens de aprendizado estatístico para regressão consideradas são treinadas separadamente e independentemente. Esta etapa é importante para o ajuste de hiperparâmetros. A metodologia de superfície de resposta também foi definida como uma das estratégias de regressão. Primeiramente, um modelo polinomial de segunda ordem foi obtido através de mínimos quadrados ordinários. Em sequência, esse modelo foi reduzido por meio de eliminação para trás. Modelos completos e reduzidos foram comparados considerando a métrica AIC. Em seguida, a validação cruzada *leave-one-out* foi realizada para confirmar a seleção do modelo de superfície de resposta comparando o modelo completo com o reduzido.

O GAM foi o segundo método de regressão considerado. Primeiramente, um modelo GAM foi obtido para os dados disponíveis. Este modelo também foi reduzido por eliminação para trás e os modelos completos e reduzidos foram comparados através do

AIC. Da mesma forma que para a RSM, a validação cruzada *leave-one-out* foi realizada para confirmar o melhor modelo GAM.

Os modelos de BAG e RF são duas abordagens de regressão baseadas em árvores de decisão para regressão. Primeiramente, o modelo BAG foi obtido considerando todos os fatores de controle como preditores,  $m = k = 3$ , em cada etapa do procedimento de particionamento binário recursivo. É importante lembrar que o ensacamento envolve a geração de  $B$  árvores com base em amostras *bootstrap*. Neste caso, foi definido  $B = 500$ . Posteriormente, o modelo RF foi considerado uma abordagem baseada em árvore para regressão, com preditor  $m = k/3 = 1$  selecionado aleatoriamente em cada particionamento binário. Os modelos de regressão obtidos por RF e BAG foram comparados por validação cruzada *leave-one-out*.

A próxima abordagem considerada foi o método SVR. A validação cruzada via  $k$ -dobras foi conduzida para definição do *kernel*,  $C$  e  $\gamma$ . Foram considerados  $k = 10$  dobras. Os níveis dos hiperparâmetros testados estão resumidos na Tabela 1.

**Tabela 1 – Validação cruzada via  $k$ -dobras para a seleção do *kernel* SVR**

| Parâmetros    | Níveis                     |
|---------------|----------------------------|
| <i>kernel</i> | linear, polinomial, radial |
| $C$           | 0,001, 0,01, 0,1, 1, 5, 10 |
| $\gamma$      | 0, 0,5, 1, 2               |

**Fonte: Próprio autor**

A última abordagem de regressão considerada foi o método XGB. Para ajustar o método de reforço extremo de gradiente, foi realizada a validação cruzada via  $k$ -dobras com  $k = 10$  repetida duas vezes para selecionar  $M$  número de iterações,  $\eta$  taxa de aprendizado,  $\rho$  parâmetro de poda que especifica a redução mínima de perda necessária para fazer uma divisão adicional em um nó da árvore, *max-depth* profundidade máxima de cada árvore, controlando sua complexidade, *colsample by tree* fração de preditores considerada para construir cada árvore, *min child weight* soma mínima dos pesos necessários em um nó da árvore para permitir uma nova divisão e *subsample* subamostra ou fração dos dados de treino usados para estimar cada árvore para prevenir sobreajuste.

Na terceira etapa, seguindo o fluxograma da Figura 16, os modelos de regressão parametrizados individualmente na etapa anterior são comparados em um *loop* para validação cruzada via *bootstrap*. Primeiramente, os cinco métodos são usados para estimar os modelos,  $\hat{f}^{rsm}$ ,  $\hat{f}^{gam}$ ,  $\hat{f}^{bag}$ ,  $\hat{f}^{svr}$  e  $\hat{f}^{xgb}$ , considerando todos os dados de treinamento. Em seguida, o desempenho aparente foi calculado para cada modelo,  $AP^{rsm}$ ,  $AP^{gam}$ ,

$AP^{bag}$ ,  $AP^{svr}$  e  $AP^{xgb}$ , aplicando-os aos dados de treinamento,  $\mathbf{Z}$ . A reamostragem dos dados de treinamento,  $\mathbf{Z}$ , foi realizada  $B$  vezes gerando  $B$  amostras de *bootstrap*,  $\mathbf{Z}_1^*$ ,  $\mathbf{Z}_2^*$ , ...,  $\mathbf{Z}_B^*$ . Os  $B$  modelos foram estimados considerando as  $B$  amostras *bootstrap* para cada um dos cinco métodos,  $\hat{f}_b^{rsm}$ ,  $\hat{f}_b^{gam}$ ,  $\hat{f}_b^{bag}$ ,  $\hat{f}_b^{svr}$  e  $\hat{f}_b^{xgb}$ ,  $b = 1, \dots, B$ . O desempenho *bootstrap* foi calculado como  $BP_b^{rsm}$ ,  $BP_b^{gam}$ ,  $BP_b^{bag}$ ,  $BP_b^{svr}$  e  $BP_b^{xgb}$ ,  $b = 1, \dots, B$ , aplicando cada modelo na amostra *bootstrap*, conforme a Equação 12. O desempenho do teste foi estimado como  $TP_b^{rsm}$ ,  $TP_b^{gam}$ ,  $TP_b^{bag}$ ,  $TP_b^{svr}$  e  $TP_b^{xgb}$ ,  $b = 1, \dots, B$ , aplicando cada modelo *bootstrap* na amostra de treinamento original, conforme a Equação 13. O otimismo ou viés foi calculado de acordo com a Equação 14 para todos os métodos,  $Opt^{rsm}$ ,  $Opt^{gam}$ ,  $Opt^{bag}$ ,  $Opt^{svr}$ , e  $Opt^{xgb}$ . O desempenho com otimismo ou viés corrigido foi estimado de acordo com a Equação 15,  $OCP^{rsm}$ ,  $OCP^{gam}$ ,  $OCP^{bag}$ ,  $OCP^{svr}$ , e  $OCP^{xgb}$ . O melhor método de regressão é aquele que apresenta o melhor desempenho com otimismo corrigido, que pode ser expresso com várias métricas. Algumas métricas de desempenho devem ser minimizadas quando são medidas como o RMSE e MAE, enquanto o  $R^2$  deve maximizado. Por fim, o melhor método foi aplicado aos dados de treino.

A quarta etapa da abordagem consiste em interpretar o modelo selecionado. Para interpretar o modelo e discutir as tendências de acordo com a teoria do processo de torneamento interno, os gráficos de efeitos principais, interações, importância e contorno são plotados.

A última etapa da abordagem é a otimização multiobjetivo. Primeiramente, o problema de otimização multiobjetivo foi definido, considerando as funções a serem minimizadas e as restrições. Foi considerado o melhor modelo de regressão para cada variável de saída obtida no processo de aprendizado, para modelar rugosidade, força de corte e circularidade. Todos os modelos devem ser minimizados para obter rugosidade, circularidade e esforços de corte desejados. Um modelo determinístico adicional em função dos parâmetros do processo para calcular a taxa de remoção de material também é considerado. A  $MRR$  deve ser maximizada para aumentar a produtividade. Portanto, na formulação do problema multiobjetivo, considera-se a minimização do negativo da taxa de remoção de material,  $-MRR$ . A otimização multiobjetivo deve considerar a região experimental de acordo com o planejamento experimental empregado. O CCD apresenta os pontos fatoriais e axiais próximos a uma esfera com raio  $\rho$  no espaço codificado, com  $\rho = 2^{k/4}$ , onde  $k$  é o número de fatores. O problema de otimização multiobjetivo é

apresentado na Equação 46.

$$\text{Min} \begin{pmatrix} \hat{f}_{Ra} \\ \hat{f}_{Fc} \\ \hat{f}_{Ront} \\ -MRR \end{pmatrix}$$

$$\text{s.t. } x_1^2 + x_2^2 + \dots x_k^2 \leq \rho^2 \quad (46)$$

O método NSGA-II (DEB et al., 2002b), a otimização de enxame de partículas multiobjetivo com distância de aglomeração (MOPSO-CD) (RAQUEL; JR, 2005) e o algoritmo CaRamel (MONTEIL et al., 2020a) foram usados para resolver o problema multiobjetivo. O número de gerações foi definido até um valor de estabilização da métrica de hipervolume indicar convergência, enquanto o tamanho da população foi definido para garantir um número adequado de soluções com diferenças práticas entre elas. O hipervolume foi utilizado para medir a dominância, cobertura e diversidade das soluções ótimas de Pareto e selecionar o melhor método. É importante lembrar que em problemas multiobjetivo práticos algumas métricas não podem ser calculadas, pois a fronteira de Pareto verdadeira é desconhecida.

Os hiperparâmetros dos métodos NSGA-II, MOPSO-CD e CaRamel foram resumidos na Tabela 2.

**Tabela 2 – Hiperparâmetros dos métodos de otimização multiobjetivo**

|   |                |
|---|----------------|
| NSGA-II   |                |
| popsze (tamanho da população)                       | 100            |
| cprob (probabilidade de <i>crossover</i> )          | 0,7            |
| cdist (índice de distribuição de <i>crossover</i> ) | 5              |
| mprob (probabilidade de mutação)                    | 0,2            |
| mdist (índice de distribuição de mutação)           | 10             |
| MOPSO-CD  |                |
| popsze (tamanho da população)                       | 100            |
| pMut (probabilidade de mutação)                     | 0,5            |
| w (coeficiente de inércia)                          | 0,4            |
| c <sub>1</sub> (coeficiente cognitivo)              | 1              |
| c <sub>2</sub> (coeficiente social)                 | 1              |
| CaRamel   |                |
| popsze (tamanho da população)                       | 100            |
| maxrun (número máximo de simulações)                | 500            |
| carallel (cálculo paralelo)                         | 0 (sequencial) |

**Fonte: Próprio autor**

Após a seleção do melhor método de otimização, a fronteira de Pareto foi plotada para visualizar as soluções. Algumas soluções podem ser selecionadas por meio de

abordagens de tomada de decisão para discutir aspectos práticos. Para fazer isso, a abordagem de pseudopeso foi aplicada. Através dessa abordagem, cada solução pode ser associada a pesos, auxiliando o tomador de decisão a selecionar a solução desejada. As abordagens multiobjetivo por escalonamento alcançam cada solução alterando os pesos associados a cada função objetivo. Os Algoritmos multiobjetivo evolutivos são abordagens baseadas em população que buscam um conjunto de Pareto em uma única execução. Geralmente, os MOEA superam as abordagens de escalonamento, uma vez que empregam técnicas de programação não-linear, que não precisam especificar pesos e apresentam alto tempo computacional. As técnicas evolutivas são baseadas em algoritmos genéticos, não necessitam de definições a priori da preferência associadas às funções em otimização e apresentam bom desempenho computacional. Além disso, ao considerar modelos obtidos com métodos complexos, como árvores ensacadas, árvores de regressão, SVR, XGB e outras abordagens de aprendizado, as abordagens de escalonamento não podem ser usadas, pois são baseadas em métodos de programação não linear e estes são concebidos para otimizar funções suaves. As funções quadráticas, como modelos de superfície de resposta polinomial múltipla, podem ser otimizadas por métodos de escalonamento. O pseudopeso para a  $j'$ -ésima função objetivo pode ser calculado através da Equação 47. Mais detalhes sobre essa abordagem são apresentados por Deb (2001).

$$\omega_{j'} = \frac{(f_{j'}^{max} - f_{j'}(x)) / (f_{j'}^{max} - f_{j'}^{min})}{\left(\sum_{j=1}^m (f_{j'}^{max} - f_{j'}(x)) / (f_{j'}^{max} - f_{j'}^{min})\right)} \quad (47)$$

## 4 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Neste capítulo são apresentados os equipamentos, material, ferramentas, procedimentos de medição, variáveis de controle, respostas analisadas e planejamento experimental. A etapa experimental do processo de torneamento interno de tubos de PEEK foi realizada no Laboratório de Fabricação e as medições no Laboratório de Metrologia, ambos do Departamento de Engenharia Mecânica e Produção (DEMEP) da Universidade Federal de São João del-Rei (UFSJ).

### 4.1 EQUIPAMENTOS E MATERIAIS PARA OS ENSAIOS DE TORNEAMENTO INTERNO

Os experimentos de torneamento interno foram realizados no Laboratório de Fabricação do DEMEP/UFSJ em um centro de torneamento ROMI GL 240-M com velocidade de avanço rápido longitudinal e transversal de  $30 \text{ m/min}$ , rotação máxima de 6000 rpm e potência máxima na árvore de  $22,5 \text{ kW}$ , com um comando CNC Fanuc Oi TD, como mostra a Figura 17.

**Figura 17 – Centro de torneamento ROMI GL 240-M**

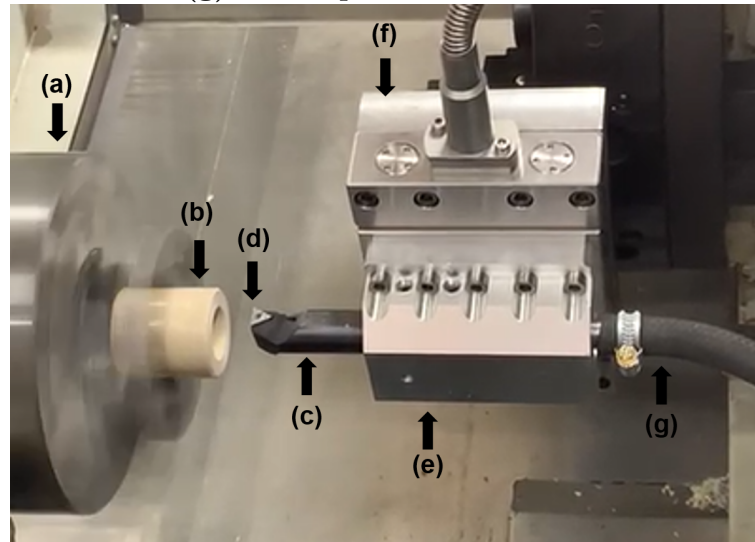


**Fonte: Próprio autor**

A Figura 18 expõe o setup experimental. Antes dos experimentos, foi realizado um passe com  $0,5 \text{ mm}$  de profundidade de usinagem nos tubos para garantir um diâmetro inicial mais uniforme. As dimensões iniciais da peça tinham diâmetro externo de  $40 \text{ mm}$ , diâmetro interno de  $25 \text{ mm}$  e comprimento de  $45 \text{ mm}$ . Foi utilizada uma barra de torneamento interno com código ISO A20S-STFCL 11 e insertos com código TCMT 11 03

04-KM H13A, ambos da Sandvik-Coromant.

**Figura 18** – Setup experimental com (a) placa de três castanhas, (b) corpo de prova de PEEK, (c) barra de torneamento, (d) inserto de metal duro, (e) suporte de fixação, (f) dinamômetro e (g) ar comprimido



Fonte: Próprio autor

Conforme mencionado anteriormente, o material empregado no experimento foi o polímero PEEK. O material foi fornecido pela empresa Ensinger Indústria de Plásticos Técnicos Ltda. Na Tabela 3 são apresentadas as propriedades mecânicas.

**Tabela 3** – Propriedades mecânicas do polímero PEEK

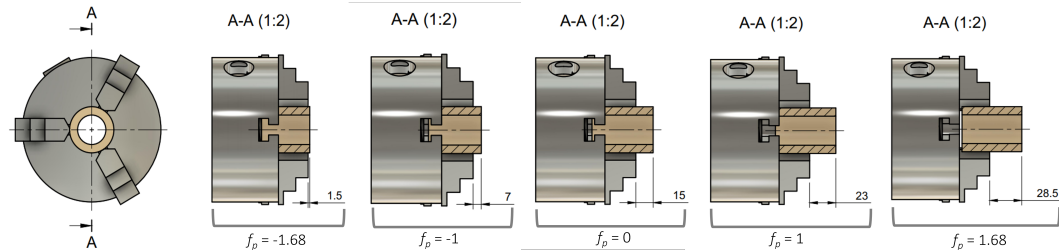
|                           | Valor     | Und.     | Parâmetro           | Norma              |
|---------------------------|-----------|----------|---------------------|--------------------|
| Módulo de elasticidade    | 4200      | $MP_a$   | 1 $mm/min$          | DIN EN ISO 527-2   |
| Resistência a tração      | 116       | $MP_a$   | 50 $mm/min$         | DIN EN ISO 527-2   |
| Alongamento no escoamento | 5         | %        | 50 $mm/min$         | DIN EN ISO 527-2   |
| Alongamento na ruptura    | 15        | %        | 50 $mm/min$         | DIN EN ISO 527-2   |
| Resistência a flexão      | 175       | $MP_a$   | 2 $mm/min$ , 10 $N$ | DIN EN ISO 178     |
| Módulo de elasticidade    | 4200      | $MP_a$   | 2 $mm/min$ , 10 $N$ | DIN EN ISO 178     |
| Resistência a compressão  | 23/43/102 | $MP_a$   | 1% 2% 5%            | EN ISO 604         |
| Módulo de compressão      | 3400      | $MP_a$   | 5 $mm/min$ , 10 $N$ | EN ISO 604         |
| Resistência ao impacto    | n.b.      | $kJ/m^2$ | max. 7,5 $J$        | DIN EN ISO 179-1eU |
| Dureza de indentação      | 243       | $MP_a$   |                     | ISO 2039-1         |

Fonte: ENSINGER (2022)

## 4.2 VARIÁVEIS DE CONTROLE, RESPOSTAS E PROCEDIMENTOS DE MEDIÇÃO

As variáveis de controle ( $\mathbf{x}$ ) avaliadas foram a velocidade de corte ( $v_c$ ), o avanço ( $f$ ) e a posição de fixação do corpo de prova ( $f_p$ ). A velocidade de corte e o avanço são variáveis importantes no torneamento e podem influenciar a produtividade, temperatura, vida da ferramenta, acabamento, dentre outros fatores. A escolha de controlar a posição de fixação do corpo de prova surgiu com a possibilidade de avaliar o efeito do posicionamento do tubo na placa do torno em relação às respostas analisadas. A posição de fixação altera o momento atuante no ponto de contato ferramenta/peça, com possíveis consequências na vibração e na qualidade da peça. A posição de fixação ( $f_p$ ) está ilustrada na Figura 19. Os valores de posição de fixação foram obtidos seguindo o planejamento CCD. Em que o raio da região experimental do CCD, representado por  $\rho$ , foi calculado para garantir a rotacionalidade do planejamento.

**Figura 19 – Posição de fixação do tubo de PEEK na placa**



**Fonte: Próprio autor**

Os testes de torneamento interno foram realizados seguindo um projeto CCD que permite economia na experimentação. A amostragem de Faure foi usada para aumentar o número de observações do planejamento e permitir a realização da validação cruzada. Os níveis das variáveis de controle foram definidos considerando pré-testes realizados e recomendações do fabricante da ferramenta, conforme Tabela 4. A profundidade de usinagem foi fixada  $a_p = 0,8 \text{ mm}$  para buscar a mesma especificação do produto quanto à dimensão do diâmetro interno em todos os ensaios. O comprimento em balanço da ferramenta foi fixado em  $L = 55 \text{ mm}$ .

**Tabela 4 – Variáveis de controle e seus níveis**

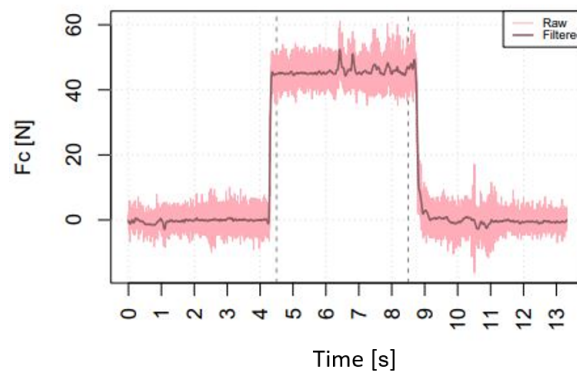
| Variáveis de controle |       | Níveis |       |       |       |       | Unid. |
|-----------------------|-------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                       |       | -1,68  | -1    | 0     | 1     | 1,68  |       |
| $x_1$                 | $v_c$ | 107    | 165   | 250   | 335   | 393   | m/min |
| $x_2$                 | $f$   | 0,058  | 0,085 | 0,125 | 0,165 | 0,192 | mm/v  |
| $x_3$                 | $f_p$ | 1,5    | 7     | 15    | 23    | 28,5  | mm    |

**Fonte: Próprio autor**

As respostas analisadas foram a força de corte ( $F_c$ ), a rugosidade média ( $Ra$ ) e a circularidade ( $Ront$ ). A taxa de remoção de material ( $MRR$ ) foi avaliada por meio de um modelo determinístico. A força de corte é importante para a estimativa da potência requerida e para o projeto de suportes e fixação de ferramentas com rigidez adequada e livres de vibração. Além disso, a força de corte pode ser um importante indicador da usinabilidade, influenciando na vida da ferramenta, sendo um parâmetro importante na definição dos parâmetros de corte. A rugosidade  $Ra$  foi escolhida por ser o parâmetro de medição mais utilizado, podendo ser aplicado à maioria dos processos de usinagem, além de ser a resposta de rugosidade definida pela ABNT/NBR ISO 4287-2002 (TÉCNICAS, 2002) para indicar o estado de acabamento de superfícies em desenhos técnicos. A circularidade total foi escolhida por ser o principal parâmetro usado para quantificar o desvio de forma circular.

O monitoramento dos esforços de corte foi realizado durante os testes por meio de um dinamômetro Kistler 5070A, auxiliado pelo software de processamento de sinal Kistler Dynoware. A força de corte  $F_c$  foi registrada com uma taxa de aquisição de 1000 Hz. Foi utilizado um filtro Butterworth passa-baixa com ordem de filtro igual a 2 e frequência de corte igual a 0,02. A Figura 20 mostra o sinal de força de corte bruto e o sinal de força de corte filtrado do experimento número 04. As linhas verticais cinza tracejadas indicam o período considerado para obtenção do resultado médio do sinal filtrado.

**Figura 20** – Experimento de filtragem  $F_c$  N° 04,  $vc = 335 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,17 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 7 \text{ mm}$



**Fonte:** Próprio autor

As medições de rugosidade foram realizadas no Laboratório de Metrologia do DEMEP/UFSJ. Para medição das respostas de rugosidade dos corpos de prova usinados, foi utilizado um medidor de rugosidade e perfil Form Talysurf Intra da Taylor Hobson® com deslocamento transversal de  $50 \text{ mm}$ , campo de medição de  $\pm 0,5 \text{ mm}$ , velocidade de deslocamento de até  $10 \text{ mm/s}$ , velocidade de medição de até  $0,5 \text{ mm/s}$ , velocidade de retorno de até  $10 \text{ mm/s}$  e possibilidade de medição de rugosidade e perfil. O medidor é auxiliado por um computador e pelo software Ultra, também da Taylor Hobson®. As medições de rugosidade foram realizadas em três posições radiais equidistantes de  $120^\circ$  e três posições no sentido da altura medida no furo, de  $5 \text{ mm}$  cada uma e com espaçamento entre as posições de  $13 \text{ mm}$ . Foi considerado um *cut-off* de  $0,8 \text{ mm}$  para perfis periódicos, segundo a norma ISO 4288/1996 (HOBSON, 2011). O resultado médio das nove medições realizadas em cada peça foi tomado para análise.

Para medição de *Ront*, foi utilizado um medidor de forma Talyround 131 da Taylor Hobson® com apalpador de rubi, alta gama de  $2 \text{ mm}$ , resolução normal de  $30 \text{ nm}$  e alta resolução de  $6 \text{ nm}$ . O medidor de forma também é auxiliado por um computador e pelo software Ultra da Taylor Hobson®. Com base no círculo de referência de mínimos quadrados, o valor de *Ront* consiste na soma do valor maior pico e do maior vale no perfil medido e filtrado. Na realização das medições de circularidade, foram considerados 21 planos de medição equidistantes de  $2 \text{ mm}$  e a média destes foi tomada para análise. A Figura 21 expõe o *setup* de medição de circularidade e rugosidade.

**Figura 21 – Set up para a medição de circularidade e rugosidade**

(a) Medição de circularidade



(b) Medição de rugosidade



Fonte: Próprio autor

Após a medição das respostas  $Ra$ ,  $Ront$  e  $F_c$ , as análises estatísticas foram realizadas por meio da linguagem de programação R (R Core Team, 2022). Os pacotes *caret* (KUHN, 2022), *randomForest* (LIAW; WIENER, 2002) e *e1071* (MEYER et al., 2021), *xgboost* (CHEN et al., 2022) e *dplyr* (WICKHAM et al., 2022) foram usados para modelagem. Para otimização foram utilizados os pacotes *NlcOptim* (CHEN; YIN, 2019) e *mco* (MERSMANN, 2020). Finalmente, para plotagens foram usados *ggplot2* (WICKHAM, 2016), *ggpubr* (KASSAMBARA, 2020) e *plot3D* (SOETAERT, 2021). Para todas as análises estatísticas, o nível de significância utilizado foi  $\alpha = 0,05$ .

Este capítulo apresentou os equipamentos, ferramentas, materiais, softwares, procedimentos de medição, variáveis de controle, respostas empregadas no estudo do processo de torneamento interno de tubos de PEEK. No capítulo 5, serão apresentados os resultados obtidos na presente tese.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, são apresentados os resultados dos testes experimentais realizados no processo de torneamento interno de tubos de PEEK seguindo as etapas propostas no fluxograma da Figura 16.

A Tabela 5 resume o projeto experimental com os resultados para a tarefa de modelagem e otimização do torneamento interno de tubos de PEEK, e mostra o projeto do CCD considerando  $v_c$ ,  $f$  e  $f_p$  como fatores de controle, as respostas medidas  $Ra$  e  $Ront$  para quantificar rugosidade e desvio geométrico, a força de corte  $F_c$ , e a resposta calculada  $MRR$  para medir a produtividade do processo. A rugosidade média  $Ra$  variou entre 1,592  $\mu m$  e 5,969  $\mu m$ . A força de corte  $F_c$  variou de 23,89  $N$  a 47,35  $N$ . A circularidade  $Ront$  variou de 54,827  $\mu m$  a 176,442  $\mu m$ . Finalmente, a taxa de remoção de material variou de 10,70 a 44,22  $cm^3/min$ . Os melhores resultados de produtividade estão, em alguns casos, associados aos piores níveis de qualidade em termos de circularidade, rugosidade média e força de corte. Por exemplo, no teste 12, onde  $v_c = 250$  m/min,  $f = 0,19$  mm/v, e  $f_p = 15$  mm, resultando em  $R_a = 5,969 \mu m$ ,  $F_c = 47,35 N$ ,  $Ront = 163,04 \mu m$  e  $MRR = 38,45 cm^3/min$ .

Tabela 5 – Planejamento experimental com as respostas

|       | $v_c$   | $f$    | $f_p$ | $Ra$    | $F_c$ | $Ront$  | $MRR$      |
|-------|---------|--------|-------|---------|-------|---------|------------|
| Ordem | $m/min$ | $mm/v$ | $mm$  | $\mu m$ | N     | $\mu m$ | $cm^3/min$ |
| 1     | 165     | 0,09   | 7     | 1,851   | 25,21 | 166,655 | 11,22      |
| 2     | 335     | 0,09   | 7     | 1,866   | 34,80 | 123,903 | 22,78      |
| 3     | 165     | 0,17   | 7     | 4,048   | 40,13 | 151,291 | 21,78      |
| 4     | 335     | 0,17   | 7     | 4,974   | 45,68 | 112,943 | 44,22      |
| 5     | 165     | 0,09   | 23    | 2,030   | 29,24 | 139,228 | 11,22      |
| 6     | 335     | 0,09   | 23    | 2,351   | 29,58 | 56,779  | 22,78      |
| 7     | 165     | 0,17   | 23    | 4,263   | 39,15 | 155,683 | 21,78      |
| 8     | 335     | 0,17   | 23    | 4,397   | 39,77 | 151,363 | 44,22      |
| 9     | 107     | 0,13   | 15    | 2,429   | 35,73 | 133,346 | 10,70      |
| 10    | 392     | 0,13   | 15    | 3,232   | 37,99 | 102,059 | 39,20      |
| 11    | 250     | 0,06   | 15    | 1,592   | 23,89 | 127,601 | 11,55      |
| 12    | 250     | 0,19   | 15    | 5,969   | 47,35 | 163,041 | 38,45      |
| 13    | 250     | 0,13   | 1,5   | 2,659   | 34,70 | 155,236 | 25,00      |
| 14    | 250     | 0,13   | 28,5  | 2,792   | 35,18 | 142,111 | 25,00      |
| 15    | 250     | 0,13   | 15    | 2,882   | 32,84 | 176,442 | 25,00      |
| 16    | 250     | 0,13   | 15    | 2,936   | 39,09 | 128,443 | 25,00      |
| 17    | 250     | 0,13   | 15    | 2,590   | 35,72 | 176,254 | 25,00      |
| 18    | 250     | 0,13   | 15    | 2,639   | 45,05 | 118,075 | 25,00      |
| 19    | 250     | 0,13   | 15    | 2,999   | 36,25 | 106,936 | 25,00      |
| 20    | 250     | 0,13   | 15    | 3,097   | 36,02 | 130,092 | 25,00      |
| 21    | 250     | 0,13   | 15    | 2,816   | 38,17 | 122,704 | 25,00      |
| 22    | 250     | 0,13   | 15    | 2,501   | 42,03 | 162,583 | 25,00      |
| 23    | 221     | 0,11   | 12,3  | 1,961   | 32,64 | 113,141 | 19,74      |
| 24    | 278     | 0,14   | 17,6  | 3,245   | 44,35 | 165,717 | 30,76      |
| 25    | 183     | 0,12   | 19,5  | 1,941   | 37,60 | 76,310  | 17,65      |
| 26    | 240     | 0,15   | 8,7   | 4,067   | 41,45 | 109,975 | 28,27      |
| 27    | 297     | 0,09   | 14,1  | 2,320   | 29,20 | 54,827  | 22,31      |
| 28    | 202     | 0,16   | 15,8  | 4,672   | 41,99 | 113,080 | 25,23      |
| 29    | 259     | 0,10   | 21,2  | 2,083   | 33,53 | 167,826 | 21,30      |
| 30    | 316     | 0,13   | 10,5  | 2,709   | 35,53 | 67,961  | 32,72      |

Fonte: Próprio autor

Antes de realizar a otimização multiobjetivo evolutiva das respostas, este trabalho seguirá as etapas do fluxograma apresentado na Figura 16. Será apresentada a primeira fase do aprendizado estatístico, com a finalidade de ajustar os métodos separadamente por meio da validação cruzada. A segunda fase do aprendizado estatístico também será apresentada para comparar os métodos ajustados na primeira fase via *bootstrap*. Em seguida, será apresentada a interpretação do modelo, análise individual das respostas, para entender os efeitos das variáveis de controle nas respostas, e se possível, confrontar os resultados com a literatura e discutir o processo de torneamento interno.

### 5.1 AJUSTE DOS MÉTODOS SEPARADAMENTE VIA VALIDAÇÃO CRUZADA

Após o processo experimental foi realizada a primeira fase de aprendizado estatístico. Considerando a abordagem de modelagem de superfície de resposta por mínimos quadrados, um modelo quadrático completo foi obtido em função dos três preditores codificados,  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , relacionados a  $v_c$ ,  $f$  e  $f_p$ , respectivamente. O modelo reduzido para RSM também foi obtido. A redução do modelo simplifica e pode aumentar a precisão das previsões do modelo. Os modelos completo e reduzidos para GAM também foram obtidos em função dos três preditores codificados,  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , relacionados a  $v_c$ ,  $f$  e  $f_p$ , respectivamente. Tanto para RSM e GAM, os modelos completo e reduzido foram comparados considerando os Critérios de Informação de Akaike (AIC). A Tabela 6 resume o desempenho dos modelos RSM e GAM, e o modelo reduzido apresentou o menor AIC para todas as respostas.

**Tabela 6 – AIC para modelos RSM e GAM**

| Modelo                    | AIC $Ra$ | AIC $F_c$ | AIC $Ront$ |
|---------------------------|----------|-----------|------------|
| Completo: $\hat{f}^{rsm}$ | -59,480  | 75,000    | 218,100    |
| Reduzido: $\hat{f}^{rsm}$ | -69,385  | 70,547    | 213,170    |
| Completo: $\hat{f}^{gam}$ | -61,300  | 77,890    | 221,620    |
| Reduzido: $\hat{f}^{gam}$ | -66,936  | 72,240    | 212,530    |

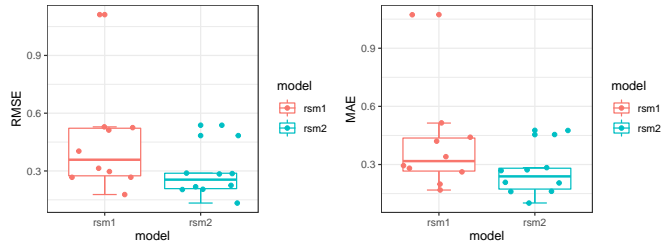
**Fonte: Próprio autor**

A validação cruzada por *leave-one-out* também foi realizada para comparar os modelos completos e reduzidos de RSM e GAM. A Figura 22 mostra os *boxplot* das métricas RMSE e MAE da validação cruzada por *leave-one-out* para RSM. Nos *boxplot* apresentados na Figura 22, denomina-se o modelo completo como “rsm1” e o modelo reduzido como “rsm2”. A Figura 22a apresenta as métricas RMSE e MAE para  $Ra$ . Considerando ambas as métricas, o modelo reduzido mostrou-se um pouco melhor do que o modelo completo.

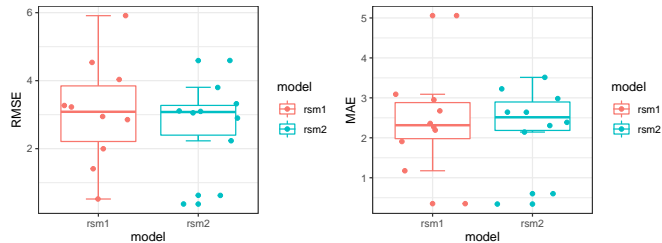
A Figura 22b mostra os *boxplot* do RMSE e MAE para  $F_c$ , o modelo reduzido também mostrou-se ligeiramente melhor do que o modelo completo para ambas as métricas. Já para  $Ront$ , Figura 22c, o resultado foi similar para ambas as métricas.

**Figura 22 – Resultados da validação cruzada via *leave-one-out* dos modelos de RSM**

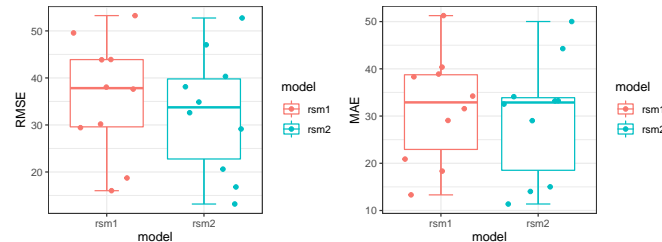
(a) RMSE e MAE dos modelos de RSM para  $Ra$



(b) RMSE e MAE dos modelos de RSM para  $F_c$



(c) RMSE e MAE dos modelos de RSM para  $Ront$



**Fonte: Próprio autor**

As distribuições do RMSE e MAE também foram comparadas por meio do teste de Wilcoxon, o qual não apresentou evidências para rejeitar a hipótese nula de igualdade entre os modelos completo e reduzido, com p-valor resumido na Tabela 7. Depois das comparações dos modelos de RSM, por simplicidade e levando em consideração o AIC, o modelo reduzido foi selecionado.

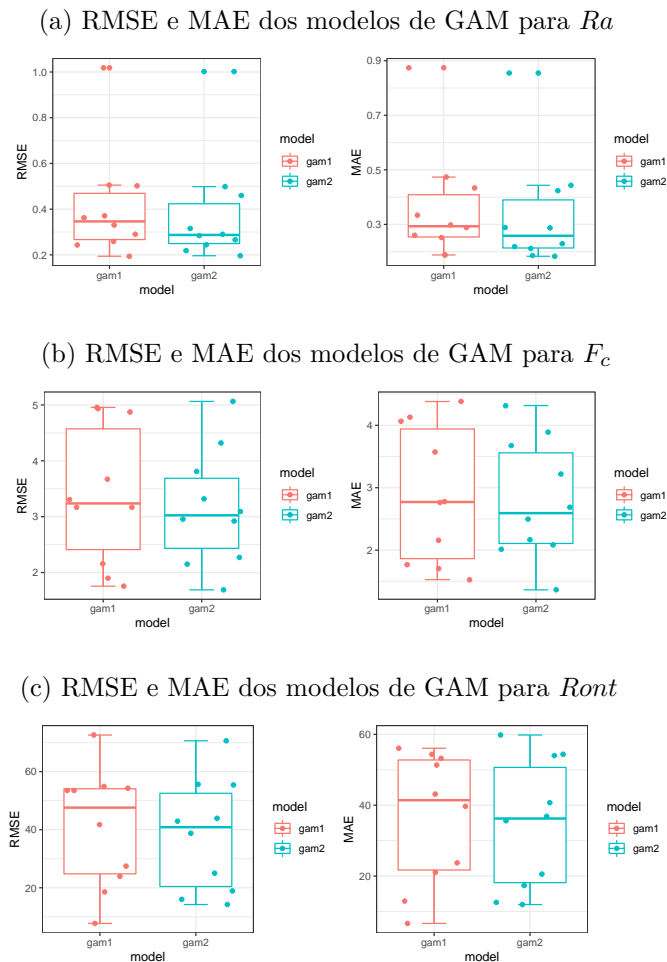
**Tabela 7 – Teste de Wilcoxon para os modelos de RSM**

|        | p-valor | RMSE   | MAE |
|--------|---------|--------|-----|
| $Ra$   | 0,1051  | 0,1431 |     |
| $F_c$  | 0,7394  | 0,6305 |     |
| $Ront$ | 0,4813  | 0,5288 |     |

**Fonte: Próprio autor**

Da mesma forma, a validação cruzada por *leave-one-out* foi realizada para comparar os modelos de GAM completo e reduzido. A Figura 23 mostra os *boxplot* das métricas RMSE e MAE da validação cruzada por *leave-one-out* para GAM, onde “gam1” representa o modelo completo e “gam2” o modelo reduzido. Para todas as respostas, ao analisar os *boxplots* dos modelos de GAM, ambas as métricas fornecem uma análise visual similar da posição, dispersão e valores discrepantes do erro.

**Figura 23 – Resultados da validação cruzada via *leave-one-out* dos modelos de GAM**



**Fonte: Próprio autor**

Para comparar se as distribuições do modelo completo e reduzido de GAM se diferem, o teste de Wilcoxon foi aplicado. A Tabela 8 resume os p-valores do teste Wilcoxon. Não há evidências para rejeitar a hipótese nula de igualdade entre os modelos GAM completo e reduzido. Dessa forma, o modelo GAM reduzido foi selecionado nesta etapa considerando o AIC e por simplicidade.

Tabela 8 – Teste de Wilcoxon para os modelos de GAM

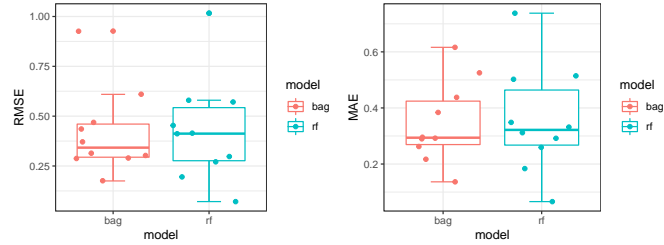
| p-valor              | RMSE   | MAE    |
|----------------------|--------|--------|
| <i>Ra</i>            | 0,4813 | 0,3930 |
| <i>F<sub>c</sub></i> | 0,6842 | 0,8534 |
| <i>Ront</i>          | 0,9118 | 0,7959 |

Fonte: Próprio autor

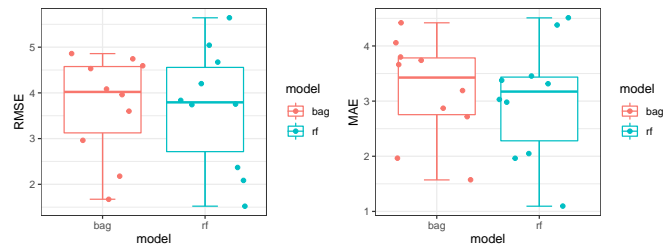
Os métodos baseados em árvores, BAG e RF, foram comparados por validação cruzada via  $k$ -dobras. Os modelos de árvores ensacadas e RF foram definidos com 500 árvores de regressão com base em amostras *bootstrap* dos dados de treinamento originais. A diferença é que para os modelos de árvores ensacadas, todos os preditores  $k = 3$  foram considerados em cada particionamento binário, enquanto nos modelos de RF, apenas  $m = 1$  foi selecionado aleatoriamente em cada particionamento para decorrelacionar as árvores. A Figura 24 mostra os resultados da validação cruzada via  $k$ -dobras dos métodos BAG e RF. Ao analisar *Ra*, para a métrica RMSE os *boxplots* apresentaram-se similares, para a métrica MAE o modelo BAG mostrou-se melhor. Para *F<sub>c</sub>*, o contrário pode ser observado, para a métrica RMSE o modelo BAG mostrou-se ligeiramente melhor e para a métrica MAE os modelos apresentaram-se semelhantes. No caso de *Ront*, os modelos mostraram-se semelhantes para ambas as métricas. Desse modo, pode-se dizer que ambos os métodos, BAG e RF, tiveram desempenho semelhante. Por uma questão de simplicidade, foi escolhido o modelo BAG.

**Figura 24 – Resultados da validação cruzada via  $k$ -dobras dos modelos baseado em árvores**

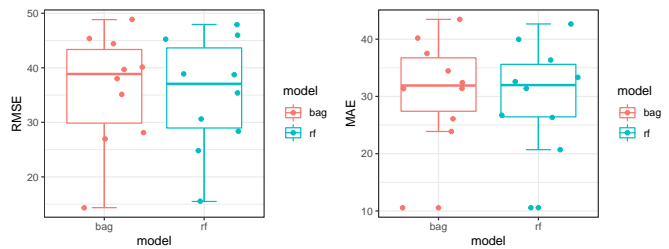
(a) RMSE e MAE dos modelos baseado em árvores para  $Ra$



(b) RMSE e MAE dos modelos baseado em árvores para  $F_c$



(c) RMSE e MAE dos modelos baseado em árvores para  $Ront$



**Fonte: Próprio autor**

Para ajustar o modelo SVR, foi realizada uma validação cruzada via  $k$ -dobras para selecionar o *kernel*,  $C$  e  $\gamma$ . A Tabela 1 apresenta os tipos de *kernels* e níveis de  $C$  e  $\gamma$  considerados. Os melhores níveis dos hiperparâmetros foram resumidos na Tabela 9. Para  $Ra$  o melhor modelo de SVR foi com *kernel* linear,  $C = 10$  e  $\gamma = 0$ . Para  $F_c$  o melhor modelo de SVR foi com *kernel* linear,  $C = 1$  e  $\gamma = 0$ . Por fim, para  $Ront$  o melhor modelo de SVR foi com *kernel* radial,  $C = 10$  e  $\gamma = 0,5$ .

**Tabela 9 – Seleção dos hiperparâmetros para SVR.**

| Respostas | <i>kernel</i> | $C$ | $\gamma$ |
|-----------|---------------|-----|----------|
| $Ra$      | linear        | 10  | 0        |
| $F_c$     | linear        | 1   | 0        |
| $Ront$    | radial        | 10  | 0,5      |

**Fonte: Próprio autor**

Para ajustar o modelo XGB, foi realizada uma validação cruzada via  $k$ -dobras com  $k = 10$  e duas repetições para selecionar  $M$ ,  $\eta$ ,  $\gamma$ ,  $max\text{-depth}$ ,  $colsample\ by\ tree$ ,  $min\ child\ weight$  e  $subsample$ . A Tabela 10 apresenta os melhores níveis dos hiperparâmetros obtidos para os modelos de XGB.

**Tabela 10 – Seleção dos hiperparâmetros para XGB**

| Respostas | $M$ | $\eta$ | $\rho$ | $max\text{-depth}$ | $Colsample\ by\ tree$ | $Min\ child\ weight$ | Subamostra |
|-----------|-----|--------|--------|--------------------|-----------------------|----------------------|------------|
| $Ra$      | 50  | 0,3    | 0      | 1                  | 0,8                   | 1                    | 0,75       |
| $F_c$     | 50  | 0,3    | 0      | 2                  | 0,8                   | 1                    | 0,5        |
| $Ront$    | 50  | 0,3    | 0      | 1                  | 0,8                   | 1                    | 1          |

**Fonte: Próprio autor**

A abordagem de validação cruzada aplicada nessa fase inclui o aprendizado inicial para selecionar os melhores métodos em cada família e/ou selecionar os hiperparâmetros dos modelos. Foram selecionados para todas as variáveis de resposta o modelo RSM reduzido, modelo GAM reduzido, modelo BAG, modelo SVR com os hiperparâmetros resumidos na Tabela 9, e modelo XGB com os hiperparâmetros resumidos na Tabela 10. Após o ajuste dos métodos separadamente, o desempenho destes foi comparado via validação cruzada por *bootstrap*.

## 5.2 COMPARAÇÃO DO MODELOS

A próxima fase do aprendizado foi realizada por meio da validação cruzada via *bootstrap*. Inicialmente, cada modelo foi aplicado aos dados de treinamento e o desempenho aparente de cada um foi calculado conforme a Equação 11. A Tabela 11 resume os resultados. O modelo XGB,  $\hat{f}^{xgb}$ , apresentou o melhor desempenho aparente, com o menor RMSE e MAE, e o maior  $R^2$  para todas as respostas.

**Tabela 11 – Desempenho aparente dos métodos**

| Métodos         | $Ra$   |        |        | $F_c$  |        |        | $Ront$  |         |           |
|-----------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|---------|-----------|
|                 | RMSE   | MAE    | $R^2$  | RMSE   | MAE    | $R^2$  | RMSE    | MAE     | $R^2$     |
| $\hat{f}^{rsm}$ | 0,2753 | 0,2254 | 0,9290 | 2,5662 | 1,8900 | 0,7926 | 29,5519 | 23,7449 | 0,2175    |
| $\hat{f}^{gam}$ | 0,2595 | 0,2195 | 0,9369 | 2,9172 | 2,2961 | 0,7320 | 33,4075 | 26,7377 | 8,881e-16 |
| $\hat{f}^{bag}$ | 0,4525 | 0,3324 | 0,8082 | 3,8717 | 3,2079 | 0,5279 | 36,4402 | 29,6188 | -0,1897   |
| $\hat{f}^{svr}$ | 0,4188 | 0,3275 | 0,8357 | 2,9511 | 2,2050 | 0,7257 | 31,3187 | 24,7415 | 0,1211    |
| $\hat{f}^{xgb}$ | 0,1717 | 0,1348 | 0,9723 | 2,0055 | 1,2979 | 0,8733 | 21,0963 | 17,4302 | 0,6012    |

**Fonte: Próprio autor**

O desempenho *bootstrap*,  $BP_b$ , foi obtido aplicando cada método nas amostras

obtidas por reamostragem,  $b = 1, \dots, 300$ , na amostra do *bootstrap*, e calculando a média dos  $B = 300$  resultados. O desempenho de teste,  $TP_b$ , foi obtido aplicando estes modelos nos dados de treinamento e calculando a média dos  $B = 300$  resultados para cada métrica considerada. Os desempenhos *bootstrap* e de teste também foram calculados considerando a mediana dos  $B = 300$  resultados para cada métrica considerada. A Tabela 12 resume o desempenho do teste dos métodos. Ao considerar  $R_a$ ,  $\hat{f}^{xgb}$  superou todos os outros modelos considerando todas as métricas. Para  $F_c$ , tomando a média,  $\hat{f}^{xgb}$  foi o melhor modelo considerando todas as métricas, mas ao considerar a mediana, o  $\hat{f}^{bag}$  apresentou o menor RMSE e o maior  $R^2$ . Finalmente, para  $Ront$ , o RSM foi ligeiramente melhor que o XGB, considerando a média e mediana de RMSE, MAE e  $R^2$ .

A principal vantagem da validação cruzada via *bootstrap* é que ela fornece uma avaliação mais robusta do desempenho do modelo, especialmente quando os dados são limitados ou quando a divisão fixa do conjunto de dados pode não ser representativa. A sobreposição de observações no *bootstrap* pode superestimar o desempenho de teste do modelo e a correção deve ser aplicada para fornecer estimativas de desempenho mais confiáveis e menos enviesadas em relação ao desempenho real do modelo.

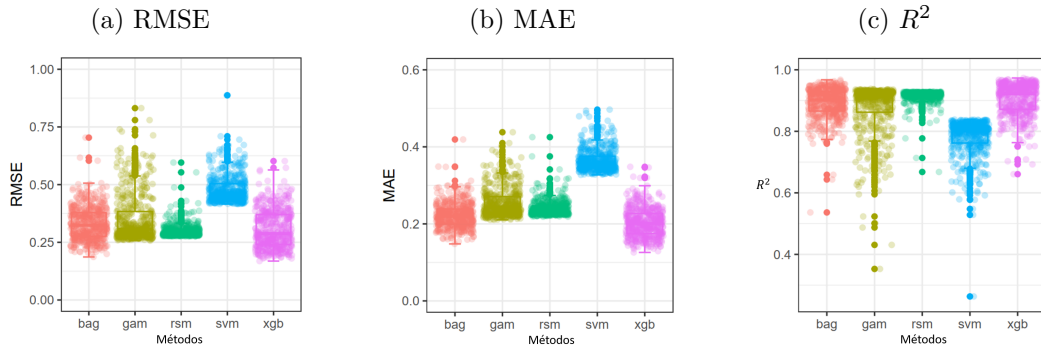
**Tabela 12 – Desempenho de teste (TP) dos modelos**

| <i>R<sub>a</sub></i>   |         |         |         |         |         |         |
|------------------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
|                        | Média   |         |         | Mediana |         |         |
|                        | RMSE    | MAE     | $R^2$   | RMSE    | MAE     | $R^2$   |
| $\hat{f}^{rsm}$        | 0,3311  | 0,2221  | 0,8924  | 0,3237  | 0,2200  | 0,9018  |
| $\hat{f}^{gam}$        | 0,4603  | 0,3040  | -3,8463 | 0,3076  | 0,2424  | 0,9113  |
| $\hat{f}^{bag}$        | 0,2992  | 0,2408  | 0,9153  | 0,2907  | 0,2358  | 0,9208  |
| $\hat{f}^{svr}$        | 0,4794  | 0,3660  | 0,7816  | 0,4599  | 0,3564  | 0,8019  |
| $\hat{f}^{xgb}$        | 0,3075  | 0,2027  | 0,9051  | 0,2875  | 0,2014  | 0,9225  |
| <i>F<sub>c</sub></i>   |         |         |         |         |         |         |
|                        | Média   |         |         | Mediana |         |         |
|                        | RMSE    | MAE     | $R^2$   | RMSE    | MAE     | $R^2$   |
| $\hat{f}^{rsm}$        | 3,0493  | 2,2569  | 0,7044  | 3,0180  | 2,2265  | 0,7131  |
| $\hat{f}^{gam}$        | 3,1560  | 2,4764  | 0,6844  | 3,0760  | 2,4400  | 0,7020  |
| $\hat{f}^{bag}$        | 2,9963  | 2,2520  | 0,7037  | 2,8184  | 2,1463  | 0,7498  |
| $\hat{f}^{svr}$        | 3,2128  | 2,4084  | 0,6735  | 3,1790  | 2,3726  | 0,6817  |
| $\hat{f}^{xgb}$        | 2,9257  | 1,9117  | 0,7254  | 2,9064  | 1,9030  | 0,7339  |
| <i>R<sub>ont</sub></i> |         |         |         |         |         |         |
|                        | Média   |         |         | Mediana |         |         |
|                        | RMSE    | MAE     | $R^2$   | RMSE    | MAE     | $R^2$   |
| $\hat{f}^{rsm}$        | 26,8415 | 20,2017 | 0,3465  | 26,5874 | 19,9566 | 0,3666  |
| $\hat{f}^{gam}$        | 33,9424 | 27,2734 | -0,0329 | 33,6476 | 26,9958 | -0,0144 |
| $\hat{f}^{bag}$        | 32,1074 | 25,6488 | 0,0699  | 31,3070 | 25,0473 | 0,1217  |
| $\hat{f}^{svr}$        | 33,3462 | 26,2584 | -0,0002 | 32,9334 | 25,8766 | 0,0282  |
| $\hat{f}^{xgb}$        | 27,1703 | 20,7338 | 0,3297  | 26,8676 | 20,5123 | 0,3532  |

Fonte: Próprio autor

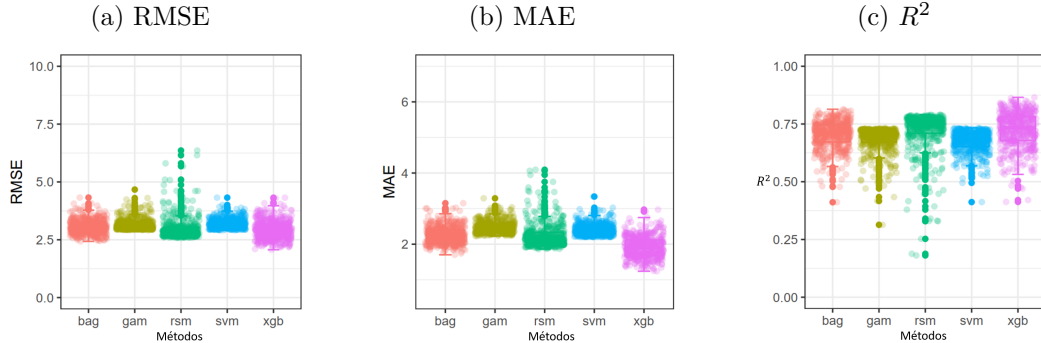
Os *boxplots* para o desempenho *bootstrap* foram plotados, eles ajudam a visualizar a variabilidade dos resultados obtidos a partir das diferentes reamostragens realizadas. Os gráficos *boxplots* da Figura 25 para  $Ra$ , Figura 26 para  $F_c$  e Figura 27 para  $Ront$ , resumem os resultados do desempenho do teste considerando as  $B = 300$  reamostragens e as métricas consideradas.

**Figura 25 – *Boxplot* do desempenho *bootstrap* para  $Ra$**



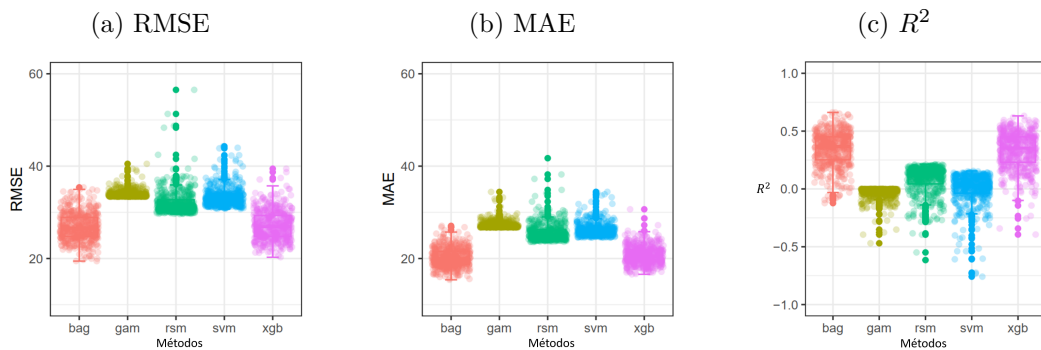
Fonte: Próprio autor

**Figura 26 – *Boxplot* do desempenho *bootstrap* para  $F_c$**



Fonte: Próprio autor

**Figura 27 – *Boxplot* do desempenho *bootstrap* para  $Ront$**



Fonte: Próprio autor

A correção do desempenho com otimismo ou viés é aplicada quando se deseja obter uma estimativa mais realista do desempenho do modelo em novos dados. A correção do otimismo ou viés foi calculado de acordo com a Equação 14. E através da Equação 15, foi calculado o desempenho com otimismo ou viés corrigido. A Tabela 13 apresenta o resumo do desempenho com otimismo corrigido. O modelo XGB apresentou os melhores resultados para todas as respostas, considerando todas as métricas. O modelo selecionado foi o  $\hat{f}^{xgb}$ , com os parâmetros previamente selecionados na etapa de aprendizado anterior, que estão resumidos na Tabela 10. É importante lembrar que o modelo final foi ajustado para todos os dados de treinamento, o que foi feito na primeira etapa de aprendizado.

**Tabela 13 – Desempenho com otimismo ou viés corrigido dos modelos**

| <i>R<sub>a</sub></i>   |         |         |         |          |         |         |
|------------------------|---------|---------|---------|----------|---------|---------|
|                        | Média   |         |         | Mediana  |         |         |
|                        | RMSE    | MAE     | $R^2$   | RMSE     | MAE     | $R^2$   |
| $\hat{f}^{rsm}$        | 0,2667  | 0,2226  | 0,9471  | 0,2443   | 0,2179  | 0,9457  |
| $\hat{f}^{gam}$        | 0,4627  | 0,3151  | -3,8392 | 0,3230   | 0,2577  | 0,9088  |
| $\hat{f}^{bag}$        | 0,4945  | 0,3648  | 0,7936  | 0,4894   | 0,3633  | 0,7932  |
| $\hat{f}^{svr}$        | 0,4998  | 0,3968  | 0,7815  | 0,4899   | 0,3944  | 0,7930  |
| $\hat{f}^{xgb}$        | 0,1395  | 0,1126  | 1,0000  | 0,1098   | 0,1035  | 1,0000  |
| <i>F<sub>c</sub></i>   |         |         |         |          |         |         |
|                        | Média   |         |         | Mediana  |         |         |
|                        | RMSE    | MAE     | $R^2$   | RMSE     | MAE     | $R^2$   |
| $\hat{f}^{rsm}$        | 2,5452  | 1,8684  | 0,8263  | 2,5286   | 1,8596  | 0,8179  |
| $\hat{f}^{gam}$        | 3,7463  | 3,0558  | 0,6074  | 3,7262   | 3,0668  | 0,6057  |
| $\hat{f}^{bag}$        | 4,5412  | 3,7432  | 0,4226  | 4,4241   | 3,7044  | 0,4492  |
| $\hat{f}^{svr}$        | 3,3482  | 2,6012  | 0,6764  | 3,3427   | 2,6021  | 0,6718  |
| $\hat{f}^{xgb}$        | 1,8609  | 0,9311  | 0,9280  | 1,8196   | 0,9276  | 0,9219  |
| <i>R<sub>ont</sub></i> |         |         |         |          |         |         |
|                        | Média   |         |         | Mediana  |         |         |
|                        | RMSE    | MAE     | $R^2$   | RMSE     | MAE     | $R^2$   |
| $\hat{f}^{rsm}$        | 29,4352 | 23,5879 | 0,2894  | 29,43979 | 23,6454 | 0,2966  |
| $\hat{f}^{gam}$        | 40,1652 | 32,5279 | -0,3146 | 39,9090  | 32,4972 | -0,2944 |
| $\hat{f}^{bag}$        | 41,3628 | 33,7844 | -0,4015 | 41,0284  | 32,7485 | -0,3587 |
| $\hat{f}^{svr}$        | 35,0125 | 28,6277 | -0,0282 | 34,6537  | 28,5354 | 0,0017  |
| $\hat{f}^{xgb}$        | 21,3084 | 17,8053 | 0,6562  | 21,1000  | 17,8449 | 0,6579  |

**Fonte: Próprio autor**

Nessa fase de aprendizado, os modelos inicialmente selecionados e ajustados foram comparados por meio de validação cruzada via *bootstrap* e pelo desempenho com otimismo corrigido. O modelo XGB superou os demais considerando todas as métricas, como pode ser confirmado na Tabela 13. O desempenho final dos métodos, que foi obtido considerando os modelos selecionados e/ou ajustados na primeira fase de aprendizado quando aplicados aos dados completos, está resumido na Tabela 11

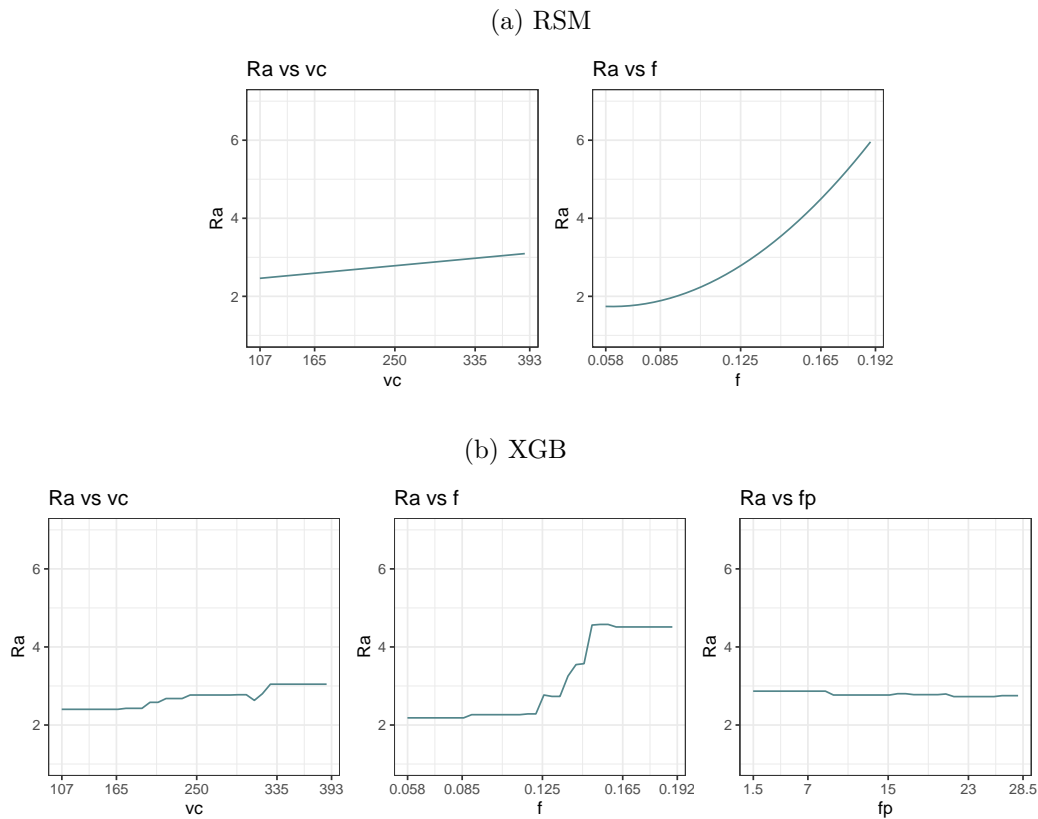
### 5.3 INTERPRETAÇÃO DOS MODELOS

Para interpretar os modelos e discutir as tendências de acordo com a teoria do processo de torneamento interno, foram gerados gráficos de efeitos principais, interações, importância e contorno. A interpretação do modelo XGB para cada resposta iniciou-se através dos gráficos de efeitos principais. Para fins de comparação, os gráficos de efeitos principais para o método RSM também foram considerados, uma vez que essa abordagem tradicional é usada em várias tarefas de modelagem de processos de usinagem. É importante comparar o modelo  $\hat{f}^{xgb}$  vencedor com este método tradicional para entender porque, neste caso, o XGB tem melhor capacidade de representar a variação da resposta em relação aos parâmetros do processo.

A Figura 28a mostra o gráfico de efeitos principais para o modelo RSM considerando as variáveis de entrada,  $v_c$  e  $f$  na resposta,  $Ra$ . A velocidade de corte,  $v_c$ , apresentou efeito linear positivo em  $Ra$ . Tal fenômeno pode ser explicado pela possível influência da maior rotação da peça na vibração, levando a um consequente aumento na rugosidade. O avanço,  $f$ , apresentou um efeito linear positivo e um efeito quadrático com concavidade em  $Ra$ .

A Figura 28b mostra o gráfico de efeitos principais para o modelo XGB considerando as três variáveis de entrada,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$  na resposta  $Ra$ . Os gráficos de efeitos para XGB são semelhantes aos gráficos de função degrau, devido à quantidade limitada de dados obtidos com os experimentos planejados. É possível observar mudanças sensíveis no comportamento da resposta. O aumento da velocidade de corte,  $v_c$ , acarreta pequenos degraus de aumento em  $Ra$ . Para  $f < 0,125 \text{ mm}/v$  não houve mudança considerável na rugosidade. Considerando o avanço  $f = 0,125 \text{ mm}/v$  até  $f = 0,15 \text{ mm}/v$ , o aumento do avanço,  $f$ , acarreta altos degraus de aumento em  $Ra$ . Com avanços maiores, a rugosidade se manteve estável. O efeito positivo e proeminente do avanço na rugosidade no processo de torneamento interno pode estar relacionado ao resultado da ação geométrica da ferramenta de corte na superfície durante a usinagem. A posição de fixação,  $f_p$ , apresentou o menor efeito entre os parâmetros considerados em  $Ra$ . Como o PEEK é um material plástico, facilita a fixação da peça, viabilizando a estabilidade do processo de torneamento interno.

**Figura 28** – Gráficos de efeitos principais para  $Ra$  considerando os modelos de RSM e XGB



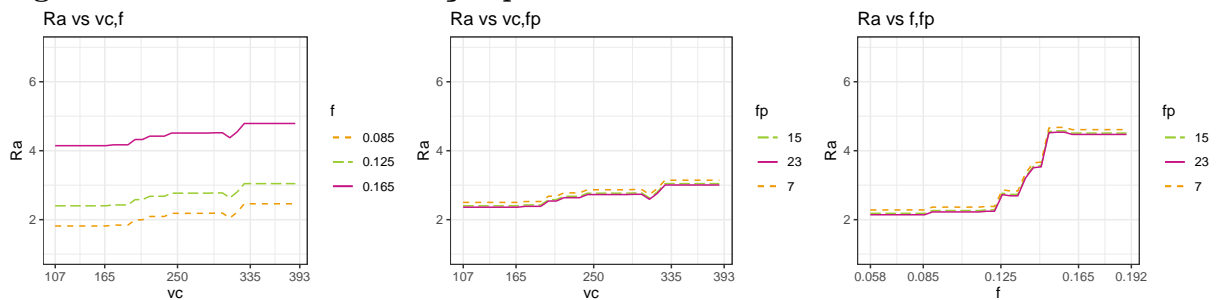
**Fonte: Próprio autor**

O modelo RSM reduzido para  $Ra$  não apresentou nenhuma interação. A Figura 29 apresenta o gráfico de interação com todas as combinações de pares entre as três variáveis de entrada em relação à resposta  $Ra$  para o modelo XGB. O XGB é capaz de modelar pequenas interações complexas que são importantes para melhorar a capacidade de previsão. No primeiro gráfico,  $v_c$  é colocado no eixo horizontal com  $f$  na escala de cores. Em todos os gráficos são considerados três níveis, incluindo os níveis fatoriais e centrais do fator na escala de cores. Para os níveis de avanços plotados em cores e tipos de linhas distintas, é possível ver que  $Ra$  muda no modelo XGB em pequenos passos e não linearmente. Portanto, é possível aumentar a velocidade de corte em algumas faixas pequenas, mas significativas, para um nível de avanço fixo, sem aumentar a rugosidade. Esse aumento em  $v_c$  resultará em maior produtividade. Por exemplo, com  $f = 0,085 \text{ mm/v}$  e  $v_c = 107 \text{ m/min}$  até  $v_c = 190 \text{ m/min}$  obtém-se  $Ra = 1,8 \mu\text{m}$ . Então, com  $v_c = 190 \text{ m/min}$  e  $f = 0,085 \text{ mm/v}$ , é possível manter a rugosidade nesse nível garantindo maior produtividade. O PEEK é um material que requer atenção especial para a formação dos cavacos. A combinação de uma velocidade de corte alta e um avanço maior pode afetar

a formação adequada dos cavacos, acarretando em cavacos inadequados e gerando uma rugosidade maior na peça.

O segundo gráfico da Figura 29 mantém  $v_c$  no eixo horizontal com  $f_p$  na escala de cores. Com  $v_c = 107 \text{ m/min}$  até  $v_c = 190 \text{ m/min}$ , observa-se  $R_a$  constante no menor nível. Obtém-se  $R_a$  intermediário com  $v_c = 190 \text{ m/min}$  até  $v_c = 310 \text{ m/min}$ , e o maior  $R_a$  com  $v_c = 310 \text{ m/min}$  até  $v_c = 393 \text{ m/min}$ , sem interação considerável com a posição de fixação. Por fim, o terceiro gráfico considera  $f$  no eixo horizontal, mantendo  $f_p$  na escala de cores. De  $f = 0,058 \text{ mm/v}$  a  $f = 0,125 \text{ mm/v}$ , os resultados de rugosidade foram quase constantes e os menores, com pouca diferença em relação ao nível de posição de fixação da peça. De  $f = 0,125 \text{ mm/v}$  a  $f = 0,15 \text{ mm/v}$ , observa-se uma tendência de aumento da rugosidade. Finalmente, com  $f > 0,15 \text{ mm/v}$ , observa-se  $R_a$  constante, mas com valores mais altos observados.

**Figura 29 – Gráficos de interação para  $R_a$  considerando o modelo XGB**



**Fonte: Próprio autor**

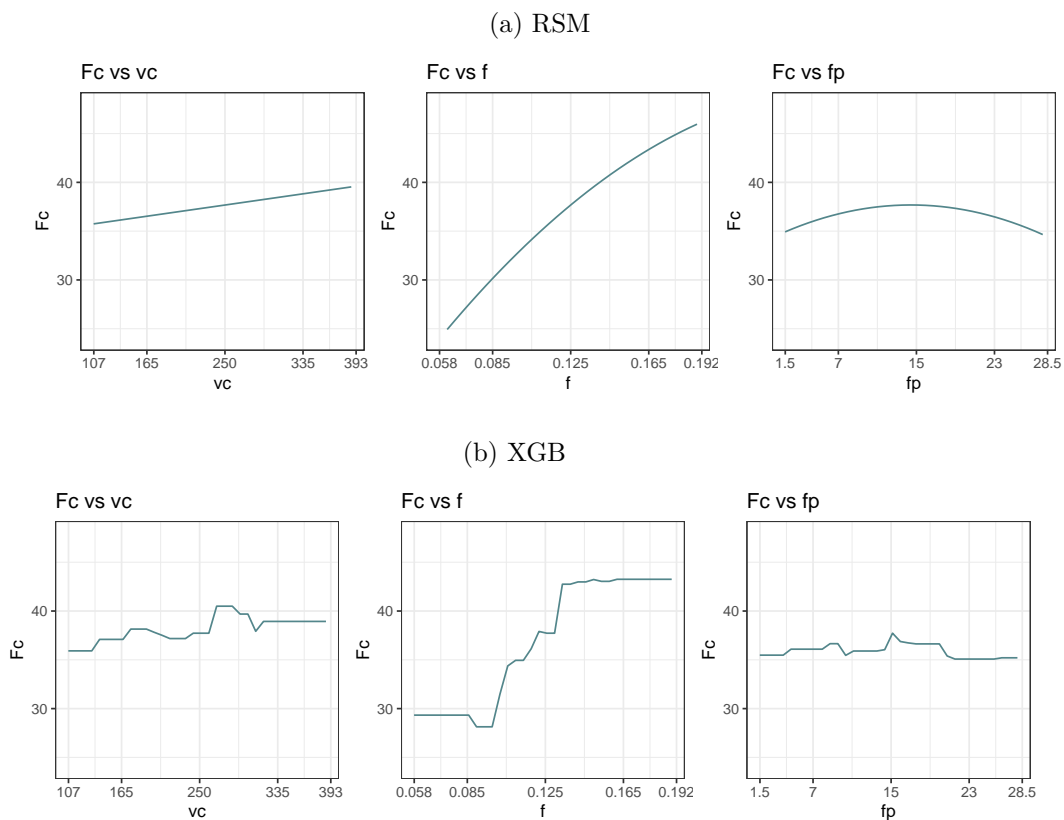
A Figura 30a mostra o gráfico de efeitos principais para o modelo RSM considerando as três variáveis de entrada,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$ , na resposta  $F_c$ . Considerando os efeitos principais, a velocidade de corte  $v_c$  apresentou um leve efeito linear positivo em  $F_c$ . O avanço  $f$  apresentou o maior efeito linear positivo somado por um pequeno efeito quadrático convexo em  $F_c$ . O efeito da posição de fixação  $f_p$ , em  $F_c$  é predominantemente quadrático convexo.

A Figura 30b mostra o gráfico de efeitos principais para o modelo XGB considerando as três variáveis de entrada,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$ , na resposta  $F_c$ . Por meio do XGB, um modelo mais sensível foi alcançado. No gráfico do efeito de  $v_c$  em  $F_c$ , o menor  $v_c$  resultou na menor força de corte, enquanto  $v_c$  próximo a  $290 \text{ m/min}$  resultou na maior  $F_c$ . No gráfico do efeito de  $f$  em  $F_c$ , foi possível ver alguns degraus de aumento considerável em  $F_c$  com aumento de  $f$ ,  $0,09 \text{ mm/v} < f < 0,13 \text{ mm/v}$ . Espera-se que a força de corte

aumente com o aumento do avanço, devido à sua relação com a área da seção transversal do cavaco não deformado, uma vez que o avanço é diretamente proporcional à espessura do cavaco não deformado no processo de torneamento interno. Esse padrão de aumento é observado em parte significativa do domínio de  $f$ . No entanto, a partir de  $f = 0,13 \text{ mm}/v$ , observa-se um platô com a maior força de corte obtida.

Por fim, o gráfico do efeito da posição de fixação  $f_p$  apresentou dois intervalos de mudança em  $F_c$ , próximo de  $f_p = 4,25 \text{ mm}$  a  $f_p = 10,5 \text{ mm}$  e de  $f_p = 15 \text{ mm}$  a  $f_p = 20 \text{ mm}$ , onde  $F_c$  apresentou-se um pouco mais alto. A partir de  $f_p = 21 \text{ mm}$ , observam-se os menores resultados de  $F_c$ . O PEEK é considerado um material leve em comparação com os materiais metálicos. Dessa forma, justifica-se que a posição de fixação da peça não influenciou significativamente a rigidez do sistema de usinagem, afetando menos as forças de corte. Ao identificar os efeitos principais, pode-se entender quais variáveis têm o maior impacto no resultado e, assim, otimizar o processo. O gráfico de efeitos principais ajuda a validar e interpretar os modelos.

**Figura 30 – Gráficos de efeitos principais para  $F_c$  considerando os modelos de RSM e XGB**



**Fonte: Próprio autor**

Os gráficos de interação são úteis para interpretar a sinergia entre as variáveis

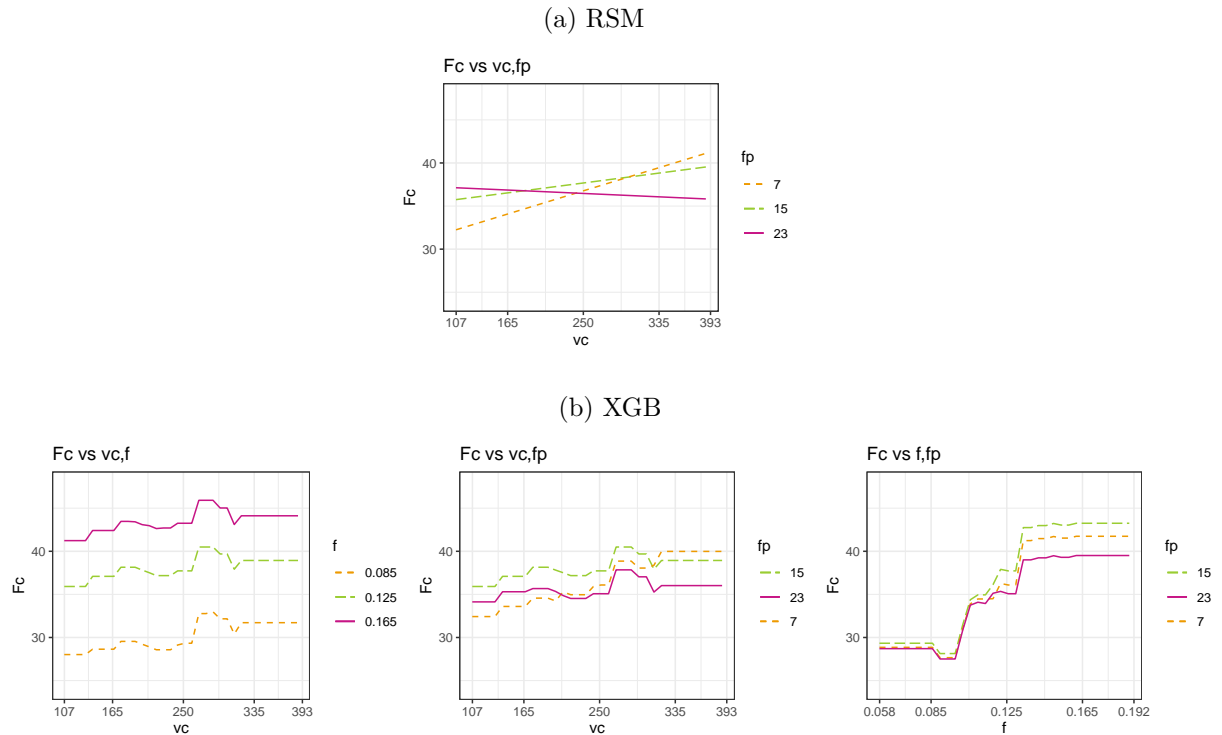
preditoras consideradas. A Figura 31a apresenta o gráfico de interação entre  $v_c$  e  $f_p$  em  $F_c$  para o modelo. Para  $f_p = 23 \text{ mm}$ ,  $v_c$  apresentou um efeito linear negativo em  $F_c$ , enquanto para  $f_p$  intermediário ou baixo,  $v_c$  apresentou efeito linear positivo em  $F_c$ .

Para o modelo XGB, o gráfico de interação da Figura 31b plota todas as combinações aos pares entre as três variáveis de entrada na resposta  $F_c$ . Observa-se um padrão constante de variação em relação a  $v_c$ , independentemente do nível de  $f$ . Para o maior nível de avanço, é possível observar os maiores valores de  $F_c$  com  $v_c = 272 \text{ m/min}$ . Praticamente, o aumento do avanço acarreta um aumento na força de corte devido ao aumento da seção de corte.

A segunda interação do modelo XGB,  $v_c \times f_p$ , pode ser contrastada com a mesma do modelo RSM. É possível perceber que o modelo RSM, quando comparado com o XGB, não é capaz de modelar a mudança complexa no efeito de  $v_c$  em  $F_c$  quando  $f_p$  muda concomitantemente. O efeito negativo de  $v_c$  sobre  $F_c$ , quando  $f_p = 23 \text{ mm}$ , observado no modelo RSM, não é confirmado pelo modelo XGB. O modelo de XGB também não sustenta os níveis mais altos de  $F_c$  apontados pelo modelo de RSM com  $v_c$  baixa e  $f_p$  alto. Já para os níveis baixo e intermediário de  $f_p$  o comportamento de ambos modelos é similar quando se observa os cruzamentos das linhas. Pode-se observar também que em maiores valores  $v_c$  e  $f_p$  tem-se uma estabilidade de  $F_c$  em valores relativamente menores se comparados com valores baixos de  $f_p$ . O mesmo fenômeno aconteceu em altos valores de  $f \times f_p$ . O modelo XGB capta não-linearidades e mudanças complexas que o modelo reduzido RSM não consegue modelar.

Por fim, a terceira interação,  $f \times f_p$ , aponta que o menor valor de  $F_c$  obtido foi com  $f$  em aproximadamente  $0,095 \text{ mm/v}$ , independente do valor de  $f_p$ . Entretanto, para níveis intermediário a alto de  $f$  o efeito de  $f_p$  fica mais evidente em platôs de  $F_c$  em relação a  $f$ .

Figura 31 – Gráficos de interação para  $F_c$  considerando os modelos de RSM e XGB



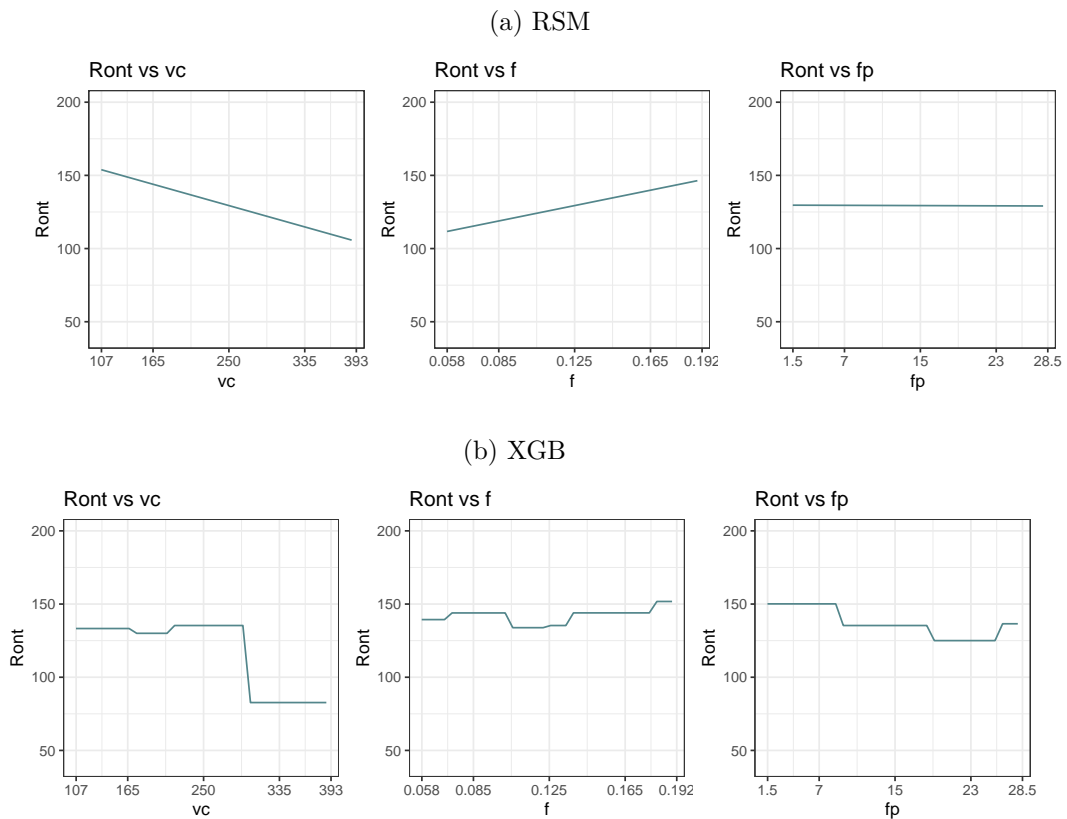
Fonte: Próprio autor

A Figura 32a mostra o gráfico de efeitos principais para o modelo RSM considerando as três variáveis de entrada,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$ , na resposta  $Ront$ . A velocidade de corte,  $v_c$ , apresentou efeito linear negativo em  $Ront$ . O avanço,  $f$ , em  $Ront$ , apresentou efeito linear positivo. Este fato pode ser explicado pela variação da resposta de força de corte em função de  $v_c$  e  $f$ . O avanço teve bastante influência na força de corte, e isto pode ter reproduzido nos desvios de circularidade. A posição de fixação,  $f_p$ , não apresentou efeito principal na circularidade, mas o termo foi mantido no modelo devido à presença de uma interação com ele. Os efeitos serão discutidos para o modelo de XGB, o qual foi escolhido via validação cruzada.

A Figura 32b mostra o gráfico de efeitos principais para o modelo XGB considerando as três variáveis de entrada,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$  na resposta  $Ront$ . No primeiro gráfico, o aumento da velocidade de corte,  $v_c$ , apresentou  $Ront$  aproximadamente constante até  $v_c = 292,5 \text{ m/min}$  e, após isso, apresentou uma etapa de diminuição, onde o menor valor de  $Ront_t$  foi alcançado e permaneceu constante até  $v_c = 393 \text{ m/min}$ . Este efeito pode ser justificado pela tendência de aumento da velocidade de corte em contribuir para o processo de cisalhamento do cavaco e, conseqüentemente, melhorar o processo de corte.

As mudanças em  $Ront$  em relação a  $f$  foram um pouco mais complexas. Observa-se o menor erro circularidade em  $f = 0,105 \text{ mm}/v$  até  $f = 0,125 \text{ mm}/v$ . A mudança na posição de fixação,  $f_p$ , apresentou três etapas significativas de diminuição em  $Ront$  de  $f_p = 1,5 \text{ mm}$  até  $f_p = 9 \text{ mm}$ ,  $f_p = 9 \text{ mm}$  até  $f_p = 19 \text{ mm}$ , e  $f_p = 19 \text{ mm}$  a  $f_p = 25 \text{ mm}$ , onde foi alcançado o menor valor de  $Ront$ . Em geral, é possível concluir que esse padrão de variação capturado pelo modelo XGB não pode ser capturado por uma abordagem de modelagem mais simples, como a regressão polinomial múltipla.

**Figura 32 – Gráficos de efeitos principais para  $Ront$  considerando os modelos de RSM e XGB**



**Fonte: Próprio autor**

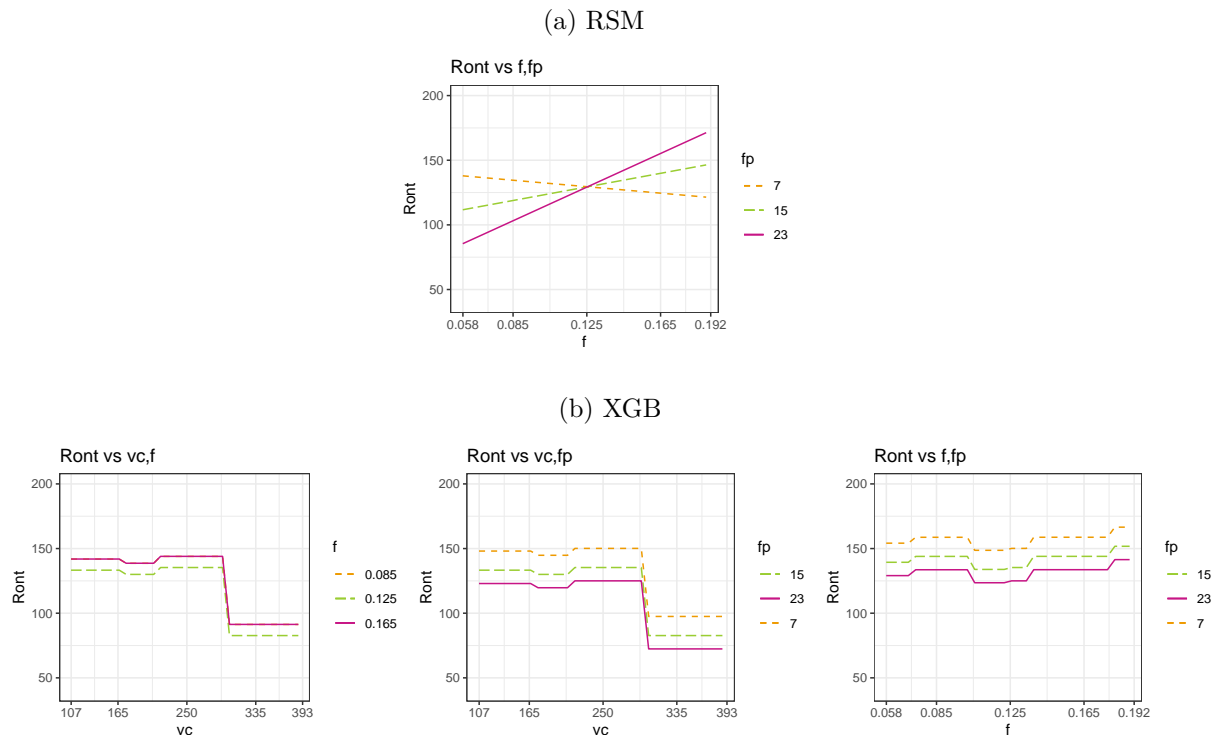
A Figura 33a mostra o único gráfico de interação presente no modelo RSM reduzido para  $Ront$ . Observa-se também que com avanço no nível intermediário,  $f = 0,125 \text{ mm}/v$ , os valores de  $Ront$  manteve-se constante, independente da variação de  $f_p$ .

O gráfico de interação da Figura 33b considera todas as combinações aos pares entre as três variáveis de entrada na resposta  $Ront$  para o modelo XGB. Na interação  $v_c \times f$ , a partir de  $v_c = 295 \text{ m}/\text{min}$ , combinado com  $f = 0,125 \text{ mm}/v$ , são obtidos os menores resultados de  $Ront$ . Conforme mencionado anteriormente, o aumento da velocidade de corte pode permitir um melhor mecanismo de corte, uma vez que o processo se torna

mais estável. A interação  $v_c \times f_p$ , apresentou um comportamento semelhante à interação anterior. Os maiores valores de  $v_c$  apresentaram uma tendência em reduzir erros de circularidade.

Comparando a interação  $f \times f_p$  do modelo XGB com a mesma do modelo RSM, não é possível assegurar que a simples interação observada no RSM seja suficiente para alcançar uma predição satisfatória. É possível perceber que a mudança do efeito de  $f$  sobre  $Ront$ , quando  $f_p$  muda concomitantemente, no modelo RSM, não é confirmada pelo modelo XGB. A capacidade de predição dos modelos resumidos na Tabela 11 garante que o método XGB seja superior aos demais concorrentes.

**Figura 33 – Gráficos de interação para  $Ront$  considerando os modelos de RSM e XGB**

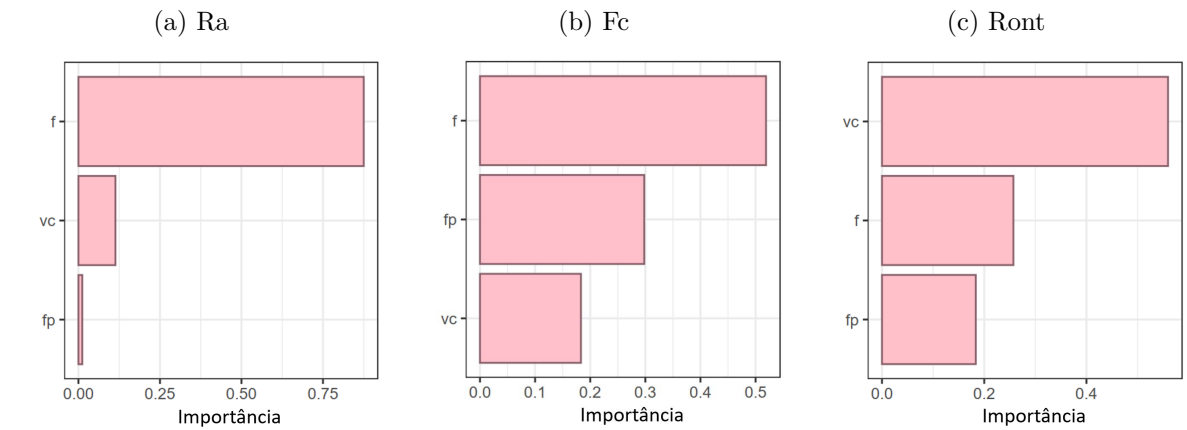


**Fonte: Próprio autor**

O gráfico de importância relativa da variável mede a importância de cada variável preditora na resposta de interesse. Para cada parâmetro permuta-se aleatoriamente os valores deste nos dados de treinamento e refaz-se a modelagem, medindo ao final a diferença do erro no modelo considerando os níveis corretos e os níveis embaralhados deste parâmetro. A importância relativa das variáveis de entrada para o modelo XGB nas três respostas foi plotada na Figura 34.

A variável mais importante em  $Ra$  foi o avanço  $f$ , com importância relativa de aproximadamente 87%, seguido de  $v_c$  e  $f_p$ , com 12% e 1% de importância relativa, respectivamente. A variável mais importante em  $F_c$  também foi o avanço  $f$ , com 52% de importância, seguido por  $f_p$  com 30% de importância, e  $v_c$  com 18% de importância. A variável mais importante em  $Ront$  foi  $v_c$  com 56% de importância, seguido por  $f$  com 26% de importância e  $f_p$  com 18% de importância. Alguns materiais, como os polímeros de alto desempenho podem ser mais sensíveis a variações na velocidade de corte, o que por sua vez pode influenciar a circularidade. Por meio desses gráficos, pode-se concluir que todas as variáveis de entrada são importantes, onde o avanço é o efeito mais importante em duas respostas, enquanto  $v_c$  em uma resposta.

**Figura 34 – Importância das variáveis de entrada nos modelos de XGB**



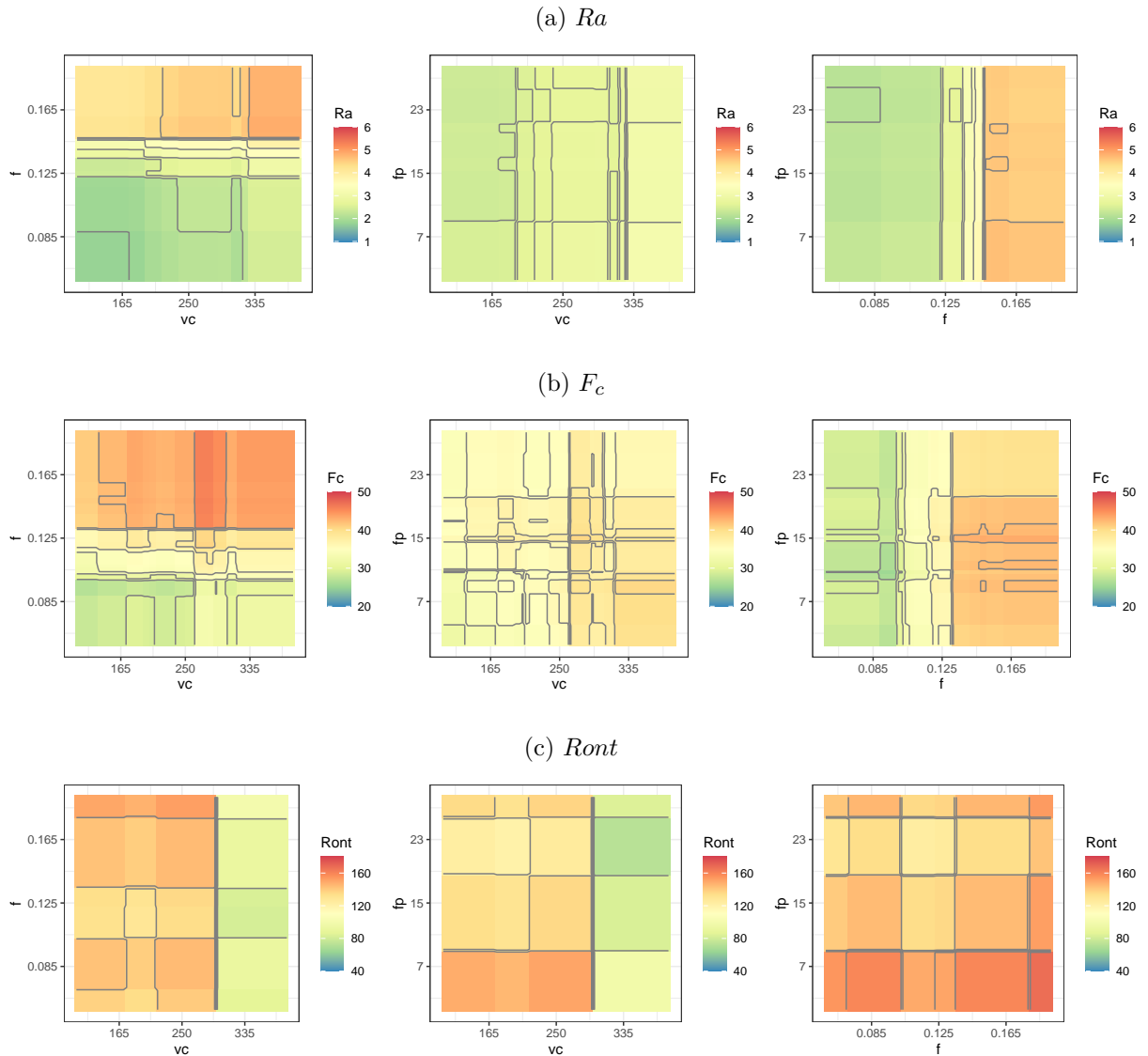
Fonte: Próprio autor

Os gráficos de contorno também podem ajudar a avaliar as interações das variáveis de entrada nas respostas. A Figura 35 mostra alguns gráficos de contorno considerando as combinações aos pares das variáveis de entrada para o modelo XGB. Em cada gráfico, a variável não considerada foi mantida constante no nível central do planejamento. Esses gráficos também podem ajudar a visualizar a previsão dos resultados para as combinações desejadas dos preditores. Cada visualização é apenas um corte dos complexos modelos XGB, mas pode ajudar a encontrar regiões do espaço de entrada que otimizam as respostas.

Na Figura 35, os contornos não são curvos devido às características do modelo XGB. Os gráficos representados na Figura 35a apresentam linhas de contorno para os valores de  $Ra$ . O primeiro contorno é em função da  $v_c$  e  $f$ . Nota-se que, para posição de fixação  $f_p$  fixada no nível central, com  $f$  no menor nível e  $v_c$  no menor nível, baixa rugosidade é obtida. Os gráficos representados na Figura 35b apresentam linhas de contorno para os valores de  $F_c$ . O mesmo ocorre para  $F_c$  em função de  $v_c$  e  $f$ . Os menores

valores de  $F_c$  são obtidos com os menores níveis de  $v_c$  e  $f$ , fixando  $f_p$  no nível central. Pode-se notar uma semelhança no comportamento de  $Ra$  e  $F_c$ , o que pode ser atribuído a uma correlação significativa entre essas respostas. Os gráficos apresentados na Figura 35c apresentam linhas de contorno para os valores de  $Ront$ . Os menores valores de  $Ront$ , em função de  $v_c$  e  $f$ , fixando  $f_p$  no nível central, são obtidos com maior nível de  $v_c$  e  $f$  no nível intermediário. Já para a combinação  $v_c$  e  $f_p$ , com  $f$  no nível central, níveis altos de  $f_p$  e  $v_c$  minimizam o erro de forma. Na combinação entre  $f$  e  $f_p$ , com  $v_c$  fixo no nível central, níveis mais altos de  $f_p$  e intermediário de  $f$  sugerem um desvio de circularidade mais baixo. Os gráficos de contorno são úteis para representar como os valores das respostas ajustados se relacionam a duas variáveis (bidimensional) com base em uma equação do modelo.

**Figura 35 – Gráficos de contorno para  $Ra$ ,  $F_c$  e  $Ront$  considerando o modelo XGB**



Fonte: Próprio autor

## 5.4 OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO EVOLUTIVA

Seguindo o fluxograma do método proposto na Figura 16, após a interpretação dos modelos, realizou-se a otimização multiobjetivo. Os modelos obtidos através de XGB para  $Ra$ ,  $F_c$  e  $Ron_t$  foram considerados. Além disso, a função determinística da taxa de remoção de material foi adicionada na otimização para considerar a produtividade no torneamento interno de PEEK. Devido à alta correlação positiva entre  $Ra$  e  $F_c$ , com um coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,74, o cenário considerando quatro objetivos não apresentou resultados interessantes para o *trade-off* entre essas funções.

As otimizações multiobjetivo foram então conduzidas considerando dois problemas de três objetivos envolvendo  $Ra$ ,  $Ron_t$  e  $MRR$ , e  $F_c$ ,  $Ron_t$  e  $MRR$ . As funções objetivo de  $Ra$ ,  $F_c$  e  $Ron_t$  são os modelos XGB obtidos, enquanto o modelo  $MRR$  é a função determinística da taxa de remoção de material para o processo de torneamento,  $MRR = v_c \times f \times a_p$ . É importante lembrar que neste estudo  $a_p = 0,8 \text{ mm}$ , portanto,  $MRR$  aqui é uma função de apenas dois parâmetros do processo de torneamento interno. Além disso, esta função é independente da posição de fixação da peça na placa.

Para a seleção do melhor método de otimização multiobjetivo, foi considerado o hipervolume. Pode-se dizer que o hipervolume é a métrica mais importante na otimização multiobjetivo, pois mede a cobertura, dominância e diversidade das soluções. A Tabela 14 resume a média e o desvio padrão do desempenho de 5 realizações dos MOEA para as duas otimizações tri-objetivos analisadas. Como pode ser observado, o método NSGA-II teve melhor desempenho do que os concorrentes para as duas otimizações tri-objetivos, garantindo mais dominância, cobertura e diversidade das soluções, pois alcançou maior hipervolume. Dessa forma, o método NSGA-II foi selecionado.

**Tabela 14 – Hipervolume (média (std)) dos métodos multiobjetivos**

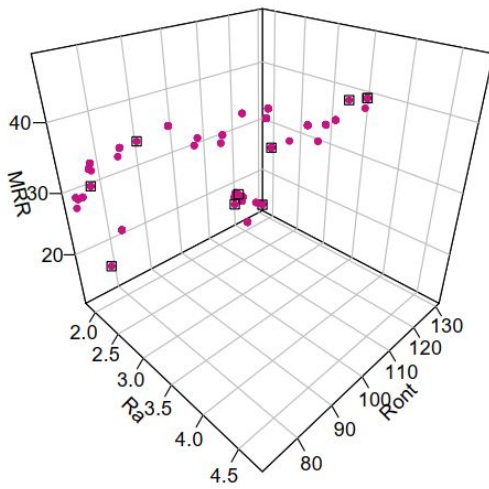
| <i>Ra vs Ron<sub>t</sub> vs MRR</i>            |                |
|--|----------------|
| Método   | Hipervolume    |
| CaRamel  | 179607 (922,2) |
| MOPSO-CD                                       | 162024 (36,0)  |
| NSGA-II  | 181110 (91,2)  |
| <i>F<sub>c</sub> vs Ron<sub>t</sub> vs MRR</i> |                |
| Método   | Hipervolume    |
| CaRamel  | 58305 (1561)   |
| MOPSO-CD                                       | 60499 (126,0)  |
| NSGA-II  | 67816 (99,1)   |

**Fonte: Próprio autor**

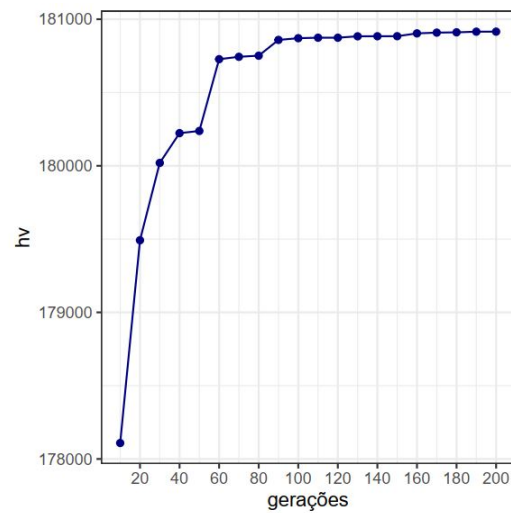
Os problemas de otimizações tri-objetivos foram resolvidos através do método NSGA-II. A Figura 36 mostra a fronteira de Pareto obtida para o problema de três objetivos para explorar o *trade-off* entre  $Ra$ ,  $Ront$  e  $MRR$ . Foram obtidas 160 soluções ótimas de Pareto. A fronteira de Pareto é plotada na Figura 36a, enquanto a evolução do hipervolume em relação ao número de gerações foi plotado na Figura 36b, mostrando que 200 gerações foram suficientes para a estabilização da fronteira de Pareto.

**Figura 36 – MOEA de  $Ra$ ,  $Ront$  e  $MRR$  por meio de NSGA-II**

(a) Fronteira de Pareto para  $Ra$  vs  $Ront$  vs  $MRR$



(b) Evolução do hipervolume



**Fonte: Próprio autor**

Para melhorar a interpretação das soluções, foi aplicada a abordagem de pseudopeso, selecionando soluções com alto *trade-off*. Os resultados estão resumidos na Tabela 15. Os pesos,  $w_1$ ,  $w_2$  e  $w_3$ , níveis codificados dos parâmetros,  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , os níveis originais dos parâmetros,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$ , e as soluções de Pareto,  $Ra$ ,  $Ront$  e  $MRR$ , são fornecidos. Para visualizar a solução selecionada através do pseudopeso, eles foram destacados com quadrados pretos na fronteira de Pareto da Figura 36a. Esses resultados auxiliam o tomador de decisão a obter uma solução adequada para um cenário de produção específico.

Na Tabela 15,  $w_1$ ,  $w_2$  e  $w_3$  estão relacionados a  $Ra$ ,  $Ront$  e  $MRR$ , respectivamente. Os melhores resultados para cada resposta são obtidos nas três primeiras linhas da Tabela, quando os pesos associados são iguais à unidade, ou seja, minimização de  $Ra$  na primeira linha, minimização de  $Ront$  na segunda linha e maximização de  $MRR$  na terceira linha. O  $Ra$  mais baixo é alcançado com  $v_c = 174,42 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,09 \text{ mm/v}$ ,  $f_p = 22,03 \text{ mm}$ ,

enquanto o  $Ron_t$  mais baixo é alcançado com  $v_c = 373,31 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,12 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 21,27 \text{ mm}$ . O máximo  $MRR$  foi obtido com  $v_c = 325,47 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,18 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 14,74 \text{ mm}$ . Ao minimizar  $Ra$ , com  $w_1 = 1$ , obtém-se os piores resultados para  $Ron_t$  e  $MRR$ . Em uma situação na qual se deseja obter um equilíbrio entre as três respostas, o cenário com  $w_i = 1/3$ ,  $\forall i = 1, 2, 3$ , é uma boa solução. Este cenário na Tabela resulta em um  $Ra = 2,562 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $Ront = 81,23 \text{ }\mu\text{m}$  quase ótimo com a produtividade próxima de 80% do melhor resultado, alcançado com  $v_c = 392,83 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,12 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 15,14 \text{ mm}$ . Outros cenários considerados na Tabela também são uma possibilidade para o tomador de decisão.

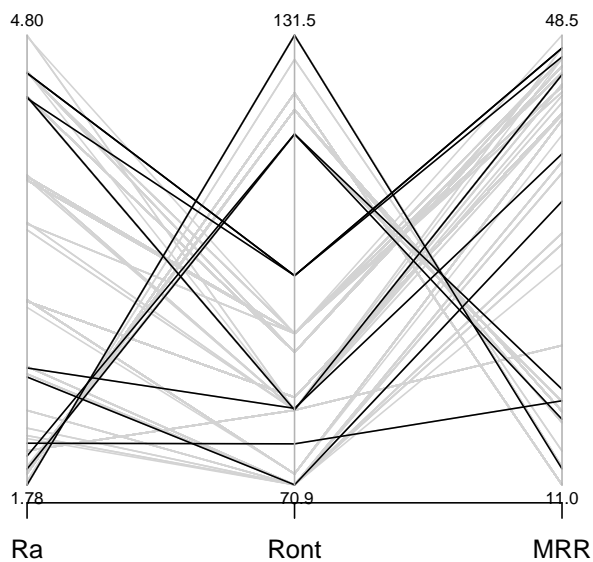
**Tabela 15 – Pseudopesos para soluções Pareto ótimas de  $Ra$ ,  $Ront$  e  $MRR$**

| $w_1$ | $w_2$ | $w_3$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $v_c$  | $f$  | $f_p$ | $Ra$  | $Ron_t$ | $MRR$ |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|------|-------|-------|---------|-------|
| 1,00  | 0,00  | 0,00  | -0,89 | -0,91 | 0,88  | 174,42 | 0,09 | 22,03 | 1,776 | 131,55  | 12,34 |
| 0,00  | 1,00  | 0,00  | 1,45  | -0,23 | 0,78  | 373,31 | 0,12 | 21,27 | 2,502 | 70,91   | 34,62 |
| 0,00  | 0,00  | 1,00  | 0,89  | 1,42  | -0,03 | 325,47 | 0,18 | 14,74 | 4,545 | 91,12   | 47,38 |
| 0,67  | 0,33  | 0,00  | -0,85 | -0,22 | 0,86  | 177,33 | 0,12 | 21,91 | 1,883 | 118,21  | 16,47 |
| 0,67  | 0,00  | 0,33  | -0,67 | -0,06 | 0,77  | 193,23 | 0,12 | 21,20 | 1,970 | 118,21  | 18,97 |
| 0,33  | 0,67  | 0,00  | 0,78  | -1,34 | 0,57  | 316,11 | 0,07 | 19,52 | 2,056 | 76,44   | 18,01 |
| 0,33  | 0,00  | 0,67  | 0,78  | 1,49  | -0,04 | 316,11 | 0,18 | 14,67 | 4,376 | 99,12   | 46,65 |
| 0,00  | 0,67  | 0,33  | 0,78  | 1,34  | 0,49  | 316,11 | 0,18 | 18,91 | 4,385 | 81,01   | 45,17 |
| 0,00  | 0,33  | 0,67  | 0,89  | 1,42  | -0,03 | 325,47 | 0,18 | 14,74 | 4,545 | 99,12   | 47,38 |
| 0,33  | 0,33  | 0,33  | 1,68  | -0,06 | 0,02  | 392,83 | 0,12 | 15,14 | 2,562 | 81,23   | 38,57 |

**Fonte: Próprio autor**

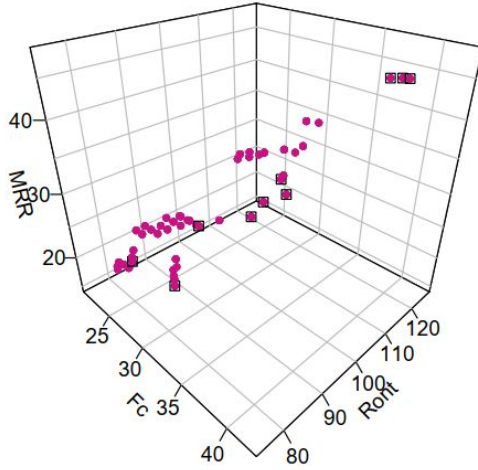
Para melhorar a visualização das soluções de Pareto ótimas, foi utilizado um gráfico de coordenadas paralelas plotado na Figura 37. As soluções selecionadas através do pseudopeso foram destacadas em pretos.

Figura 37 – Soluções de Pareto para otimização  $Ra$  vs  $Ront$  vs  $MRR$

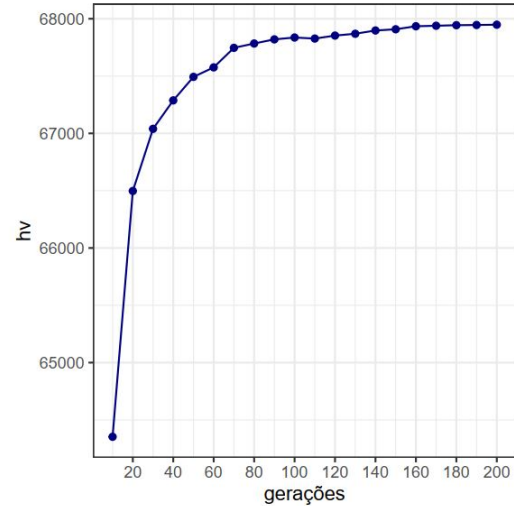


Fonte: Próprio autor

A Figura 38 plota a fronteira de Pareto obtida para o problema de três objetivos para explorar o *trade-off* entre  $F_c$ ,  $Ront$  e  $MRR$ . Também foram obtidas 160 soluções ótimas de Pareto. A Figura 38a mostra a fronteira de Pareto e a Figura 38b ilustra a evolução do hipervolume em relação ao número de gerações. Essa evolução demonstra que 200 gerações foram suficientes para a estabilização da fronteira de Pareto.

**Figura 38 – MOEA de  $F_c$ ,  $Ron_t$  e  $MRR$  por meio de NSGA-II**(a) Fronteira de Pareto para  $F_c$  vs  $Ron_t$  vs  $MRR$ 

(b) Evolução do hipervolume

**Fonte: Próprio autor**

A Tabela 16 resume os resultados da abordagem de pseudopeso, selecionando soluções com alto *trade-off*. Da mesma forma que na otimização anterior, os pesos,  $w_1$ ,  $w_2$  e  $w_3$ , níveis codificados dos parâmetros,  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , os níveis não codificados dos parâmetros,  $v_c$ ,  $f$ , e  $f_p$ , e as soluções de Pareto,  $F_c$ ,  $Ron_t$  e  $MRR$ , são fornecidos. Para visualizar a solução selecionada através do pseudopeso, eles foram destacados com quadrados pretos na fronteira de Pareto da Figura 38.

Observando a Tabela 16,  $w_1$ ,  $w_2$  e  $w_3$  estão relacionados a  $F_c$ ,  $Ron_t$  e  $MRR$ , respectivamente. Como pode ser observado nas três primeiras linhas da Tabela, quando esses pesos são iguais à unidade, obtêm-se os melhores resultados para as três saídas, ou seja, minimização de  $F_c$  na primeira linha, minimização de  $Ron_t$  na segunda linha e maximização de  $MRR$  na terceira linha. O  $F_c$  mais baixo é alcançado com  $v_c = 135,55$   $m/min$ ,  $f = 0,10$   $mm/v$ ,  $f_p = 10,92$   $mm$ , enquanto o  $Ron_t$  mais baixo é alcançado com  $v_c = 316,07$   $m/min$ ,  $f = 0,11$   $mm/v$  e  $f_p = 22,13$   $mm$ . O máximo  $MRR$  é obtido com os níveis  $v_c$  e  $f$  mais altos. Porém, ao minimizar  $F_c$ , com  $w_1 = 1$ , obtêm-se os piores resultados para  $Ron_t$  e  $MRR$ . Os pesos intermediários também são uma possibilidade para o tomador de decisão. Por exemplo, numa situação em que se deseja dar mais preferência ao erro geométrico, seguido da produtividade, pode-se escolher  $w_1 = 0$ ,  $w_2 = 2/3$  e  $w_3 = 1/3$ . Este cenário na Tabela resulta em  $Ron_t$  quase ótimo com a produtividade próxima de 80% do seu melhor resultado, porém com  $F_c$  próximo do pior resultado. Um cenário com  $w_i = 1/3$ ,  $\forall i = 1, 2, 3$ , também é fornecido para obter resultados intermediários para as

funções otimizadas.

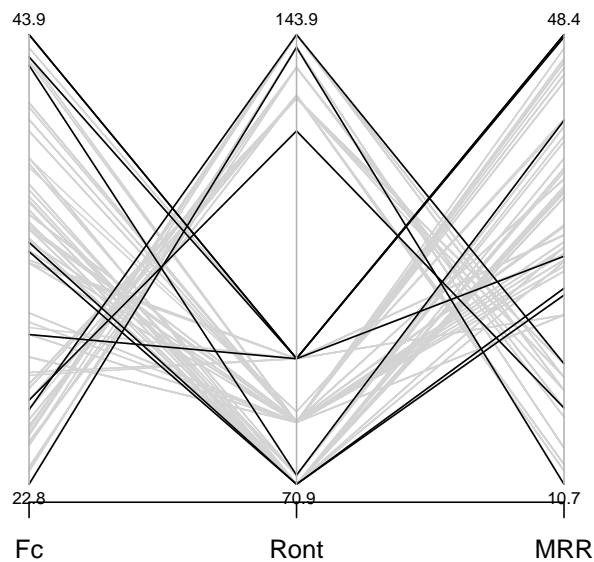
**Tabela 16 – Pseudopesos para  $F_c$  vs  $Ront$  vs  $MRR$**

| $w_1$ | $w_2$ | $w_3$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $v_c$  | $f$  | $f_p$ | $F_c$ | $Ront$ | $MRR$ |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|------|-------|-------|--------|-------|
| 1,00  | 0,00  | 0,00  | -1,34 | -0,67 | -0,51 | 135,55 | 0,10 | 10,92 | 22,81 | 141,86 | 10,66 |
| 0,00  | 1,00  | 0,00  | 0,77  | -0,44 | 0,89  | 316,07 | 0,11 | 22,13 | 34,14 | 70,91  | 27,11 |
| 0,00  | 0,00  | 1,00  | 1,14  | 1,23  | -0,07 | 347,25 | 0,17 | 14,46 | 43,88 | 91,33  | 48,40 |
| 0,67  | 0,33  | 0,00  | -0,39 | -0,67 | 1,21  | 216,94 | 0,10 | 24,65 | 26,75 | 128,28 | 17,07 |
| 0,67  | 0,00  | 0,33  | 0,16  | -0,67 | -0,44 | 264,12 | 0,10 | 11,51 | 26,30 | 143,92 | 20,78 |
| 0,33  | 0,67  | 0,00  | 0,77  | -0,50 | 1,28  | 315,89 | 0,10 | 25,22 | 33,71 | 70,91  | 26,53 |
| 0,33  | 0,00  | 0,67  | 1,15  | 1,21  | 0,22  | 347,68 | 0,17 | 16,78 | 42,84 | 91,33  | 48,19 |
| 0,00  | 0,67  | 0,33  | 1,60  | 0,21  | 0,46  | 386,31 | 0,13 | 18,68 | 42,44 | 72,39  | 41,21 |
| 0,00  | 0,33  | 0,67  | 1,14  | 1,23  | -0,07 | 347,25 | 0,17 | 14,46 | 43,88 | 91,33  | 48,40 |
| 0,33  | 0,33  | 0,33  | 1,51  | -0,67 | -0,25 | 378,78 | 0,10 | 13,00 | 29,83 | 91,29  | 29,80 |

Fonte: Próprio autor

O gráfico de coordenadas paralelas, que possibilita uma melhor visualização das soluções de Pareto ótimas, também foi plotado para a otimização  $F_c$  vs  $Ront$  vs  $MRR$ . As soluções identificadas por meio do pseudopeso foram destacadas em preto, conforme ilustrado na Figura 39.

**Figura 39 – Soluções de Pareto para otimização  $F_c$  vs  $Ront$  vs  $MRR$**



Fonte: Próprio autor

Através das otimizações de três objetivos, foram obtidas 160 soluções ótimas de

Pareto usando o método NSGA-II para a otimização dos modelos de XGB de  $Ra$ ,  $Ront$  e do modelo determinístico de  $MRR$  e, para a otimização dos modelos de XGB de  $F_c$ ,  $Ront$  e do modelo determinístico de  $MRR$ , no processo de torneamento interno de tubos de PEEK. Estas soluções permitem ao experimentador explorar diferentes cenários em relação às forças de corte, rugosidade média, erros geométricos e respostas de produtividade. A abordagem do pseudopeso ajuda a separar algumas soluções com alto *trade-off*. O experimentador deve selecionar os níveis de parâmetros ideais que melhor atendam ao cenário de produção planejado ou às especificações do componente necessário.

## 6 CONCLUSÕES

Este trabalho propôs uma otimização multiobjetivo evolutiva de modelos estatísticos de aprendizagem do processo de torneamento interno de tubos de PEEK. Os testes experimentais para o torneamento interno de tubos de PEEK foram conduzidos seguindo um planejamento composto central complementado com amostragem de Faure. Os parâmetros de entrada considerados foram o avanço, a velocidade de corte e a posição da fixação. As resposta de rugosidade média, força de corte e circularidade foram medidas. A principal conquista desta pesquisa foi a otimização multiobjetivo evolutiva de modelos de XGB do processo de torneamento interno de tubos de PEEK. Isto proporciona aos pesquisadores do processo de usinagem um novo fluxo de trabalho de modelagem e otimização para obter os melhores resultados em termos de previsão dos modelos e, conseqüentemente, qualidade das soluções ideais. Os principais resultados alcançados podem ser resumidos da seguinte forma:

- Para os modelos de RSM e GAM, o modelo reduzido apresentou menor AIC, mas os modelos completo e reduzido apresentaram desempenho semelhante na validação cruzada via  $k$ -dobras para todas as respostas. Os modelos reduzidos foram selecionados por simplicidade e considerando o AIC;
- Os modelos de BAG e RF apresentaram resultados semelhantes para todas as respostas. O modelo BAG foi selecionado pela simplicidade;
- Os níveis dos hiperparâmetros dos modelos SVR e XGB foram selecionados por validação cruzada  $k$ -dobras;
- O modelo XGB,  $\hat{f}^{xgb}$ , apresentou o melhor desempenho final para todas as respostas. Para  $R_a$  os resultados finais das métricas de previsão foram  $RMSE = 0,1395$ ,  $MAE = 0,1126$  e  $R^2 = 1,0000$ , para  $F_c$ ,  $RMSE = 1,8609$ ,  $MAE = 0,9311$  e  $R^2 = 0,9280$ , e para  $Ron_t$ ,  $RMSE = 21,3084$ ,  $MAE = 17,8053$  e  $R^2 = 0,6562$ ;
- O avanço foi o parâmetro mais importante na rugosidade, seguido pela velocidade de corte e posição de fixação. Para a força de corte, o avanço também foi o parâmetro mais importante, seguido pela posição de fixação e velocidade de corte. Para circularidade, a velocidade de corte foi a mais importante, seguida pelo avanço e posição de fixação;

- O NSGA-II obteve o melhor resultado para as otimizações tri-objetivos, considerando a métrica de hipervolume;
- As fronteiras de Pareto foram plotadas e abordagem do pseudopeso foi aplicada para escolher alguns cenários importantes considerando os pesos desejados que representam a preferência pelas respostas.
- Para otimização  $Ra$  vs  $Ront$  vs  $MRR$ , o equilíbrio entre as três respostas foi alcançado com  $v_c = 392,83 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,12 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 15,14 \text{ mm}$ .
- Para otimização  $F_c$  vs  $Ront$  vs  $MRR$ , o equilíbrio entre as três respostas foi alcançado com  $v_c = 378,78 \text{ m/min}$ ,  $f = 0,10 \text{ mm/v}$  e  $f_p = 13,00 \text{ mm}$ .

Métodos de aprendizado estatístico foram selecionados como abordagens para a modelagem. Os resultados numéricos limitam-se ao processo de torneamento interno quando se considera o PEEK com as mesmas propriedades, utilizando a mesma ferramenta de corte e condições de corte empregadas.

## 7 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

No presente estudo, métodos de aprendizado estatístico foram selecionados como abordagens para modelagem. Os resultados limitam-se ao processo de torneamento interno quando se considera o PEEK com as mesmas propriedades, utilizando a mesma ferramenta de corte e condições de corte empregadas. A abordagem proposta de modelagem e otimização pode ser aplicada a outros processos de fabricação. Outros modelos de áreas computacionais, como aprendizagem profunda, poderiam ser considerados em abordagens futuras. Outros resultados do torneamento interno, como os desvios de cilindricidade, poderiam ser medidos e considerados na modelagem e otimização. No caso de considerar mais resultados, a estrutura de correlação poderia ser levada em conta através de métodos de aprendizagem não supervisionados antes da modelagem.

## REFERÊNCIAS

- ABOLGHASEM, S.; MANCILLA-CUBIDES, N. Optimization of machining parameters for product quality and productivity in turning process of aluminum. **Ingeniería y Universidad**, v. 26, 2022.
- AGUIAR, H. C. G. de; HASSUI, A.; SUYAMA, D. I.; MAGRI, A. Reduction of internal turning surface roughness by using particle damping aided by airflow. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 106, n. 1, p. 125–131, 2020.
- AHMED, T.; MOLLICK, N.; MAHMUD, S.; AHMAD, T. Analysis of effects of machining parameters on cutting force components in turning aisi 201 stainless steel using cemented carbide cutting tool insert. **Materials Today: Proceedings**, Elsevier, v. 42, p. 832–837, 2021.
- AKAIKE, H. Information theory and an extension of the maximum likelihood principle. In: **Selected papers of hirotugu akaike**. Springer, 1998. p. 199–213.
- ALLEN, D. M. The relationship between variable selection and data agumentation and a method for prediction. **technometrics**, Taylor & Francis, v. 16, n. 1, p. 125–127, 1974.
- ALMEIDA, F.; GOMES, G. F.; PAULA, V.; CORREA, J. E.; PAIVA, A.; GOMES, J. d. F.; TURRIONI, J. B. et al. A weighted mean square error approach to the robust optimization of the surface roughness in an aisi 12114 free-machining steel-turning process. **Journal of Mechanical Engineering**, v. 64, n. 3, p. 147–156, 2018.
- ANAN, K.; ICHIKADO, K.; ISHIHARA, T.; SHINTANI, A.; KAWAMURA, K.; SUGA, M.; SAKAGAMI, T. A scoring system with high-resolution computed tomography to predict drug-associated acute respiratory distress syndrome: development and internal validation. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–9, 2019.
- ANDERSON, D.; BURNHAM, K. Model selection and multi-model inference. **Second. NY: Springer-Verlag**, v. 63, n. 2020, p. 10, 2004.
- ANDREN, L.; HÅKANSSON, L.; BRANDT, A.; CLAESSION, I. Identification of dynamic properties of boring bar vibrations in a continuous boring operation. **Mechanical systems and signal processing**, Elsevier, v. 18, n. 4, p. 869–901, 2004.
- ANKINAKATTE, S.; NORBERG, E.; LÖVENDAHL, P.; EDWARDS, D.; HØJSGAARD, S. Predicting mastitis in dairy cows using neural networks and generalized additive models: A comparison. **Computers and electronics in agriculture**, Elsevier, v. 99, p. 1–6, 2013.
- ARORA, R. Energy, exergy and exergoeconomic analyses and optimisation of 137 mw gas power station implementing mopsocd. **International Journal of Energy Technology and Policy**, Inderscience Publishers (IEL), v. 16, n. 4, p. 327–352, 2020.

- ASILTÜRK, İ.; KUNTOĞLU, M.; BINALI, R.; AKKUŞ, H.; SALUR, E. A comprehensive analysis of surface roughness, vibration, and acoustic emissions based on machine learning during hard turning of aisi 4140 steel. **Metals**, MDPI, v. 13, n. 2, p. 437, 2023.
- AUDET, C.; BIGEON, J.; CARTIER, D.; DIGABEL, S. L.; SALOMON, L. Performance indicators in multiobjective optimization. **European journal of operational research**, Elsevier, v. 292, n. 2, p. 397–422, 2021.
- AWAJA, F.; ZHANG, S. Self-bonding of peek for active medical implants applications. **Journal of Adhesion Science and Technology**, Taylor & Francis, v. 29, n. 15, p. 1593–1606, 2015.
- AZIZI, M. W.; BELHADI, S.; YALLESE, M. A.; MABROUKI, T.; RIGAL, J.-F. Surface roughness and cutting forces modeling for optimization of machining condition in finish hard turning of aisi 52100 steel. **Journal of mechanical science and technology**, Springer, v. 26, p. 4105–4114, 2012.
- BADEGHAI, W.; WAGIH, A.; SERAJ, M.; LUBINEAU, G. Nonmetallic composites aging in oil and gas application. **10.5075/epfl-298799\_978**, Composite Construction Laboratory (CCLab), Ecole Polytechnique Federale de . . . , 2022.
- BAI, Y.; SUN, Z.; ZENG, B.; LONG, J.; LI, L.; OLIVEIRA, J. V. de; LI, C. A comparison of dimension reduction techniques for support vector machine modeling of multi-parameter manufacturing quality prediction. **Journal of Intelligent Manufacturing**, Springer, v. 30, n. 5, p. 2245–2256, 2019.
- BARILE, C.; CASAVOLA, C.; CILLIS, F. D. Mechanical comparison of new composite materials for aerospace applications. **Composites Part B: Engineering**, Elsevier, v. 162, p. 122–128, 2019.
- BASOVICH, S.; AROGETI, S. Identification and robust control for regenerative chatter in internal turning with simultaneous compensation of machining error. **Mechanical Systems and Signal Processing**, Elsevier, v. 149, p. 107208, 2021.
- BELGIU, M.; DRĂGUȚ, L. Random forest in remote sensing: A review of applications and future directions. **ISPRS journal of photogrammetry and remote sensing**, Elsevier, v. 114, p. 24–31, 2016.
- BJERREGAARD, S. S. Exploring predictors of welfare dependency 1, 3, and 5 years after mental health-related absence in danish municipalities between 2010 and 2012 using flexible machine learning modelling. **BMC Public Health**, Springer, v. 23, n. 1, p. 224, 2023.
- BOCA, M.; NAGIT, G.; CIOATĂ, F. Aspects concerning the circularity and cylindricity deviation of a work piece processed by turning. In: EDP SCIENCES. **MATEC Web of Conferences**. 2017. v. 112, p. 01020.
- BORRA, S.; CIACCIO, A. D. Measuring the prediction error. a comparison of cross-validation, bootstrap and covariance penalty methods. **Computational statistics & data analysis**, Elsevier, v. 54, n. 12, p. 2976–2989, 2010.

- BOX, G.; WILSON, K. Series b (methodological). **Journal of the Royal Statistical Society**, JSTOR, v. 13, n. 1, p. 1–45, 1951.
- BOX, G. E.; DRAPER, N. R. **Empirical model-building and response surfaces**. John Wiley & Sons, 1987.
- BREIMAN, L. Bagging predictors. **Machine learning**, Springer, v. 24, n. 2, p. 123–140, 1996.
- BREIMAN, L. Random forests. **Machine learning**, Springer, v. 45, n. 1, p. 5–32, 2001.
- BREIMAN, L.; FRIEDMAN, J.; OLSHEN, R.; STONE, C. Classification and regression trees. wadsworth & brooks. **Cole Statistics/Probability Series**, 1984.
- BREIMAN, L.; SPECTOR, P. Submodel selection and evaluation in regression. the x-random case. **International statistical review/revue internationale de Statistique**, JSTOR, p. 291–319, 1992.
- BRINK, H.; RICHARDS, J.; FETHEROLF, M. **Real-world machine learning**. Simon and Schuster, 2016.
- BUSTILLO, A.; REIS, R.; MACHADO, A. R.; PIMENOV, D. Y. Improving the accuracy of machine-learning models with data from machine test repetitions. **Journal of Intelligent Manufacturing**, Springer, v. 33, n. 1, p. 203–221, 2022.
- CABRERA, F. M.; GARRIDO, I.; TEJERO, J.; GAITONDE, V.; KARNIK, S.; DAVIM, J. P. Surface roughness minimization in turning peek-cf30 composites with tin cutting tools using particle swarm optimization. In: TRANS TECH PUBL. **Materials Science Forum**. 2013. v. 766, p. 109–122.
- CALDONA, E. B.; DIZON, J. R. C.; VIERS, R. A.; GARCIA, V. J.; SMITH, Z. J.; ADVINCULA, R. C. Additively manufactured high-performance polymeric materials and their potential use in the oil and gas industry. **Mrs Communications**, Springer, v. 11, n. 6, p. 701–715, 2021.
- CATAPAN, M. F. Apostila de desenho mecânico 1 i parte. 2013.
- CHABBI, A.; YALLESE, M. A.; MEDDOUR, I.; NOUIOUA, M.; MABROUKI, T.; GIRARDIN, F. Predictive modeling and multi-response optimization of technological parameters in turning of polyoxymethylene polymer (pom c) using rsm and desirability function. **Measurement**, Elsevier, v. 95, p. 99–115, 2017.
- CHEN, M.; WANG, Z.; JIANG, S.; SUN, J.; WANG, L.; SAHOO, N.; GUNN, G. B.; FRANK, S. J.; XU, C.; CHEN, J. et al. Predictive performance of different ntcp techniques for radiation-induced esophagitis in nslc patients receiving proton radiotherapy. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group, v. 12, n. 1, p. 1–8, 2022.
- CHEN, T.; GUESTRIN, C. Xgboost: A scalable tree boosting system. In: **Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining**. 2016. p. 785–794.

CHEN, T.; HE, T.; BENESTY, M.; KHOTILOVICH, V.; TANG, Y.; CHO, H.; CHEN, K.; MITCHELL, R.; CANO, I.; ZHOU, T.; LI, M.; XIE, J.; LIN, M.; GENG, Y.; LI, Y.; YUAN, J. **xgboost: Extreme Gradient Boosting**. 2022. R package version 1.6.0.1. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=xgboost>.

CHEN, X.; YIN, X. **NlcOptim: Solve Nonlinear Optimization with Nonlinear Constraints**. 2019. R package version 0.6. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=NlcOptim>.

CHERKASSKY, V.; MULIER, F. M. **Learning from data: concepts, theory, and methods**. John Wiley & Sons, 2007.

CHOU, W.-K.; CHIEN, A.; WANG, J.-L. Biomechanical analysis between peek and titanium screw-rods spinal construct subjected to fatigue loading. **Clinical Spine Surgery**, LWW, v. 28, n. 3, p. E121–E125, 2015.

COELLO, C. C.; LECHUGA, M. S. Mopso: A proposal for multiple objective particle swarm optimization. In: IEEE. **Proceedings of the 2002 Congress on Evolutionary Computation. CEC'02 (Cat. No. 02TH8600)**. 2002. v. 2, p. 1051–1056.

COGSWELL, F. N. **Thermoplastic aromatic polymer composites: a study of the structure, processing and properties of carbon fibre reinforced polyetheretherketone and related materials**. Elsevier, 2013.

COPPINI, N. L.; DINIZ, A. E.; LACERDA, F. S.; BONANDI, M.; BAPTISTA, E. A. Internal turning of sintered carbide parts: tool wear and surface roughness evaluation. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 40, n. 4, p. 1–7, 2018.

COSTA, T. B. d.; PEREIRA, R. B. D.; LAURO, C. H.; BRANDÃO, L. C.; DAVIM, J. P. Statistical learning and optimization of the helical milling of the biocompatible titanium ti-6al-7nb alloy. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 125, n. 3-4, p. 1789–1813, 2023.

CRARY, S. B. Design of computer experiments for metamodel generation. **Analog Integrated Circuits and Signal Processing**, Springer, v. 32, n. 1, p. 7–16, 2002.

DAI, D.; YUAN, F.; LONG, R.; LIU, Z.; LIU, W. Performance analysis and multi-objective optimization of a stirling engine based on mopsocd. **International Journal of Thermal Sciences**, Elsevier, v. 124, p. 399–406, 2018.

DAS, S.; TESFAMARIAM, S. State-of-the-art review of design of experiments for physics-informed deep learning. **arXiv preprint arXiv:2202.06416**, 2022.

DAVIM, J. P.; MATA, F. Chemical vapour deposition (cvd) diamond coated tools performance in machining of peek composites. **Materials & design**, Elsevier, v. 29, n. 8, p. 1568–1574, 2008.

DEB, K. **Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms**. John Wiley & Sons, 2001.

DEB, K. Multi-objective evolutionary algorithms. In: **Springer handbook of computational intelligence**. Springer, 2015. p. 995–1015.

DEB, K.; PRATAP, A.; AGARWAL, S.; MEYARIVAN, T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. **Trans. Evol. Comp**, v. 6, n. 2, p. 182–197, 2002. ISSN 1089-778X.

DEB, K.; PRATAP, A.; AGARWAL, S.; MEYARIVAN, T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. **IEEE transactions on evolutionary computation**, IEEE, v. 6, n. 2, p. 182–197, 2002.

DHAR, A. R.; GUPTA, D.; ROY, S. S.; LOHAR, A. K.; MANDAL, N. Covariance matrix adapted grey wolf optimizer tuned extreme gradient boost for bi-directional modelling of direct metal deposition process. **Expert Systems with Applications**, Elsevier, v. 199, p. 116971, 2022.

DIKSHIT, M. K.; SINGH, S.; PATHAK, V. K.; SAXENA, K. K.; AGRAWAL, M. K.; MALIK, V.; SALEM, K. hazim; KHAN, M. I. Surface characteristics optimization of biocompatible ti6al4v with rccd and nsga ii using die sinking edm. **Journal of Materials Research and Technology**, Elsevier, v. 24, p. 223–235, 2023.

DINIZ, A. E.; SILVA, W. T. A. da; SUYAMA, D. I.; PEDERIVA, R.; ALBUQUERQUE, M. V. Evaluating the use of a new type of impact damper for internal turning tool bar in deep holes. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 101, n. 5, p. 1375–1390, 2019.

DRUCKER, H.; BURGESS, C. J.; KAUFMAN, L.; SMOLA, A.; VAPNIK, V. Support vector regression machines. **Advances in neural information processing systems**, v. 9, 1996.

EBERHART, R. C.; SHI, Y. **Computational intelligence: concepts to implementations**. Elsevier, 2011.

EFRON, B. **The jackknife, the bootstrap and other resampling plans**. Philadelphia: SIAM, 1982.

ENSINGER. **TECAPEEK natural**. 2022. Disponível em: <https://www.ensingerplastics.com/pt-br/semiacabados/produtos/peek-tecapeek-natural>. Acesso em: 01 de fevereiro 2022.

FALLAH, M.; MOETAKEF-IMANI, B. Design, analysis, and implementation of a new adaptive chatter control system in internal turning. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 104, n. 5, p. 1637–1659, 2019.

FANG, L.; CHEN, Q.; HUO, S.; YAO, R.; YU, J. Modification of poly ether ether ketone and its application. **Synthetic Materials Aging and Application**, v. 2019, n. 2, 2019.

FASIOLO, M.; NEDELLEC, R.; GOUDE, Y.; WOOD, S. N. Scalable visualization methods for modern generalized additive models. **Journal of computational and Graphical Statistics**, Taylor & Francis, v. 29, n. 1, p. 78–86, 2020.

FAURE, H. Discrépance de suites associées à un système de numération (en dimension  $s$ ). **Acta arithmetica**, v. 41, n. 4, p. 337–351, 1982.

FRIEDMAN, J.; HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R. **The elements of statistical learning. Springer series in statistics new**. York NY, USA, 2001.

- FRIEDMAN, J. H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine. **Annals of statistics**, JSTOR, p. 1189–1232, 2001.
- FU, R.; JIA, Z.; WANG, F.; JIN, Y.; SUN, D.; YANG, L.; CHENG, D. Drill-exit temperature characteristics in drilling of ud and md cfrp composites based on infrared thermography. **International Journal of Machine Tools and Manufacture**, Elsevier, v. 135, p. 24–37, 2018.
- GADELMAWLA, E.; KOURA, M. M.; MAKSOUD, T. M.; ELEWA, I. M.; SOLIMAN, H. Roughness parameters. **Journal of materials processing Technology**, Elsevier, v. 123, n. 1, p. 133–145, 2002.
- GEISSER, S. The predictive sample reuse method with applications. **Journal of the American statistical Association**, Taylor & Francis, v. 70, n. 350, p. 320–328, 1975.
- GHORBANI, S.; ROGOV, V.; CARLUCCIO, A.; BELOV, P. The effect of composite boring bars on vibration in machining process. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 105, n. 1, p. 1157–1174, 2019.
- GLATT, M.; HOTZ, H.; KÖLSCH, P.; MUKHERJEE, A.; KIRSCH, B.; AURICH, J. C. Predicting the martensite content of metastable austenitic steels after cryogenic turning using machine learning. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 115, p. 749–757, 2021.
- GUO, Y.; DONG, H.; WANG, G.; KE, Y. Vibration analysis and suppression in robotic boring process. **International Journal of Machine Tools and Manufacture**, Elsevier, v. 101, p. 102–110, 2016.
- GUPTA, M.; KUMAR, S. Investigation of surface roughness and mrr for turning of ud-gfrp using pca and taguchi method. **Engineering Science and Technology, an International Journal**, Elsevier, v. 18, n. 1, p. 70–81, 2015.
- HAN, X.; LIU, Z.; WANG, T. Investigation of tool wear in pull boring of pure niobium tubes. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 41, n. 1, p. 1–11, 2019.
- HANAFI, I.; ABDELLATIF, K.; CABRERA, F. M. Evolutionary computation in combinatorial of machining parameters of reinforced peek composites using nsga-ii. **Advanced Materials Research**, Trans Tech Publ, v. 875, p. 652–656, 2014.
- HANAFI, I.; CABRERA, F. M.; KHAMLIHI, A.; GARRIDO, I.; MANZANARES, J. T. Artificial neural networks back propagation algorithm for cutting force components predictions. **Mechanics & Industry**, EDP Sciences, v. 14, n. 6, p. 431–439, 2013.
- HANAFI, I.; KHAMLIHI, A.; CABRERA, F. M.; LÓPEZ, P. J. N. Prediction of surface roughness in turning of peek cf30 by using an artificial neural network. **Journal of the Chinese Institute of Industrial Engineers**, Taylor & Francis, v. 29, n. 5, p. 337–347, 2012.
- HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. H. **The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction**. Springer, 2009.

HAY, J.; KEMMISH, D. Thermal decomposition of poly (aryl ether ketones). **Polymer**, Elsevier, v. 28, n. 12, p. 2047–2051, 1987.

HOBSON, T. **Exploring roundness, a fundamental guide to the measurement of cylindrical form**. Leicester, LE4 9JQ, England, 2011.

HOSSEINI, S. A.; AMJADY, N.; SHAFIE-KHAH, M.; CATALAO, J. P. A new multi-objective solution approach to solve transmission congestion management problem of energy markets. **Applied Energy**, Elsevier, v. 165, p. 462–471, 2016.

HUI, Y.; MEI, X.; JIANG, G.; ZHAO, F.; MA, Z.; TAO, T. Assembly quality evaluation for linear axis of machine tool using data-driven modeling approach. **Journal of Intelligent Manufacturing**, Springer, p. 1–17, 2020.

JAMES, G.; WITTEN, D.; HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R. **An introduction to statistical learning**. Springer, 2013.

JAMES, G.; WITTEN, D.; HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R. Statistical learning. In: **An introduction to statistical learning**. Springer, 2021. p. 15–57.

JASSIM, M. A.; ABD, D. H.; OMRI, M. N. Machine learning-based new approach to films review. **Social Network Analysis and Mining**, Springer, v. 13, n. 1, p. 40, 2023.

JAYANTHI, K.; MAHESH, C. Study on machine learning methods and applications in genetics and genomics. **International Journal of Engineering and Technology (UAE)**, v. 7, n. 1.7, p. 201–204, 2018.

JOGI, B. F.; TAREKAR, M.; DHAJEKAR, R. M.; PAWADE, R. Multi objective optimization using taguchi grey relational analysis (gra) for cnc turning of poly-ether-ether-ketone (peek) polymer. **Polymers and Polymer Composites**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 24, n. 7, p. 523–528, 2016.

JOHANSSON, P.; BARKARMO, S.; HAWTHAN, M.; PERUZZI, N.; KJELLIN, P.; WENNERBERG, A. Biomechanical, histological, and computed x-ray tomographic analyses of hydroxyapatite coated peek implants in an extended healing model in rabbit. **Journal of biomedical materials research Part A**, Wiley Online Library, v. 106, n. 5, p. 1440–1447, 2018.

JOHN, S. S.; ALBERTS, M.; KARANDIKAR, J.; COBLE, J.; JARED, B.; SCHMITZ, T.; RAMSAUER, C.; LEITNER, D.; KHOJANDI, A. Predicting chatter using machine learning and acoustic signals from low-cost microphones. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 125, n. 11-12, p. 5503–5518, 2023.

JOZIĆ, S.; BAJIĆ, D.; CELENT, L. Application of compressed cold air cooling: achieving multiple performance characteristics in end milling process. **Journal of Cleaner Production**, Elsevier, v. 100, p. 325–332, 2015.

KALYANMOY, D. A fast elitist nondominated sorting genetic algorithm for multiobjective optimization: Nsga-ii. In: **Parallel Problem Solving from Nature VI Conference, 2000**. 2000.

- KARATAŞ, M. A.; GÖKKAYA, H. A review on machinability of carbon fiber reinforced polymer (cfrp) and glass fiber reinforced polymer (gfrp) composite materials. **Defence Technology**, Elsevier, v. 14, n. 4, p. 318–326, 2018.
- KARNIK, S.; GAITONDE, V.; RUBIO, J. C.; CORREIA, A. E.; ABRÃO, A.; DAVIM, J. P. Delamination analysis in high speed drilling of carbon fiber reinforced plastics (cfrp) using artificial neural network model. **Materials & Design**, Elsevier, v. 29, n. 9, p. 1768–1776, 2008.
- KASSAMBARA, A. **ggpubr: 'ggplot2' Based Publication Ready Plots**. 2020. R package version 0.4.0. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=ggpubr>.
- KELSEY, D. J.; SPRINGER, G. S.; GOODMAN, S. B. Composite implant for bone replacement. **Journal of composite materials**, Sage Publications Sage CA: Thousand Oaks, CA, v. 31, n. 16, p. 1593–1632, 1997.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. Particle swarm optimization. In: IEEE. **Proceedings of ICNN'95-international conference on neural networks**. 1995. v. 4, p. 1942–1948.
- KIENZLE, O. Die bestimmung von kräften und leistungen an spanenden werkzeugen und werkzeugmaschinen. **VDI-Z**, v. 94, n. 11, p. 299–305, 1952.
- KIM, J.-H. Estimating classification error rate: Repeated cross-validation, repeated hold-out and bootstrap. **Computational statistics & data analysis**, Elsevier, v. 53, n. 11, p. 3735–3745, 2009.
- KISHOR, B.; CHAUDHARI, G.; NATH, S. Slurry erosion of thermo-mechanically processed 13cr4ni stainless steel. **Tribology International**, Elsevier, v. 93, p. 50–57, 2016.
- KOVALČÍK, J.; MAŠEK, P.; ZEMAN, P. Cutting force modelling in orthogonal turning of c/peek and c/pa12. **MM Science Journal**, MM Science Journal, 2022.
- KUHN, M. **caret: Classification and Regression Training**. 2022. R package version 6.0-91. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=caret>.
- KURTZ, S. M.; DEVINE, J. N. Peek biomaterials in trauma, orthopedic, and spinal implants. **Biomaterials**, Elsevier, v. 28, n. 32, p. 4845–4869, 2007.
- KUSTER, F.; GYGAX, P. Cutting dynamics and stability of boring bars. **CIRP annals**, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 361–366, 1990.
- LAU, M.; KRESS, S.; SCHIKOWSKI, T.; SCHWENDER, H. Efficient gene–environment interaction testing through bootstrap aggregating. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group UK London, v. 13, n. 1, p. 937, 2023.
- LAWAL, S.; NDALIMAN, M.; BALA, K.; LAWAL, S. 1.2 effect of cutting variables on boring process: A review. **Comprehensive Materials Finishing**, Elsevier, p. 26, 2016.
- LI, C.; ALIKE, Y.; HOU, J.; LONG, Y.; ZHENG, Z.; MENG, K.; YANG, R. Machine learning model successfully identifies important clinical features for predicting outpatients with rotator cuff tears. **Knee Surgery, Sports Traumatology, Arthroscopy**, Springer, p. 1–9, 2023.

- LI, C. S.; VANNABOUATHONG, C.; SPRAGUE, S.; BHANDARI, M. The use of carbon-fiber-reinforced (cfr) peek material in orthopedic implants: a systematic review. **Clinical Medicine Insights: Arthritis and Musculoskeletal Disorders**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 8, p. CMAMD-S20354, 2015.
- LIAW, A.; WIENER, M. Classification and regression by randomforest. **R News**, v. 2, n. 3, p. 18–22, 2002. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/doc/Rnews/>.
- LIU, X.; LIU, Q.; WU, S.; LIU, L.; GAO, H. Research on the performance of damping boring bar with a variable stiffness dynamic vibration absorber. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 89, n. 9, p. 2893–2906, 2017.
- MAALAWI, K.; ABOUEL-FOTOUH, A.; BAYOUMI, M. E.; YEHA, K. A. Design of composite pipes conveying fluid for improved stability characteristics. **International Journal of Applied Engineering Research**, v. 11, n. 12, p. 7633–7639, 2016.
- MAGAND, C.; DUCHARNE, A.; MOINE, N. L.; GASCOIN, S. Introducing hysteresis in snow depletion curves to improve the water budget of a land surface model in an alpine catchment. **Journal of hydrometeorology**, v. 15, n. 2, p. 631–649, 2014.
- MAGRI, A. E.; VANAEI, S.; VAUDREUIL, S. An overview on the influence of process parameters through the characteristic of 3d-printed peek and pei parts. **High Performance Polymers**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 33, n. 8, p. 862–880, 2021.
- MAGRI, A. E.; VAUDREUIL, S. Effects of physical and chemical ageing on 3d printed poly (ether ether ketone)/poly (ether imide)[peek/pei] blend for aerospace applications. **Journal of Materials Science**, Springer, v. 58, n. 3, p. 1465–1479, 2023.
- MARTÍNEZ, M.; GARCÍA-NIETO, S.; SANCHIS, J.; BLASCO, X. Genetic algorithms optimization for normalized normal constraint method under pareto construction. **Advances in engineering software**, Elsevier, v. 40, n. 4, p. 260–267, 2009.
- MARTINS, E. Coeficiente de determinação. **Revista Ciência Elementar**, v. 6, n. 1, p. 24, 2018.
- MASEK, P.; ZEMAN, P.; KOLAR, P. Cutting temperature measurement in turning of thermoplastic composites using a tool-work thermocouple. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 116, p. 3163–3178, 2021.
- MATA, F.; GAITONDE, V.; KARNIK, S.; DAVIM, J. P. Influence of cutting conditions on machinability aspects of peek, peek cf 30 and peek gf 30 composites using pcd tools. **Journal of materials processing technology**, Elsevier, v. 209, n. 4, p. 1980–1987, 2009.
- MATA, F.; ÖZEL, E.; ÖTEYAKA, M. Ö. Performance analysis of unreinforced and reinforced polyetheretherketone with carbon/glass using polycrystalline diamond and k15 tools. **Journal of Thermoplastic Composite Materials**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 28, n. 7, p. 915–929, 2015.

MAZID, A. M.; IMAM, T.; AHSAN, K. B.; KHANDOKER, N. Characterising surface roughness of ti-6al-4v alloy machined using coated and uncoated carbide tools with variable nose radius by machine learning. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, Elsevier, v. 124, p. 106546, 2023.

MAZUMDAR, S. **Composites manufacturing: materials, product, and process engineering**. CrC press, 2001.

MEHRPOUR, O.; SAEEDI, F.; NAKHAEI, S.; KHOMEINI, F. T.; HADIANFAR, A.; AMIRABADIZADEH, A.; HOYTE, C. Comparison of decision tree with common machine learning models for prediction of biguanide and sulfonylurea poisoning in the united states: an analysis of the national poison data system. **BMC medical informatics and decision making**, BioMed Central, v. 23, n. 1, p. 1–11, 2023.

MELO, S. A. de; PEREIRA, R. B. D.; REIS, A. F. da S.; LAURO, C. H.; BRANDÃO, L. C. Multi-objective evolutionary optimization of unsupervised latent variables of turning process. **Applied Soft Computing**, Elsevier, v. 120, p. 108713, 2022.

MERSMANN, O. **mco: Multiple Criteria Optimization Algorithms and Related Functions**. 2020. R package version 1.15.6. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=mco>.

MEYER, D.; DIMITRIADOU, E.; HORNIK, K.; WEINGESSEL, A.; LEISCH, F. **e1071: Misc Functions of the Department of Statistics, Probability Theory Group (Formerly: E1071), TU Wien**. 2021. R package version 1.7-9. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=e1071>.

MIA, M.; DEY, P. R.; HOSSAIN, M. S.; ARAFAT, M. T.; ASADUZZAMAN, M.; ULLAH, M. S.; ZOBAER, S. T. Taguchi s/n based optimization of machining parameters for surface roughness, tool wear and material removal rate in hard turning under mql cutting condition. **Measurement**, Elsevier, v. 122, p. 380–391, 2018.

MIGUEL, P. A. C.; FLEURY, A.; MELLO, C. H. P.; NAKANO, D. N.; TURRIONI, J.; HO, L. Metodologia de pesquisa em engenharia de produção e gestão de operações. **Rio de Janeiro: Elsevier**, 2010.

MIKOLAJCZYK, T. Modeling of minimal thickness cutting layer influence on surface roughness in turning. In: TRANS TECH PUBL. **Applied Mechanics and Materials**. 2014. v. 656, p. 262–269.

MOINE, N. L.; HENDRICKX, F.; GAILHARD, J.; GARÇON, R.; GOTTARDI, F. Hydrologically aided interpolation of daily precipitation and temperature fields in a mesoscale alpine catchment. **Journal of hydrometeorology**, American Meteorological Society, v. 16, n. 6, p. 2595–2618, 2015.

MONTEIL, C.; HENDRICKX, F.; SAMIE, R.; SAUQUET, E. Modeling a complex system of multipurpose reservoirs under prospective scenarios (hydrology, water uses, water management): the case of the durance river basin (south eastern france, 12 800 km<sup>2</sup>). In: **EGU General Assembly Conference Abstracts**. 2015. p. 4121.

- MONTEIL, C.; ZAOUI, F.; Le Moine, N.; HENDRICKX, F. Multi-objective calibration by combination of stochastic and gradient-like parameter generation rules – the caRamel algorithm. **Hydrology and Earth System Sciences**, v. 24, p. 3189–3209, 2020.
- MONTEIL, C.; ZAOUI, F.; MOINE, N. L.; HENDRICKX, F. Multi-objective calibration by combination of stochastic and gradient-like parameter generation rules—the caramel algorithm. **Hydrology and Earth System Sciences**, Copernicus GmbH, v. 24, n. 6, p. 3189–3209, 2020.
- MONTGOMERY, D. C. Design and analysis of experiments, eight edition. **John Wiley and Sons**, 2013.
- MUFARRIH, A.; ISTIQLALIYAH, H.; ILHA, M. Optimization of roundness, mrr and surface roughness on turning process using taguchi-gra. In: IOP PUBLISHING. **Journal of Physics: Conference Series**. 2019. v. 1179, n. 1, p. 012099.
- MULUGETA, G.; ZEWOTIR, T.; TEGEGNE, A. S.; JUHAR, L. H.; MULETA, M. B. Classification of imbalanced data using machine learning algorithms to predict the risk of renal graft failures in ethiopia. **BMC Medical Informatics and Decision Making**, BioMed Central, v. 23, n. 1, p. 1–17, 2023.
- MUNAWAR, M.; CHEN, J. C.-S.; MUFTI, N. A. Investigation of cutting parameters effect for minimization of surface roughness in internal turning. **International journal of precision engineering and manufacturing**, Springer, v. 12, n. 1, p. 121–127, 2011.
- MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments**. John Wiley & Sons, 2016.
- NATARAJAN, E.; KAVIARASAN, V.; ANG, K. M.; LIM, W. H.; ELANGO, S.; TIANG, S. S. Production wastage avoidance using modified multi-objective teaching learning based optimization embedded with refined learning scheme. **IEEE Access**, IEEE, v. 10, p. 19186–19214, 2022.
- NGUYEN, V.; MELKOTE, S.; DESHAMUDRE, A.; KHANNA, M. PvdF sensor based on-line mode coupling chatter detection in the boring process. **Manufacturing letters**, Elsevier, v. 16, p. 40–43, 2018.
- NGUYEN, V.-H.; LE, T.-T.; TRUONG, H.-S.; LE, M. V.; NGO, V.-L.; NGUYEN, A. T.; NGUYEN, H. Q. Applying bayesian optimization for machine learning models in predicting the surface roughness in single-point diamond turning polycarbonate. **Mathematical Problems in Engineering**, Hindawi Limited, v. 2021, p. 1–16, 2021.
- NOGUCHI, K.; SAITO, I.; NAMIKI, T.; YOSHIMURA, Y.; NAKAGUCHI, T. Reliability of non-contact tongue diagnosis for sjögren’s syndrome using machine learning method. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group UK London, v. 13, n. 1, p. 1334, 2023.
- OLVERA, D.; LACALLE, L. L. D.; COMPEÁN, F.; FZ-VALDIVIELSO, A.; LAMIKIZ, A.; CAMPA, F. Analysis of the tool tip radial stiffness of turn-milling centers. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 60, p. 883–891, 2012.

ÖSTLING, D.; JENSEN, T.; TJOMSLAND, M.; STANDAL, O.; MUGAAS, T. Cutting process monitoring with an instrumented boring bar measuring cutting force and vibration. **Procedia CIRP**, Elsevier, v. 77, p. 235–238, 2018.

ÖZDEN, G.; ÖTEYAKA, M. Ö.; CABRERA, F. M. Modeling of cutting parameters in turning of peek composite using artificial neural networks and adaptive-neural fuzzy inference systems. **Journal of Thermoplastic Composite Materials**, SAGE Publications Sage UK: London, England, p. 08927057211013070, 2021.

ÖZDEN, G.; ÖTEYAKA, M. Ö.; CABRERA, F. M. Modeling of cutting parameters in turning of peek composite using artificial neural networks and adaptive-neural fuzzy inference systems. **Journal of Thermoplastic Composite Materials**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 36, n. 2, p. 493–509, 2023.

PANCHAGNULA, K. K.; PALANIYANDI, K. Drilling on fiber reinforced polymer/nanopolymer composite laminates: a review. **Journal of materials research and technology**, Elsevier, v. 7, n. 2, p. 180–189, 2018.

PARK, Y.; PAVLOU, P. A.; SARAF, N. Configurations for achieving organizational ambidexterity with digitization. **Information Systems Research**, INFORMS, v. 31, n. 4, p. 1376–1397, 2020.

PAUL, P. S.; LAWRENCE, G.; YADAV, R. K.; MOHANKRISHNAN, N. V.; NAIR, N.; VASANTH, X. A. Analysis of dynamic characteristics of boring tool holder. **Procedia Materials Science**, Elsevier, v. 5, p. 2283–2292, 2014.

PEREIRA, R. B. D. Otimização robusta multi-objetivo do processo de fresamento helicoidal do aço aisi h13 endurecido pelo método da restrição normal. 2017.

PEREIRA, R. B. D.; LEITE, R. R.; ALVIM, A. C.; PAIVA, A. P. de; FERREIRA, J. R.; DAVIM, J. P. Multi-objective robust optimization of the sustainable helical milling process of the aluminum alloy al 7075 using the augmented-enhanced normalized normal constraint method. **Journal of cleaner production**, Elsevier, v. 152, p. 474–496, 2017.

PEREIRA, R. B. D.; LEITE, R. R.; ALVIM, A. C.; PAIVA, A. P. de; BALESTRASSI, P. P.; FERREIRA, J. R.; DAVIM, J. P. Multivariate robust modeling and optimization of cutting forces of the helical milling process of the aluminum alloy al 7075. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 95, p. 2691–2715, 2018.

PRASAD, P. K.; DUBEY, V.; SHARMA, A. K. Surface roughness prediction of aisi 304 steel in nanofluid assisted turning using machine learning technique. **Key Engineering Materials**, Trans Tech Publ, v. 933, p. 13–24, 2022.

PRODANOV, C. C.; FREITAS, E. C. D. **Metodologia do trabalho científico: métodos e técnicas da pesquisa e do trabalho acadêmico-2ª Edição**. Editora Feevale, 2013.

QIAO, J.; LI, F.; YANG, S.; YANG, C.; LI, W.; GU, K. An adaptive hybrid evolutionary immune multi-objective algorithm based on uniform distribution selection. **Information Sciences**, Elsevier, v. 512, p. 446–470, 2020.

R Core Team. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. Vienna, Austria, 2022. Disponível em: <https://www.R-project.org/>.

RAMESH, K.; BARANITHARAN, P.; SAKTHIVEL, R. Investigation of the stability on boring tool attached with double impact dampers using taguchi based grey analysis and cutting tool temperature investigation through fluke-thermal imager. **Measurement**, Elsevier, v. 131, p. 143–155, 2019.

RAQUEL, C. R.; JR, P. C. N. An effective use of crowding distance in multiobjective particle swarm optimization. In: **Proceedings of the 7th Annual conference on Genetic and Evolutionary Computation**. 2005. p. 257–264.

RAUT, J. R.; SCHÖTTKER, B.; HOLLECZEK, B.; GUO, F.; BHARDWAJ, M.; MIAH, K.; SCHROTZ-KING, P.; BRENNER, H. A microrna panel compared to environmental and polygenic scores for colorectal cancer risk prediction. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 12, n. 1, p. 1–9, 2021.

RICHARDS, R.; CHALOUPKA, M.; STRAUSS, D.; TOMLINSON, R. Using generalized additive modelling to understand the drivers of long-term nutrient dynamics in the broadwater estuary (a subtropical estuary), gold coast, australia. **Journal of Coastal Research**, The Coastal Education and Research Foundation, v. 30, n. 6, p. 1321–1329, 2014.

RIVARD, C.-H.; RHALMI, S.; COILLARD, C. In vivo biocompatibility testing of peek polymer for a spinal implant system: a study in rabbits. **Journal of Biomedical Materials Research: An Official Journal of The Society for Biomaterials, The Japanese Society for Biomaterials, and The Australian Society for Biomaterials and the Korean Society for Biomaterials**, Wiley Online Library, v. 62, n. 4, p. 488–498, 2002.

RIZZI, M.; FURTADO, J. C.; COSTA, A. B. d.; GERBASE, A. E.; FERRÃO, M. F. Método do enxame de partículas para otimização de modelos de regressão multivariada empregados na determinação de biodiesel em blendas biodiesel/óleo vegetal/diesel. **Revista Virtual de Química. Niterói, RJ. Vol. 8, n. 6 (2016), p. 1877-1892**, 2016.

ROBSON, B. J.; DOURDET, V. Incorporating a generalised additive model of river nutrient concentrations into a mechanistic receiving water model. Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand, 2013.

ROTHFUSS, Y.; BRAUD, I.; MOINE, N. L.; BIRON, P.; DURAND, J.-L.; VAUCLIN, M.; BARIAC, T. Factors controlling the isotopic partitioning between soil evaporation and plant transpiration: Assessment using a multi-objective calibration of sipat-isotope under controlled conditions. **Journal of hydrology**, Elsevier, v. 442, p. 75–88, 2012.

SAATÇI, E.; YAPAN, Y. F.; UYSAL, M. U.; UYSAL, A. Orthogonal turning of aisi 310s austenitic stainless steel under hybrid nanofluid-assisted mql and a sustainability optimization using nsga-ii and topsis. **Sustainable Materials and Technologies**, Elsevier, v. 36, p. e00628, 2023.

SAHA, S.; ZAMAN, P. B.; TUSAR, M.; HASAN, I.; DHAR, N. R. Multi-objective genetic algorithm (moga) based optimization of high-pressure coolant assisted hard turning of

- 42crmo4 steel. **International Journal on Interactive Design and Manufacturing (IJIDeM)**, Springer, p. 1–20, 2022.
- SANDOVAL, C.; CUATE, O.; GONZÁLEZ, L. C.; TRUJILLO, L.; SCHÜTZE, O. Towards fast approximations for the hypervolume indicator for multi-objective optimization problems by genetic programming. **Applied Soft Computing**, Elsevier, v. 125, p. 109103, 2022.
- SANDVIK, C. Manual de treinamento: Tecnologia em usinagem. **C-2920**, v. 40, 2017.
- SEN, T.; SAHA, S.; EKBAL, A.; LAHA, A. K. Bi-objective portfolio optimization using archive multi-objective simulated annealing. In: **IEEE. 2014 International Conference on High Performance Computing and Applications (ICHPCA)**. 2014. p. 1–6.
- SHEKAR, R. I.; KOTRESH, T.; RAO, P. D.; KUMAR, K. Properties of high modulus peek yarns for aerospace applications. **Journal of applied polymer science**, Wiley Online Library, v. 112, n. 4, p. 2497–2510, 2009.
- SINGH, G.; MANN, G. S.; PRADHAN, S. Improving the surface roughness and flank wear of the boring process using particle damped boring bars. **Materials Today: Proceedings**, Elsevier, v. 5, n. 14, p. 28186–28194, 2018.
- SMALL, G. Outstanding physical properties make peek ideal for sealing applications. **Sealing Technology**, Elsevier, v. 2014, n. 4, p. 9–12, 2014.
- SMOLA, A. J.; SCHÖLKOPF, B. A tutorial on support vector regression. **Statistics and computing**, Springer, v. 14, n. 3, p. 199–222, 2004.
- SOETAERT, K. **plot3D: Plotting Multi-Dimensional Data**. 2021. R package version 1.4. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=plot3D>.
- SONG, Q.; SHI, J.; LIU, Z.; WAN, Y.; XIA, F. Boring bar with constrained layer damper for improving process stability. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 83, n. 9, p. 1951–1966, 2016.
- SØRBY, K.; ØSTLING, D. Precision turning with instrumented vibration-damped boring bars. **Procedia Cirp**, Elsevier, v. 77, p. 666–669, 2018.
- SØRBY, K.; SUNDSETH, E. High-accuracy turning with slender boring bars. **Advances in Manufacturing**, Springer, v. 3, n. 2, p. 105–110, 2015.
- SORTINO, M.; TOTIS, G.; PROSPERI, F. Development of a practical model for selection of stable tooling system configurations in internal turning. **International Journal of Machine Tools and Manufacture**, Elsevier, v. 61, p. 58–70, 2012.
- SOUZA, A. J. d. Processos de fabricação por usinagem. **Universidade Federal do Rio Grande**, 2011.
- SREEJITH, P.; KRISHNAMURTHY, R.; MALHOTRA, S.; NARAYANASAMY, K. Evaluation of pcd tool performance during machining of carbon/phenolic ablative composites. **Journal of Materials Processing Technology**, Elsevier, v. 104, n. 1–2, p. 53–58, 2000.

SRINIVAS, N.; DEB, K. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms. **Evolutionary computation**, MIT Press, v. 2, n. 3, p. 221–248, 1994.

STEINBERG, E. L.; RATH, E.; SHLAIFER, A.; CHECHIK, O.; MAMAN, E.; SALAI, M. Carbon fiber reinforced peek optima—a composite material biomechanical properties and wear/debris characteristics of cf-peek composites for orthopedic trauma implants. **Journal of the mechanical behavior of biomedical materials**, Elsevier, v. 17, p. 221–228, 2013.

STEYERBERG, E. **Clinical Prediction Models: A Practical Approach to Development, Validation, and Updating**. Springer International Publishing, 2019. (Statistics for Biology and Health). ISBN 9783030163983.

STONE, M. Cross-validatory choice and assessment of statistical predictions. **Journal of the royal statistical society: Series B (Methodological)**, Wiley Online Library, v. 36, n. 2, p. 111–133, 1974.

SURYA, M. S.; PRASANTHI, G.; KUMAR, A. K.; SRIDHAR, V.; GUGULOTHU, S. Optimization of cutting parameters while turning ti-6al-4 v using response surface methodology and machine learning technique. **International Journal on Interactive Design and Manufacturing (IJIDeM)**, Springer, v. 15, p. 453–462, 2021.

SUYAMA, D.; DINIZ, A.; PEDERIVA, R. Tool vibration in internal turning of hardened steel using cbn tool. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 88, n. 9, p. 2485–2495, 2017.

SUYAMA, D. I.; DINIZ, A. E.; PEDERIVA, R. The use of carbide and particle-damped bars to increase tool overhang in the internal turning of hardened steel. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 86, n. 5, p. 2083–2092, 2016.

TADDY, M. **Business data science: Combining machine learning and economics to optimize, automate, and accelerate business decisions**. McGraw-Hill Education, 2019.

TAPOGLOU, N.; MAKRIS, C. Co2-assisted machining of biocompatible polymer materials. **Procedia Manufacturing**, Elsevier, v. 51, p. 801–805, 2020.

TÉCNICAS, A. B. de N. **ABNT NBR ISO 4287: 2002. Especificações geométricas do produto (GPS)-Rugosidade: método do perfil—Termos, definições e parâmetros de rugosidade**. ABNT Rio de Janeiro, 2002.

TEWANI, S. G.; ROUCH, K. E.; WALCOTT, B. L. A study of cutting process stability of a boring bar with active dynamic absorber. **International Journal of Machine Tools and Manufacture**, Elsevier, v. 35, n. 1, p. 91–108, 1995.

TIAN, W.; SONG, J.; LI, Z.; WILDE, P. de. Bootstrap techniques for sensitivity analysis and model selection in building thermal performance analysis. **Applied Energy**, Elsevier, v. 135, p. 320–328, 2014.

TOTH, J. M.; WANG, M.; ESTES, B. T.; SCIFERT, J. L.; III, H. B. S.; TURNER, A. S. Polyetheretherketone as a biomaterial for spinal applications. **Biomaterials**, Elsevier, v. 27, n. 3, p. 324–334, 2006.

TOTIS, G.; SORTINO, M. Robust analysis of stability in internal turning. **Procedia Engineering**, Elsevier, v. 69, p. 1306–1315, 2014.

UGWU, C. L. J.; ZEWOTIR, T. Evaluating the effects of climate and environmental factors on under-5 children malaria spatial distribution using generalized additive models (gams). **Journal of epidemiology and global health**, Springer, v. 10, n. 4, p. 304, 2020.

UMER, U.; AL-AHMARI, A. 3d modeling of tool wear and optimization in hard turning considering the effects of tool cutting edge and nose radii. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 118, n. 5, p. 1919–1932, 2022.

VANA EI, S.; PARIZI, M.; SALEMIZADEHPARIZI, F.; VANA EI, H. An overview on materials and techniques in 3d bioprinting toward biomedical application. **Engineered Regeneration**, Elsevier, v. 2, p. 1–18, 2021.

VAPNIK, V. **The nature of statistical learning theory**. Springer science & business media, 1999.

VAPNIK, V. N. An overview of statistical learning theory. **IEEE transactions on neural networks**, IEEE, v. 10, n. 5, p. 988–999, 1999.

VEAUX, R. D. Introductory statistics in the 21st century. **USCOTS slides**, 2015.

VICKERS, N. J. Animal communication: when i'm calling you, will you answer too? **Current biology**, Elsevier, v. 27, n. 14, p. R713–R715, 2017.

VIEIRA, J. T.; PEREIRA, R. B. D.; FREITAS, S. A.; LAURO, C. H.; BRANDÃO, L. C. Multi-objective robust evolutionary optimization of the boring process of aisi 4130 steel. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 112, n. 5, p. 1745–1765, 2021.

WANG, C.-C.; KUO, P.-H.; CHEN, G.-Y. Machine learning prediction of turning precision using optimized xgboost model. **Applied Sciences**, MDPI, v. 12, n. 15, p. 7739, 2022.

WANG, L.; BAO, Y.; YU, F.; ZHU, W.; WANG, J. lang; YANG, J.; XIE, H.; HUANG, D. Development of gene model combined with machine learning technology to predict for advanced atherosclerotic plaques. **Clinical Neurology and Neurosurgery**, Elsevier, p. 107819, 2023.

WANG, P.; ZHU, W.; LIU, H.; LIAO, B.; CAI, L.; WEI, X.; REN, S.; YANG, J. A new resource allocation strategy based on the relationship between subproblems for moea/d. **Information Sciences**, Elsevier, v. 501, p. 337–362, 2019.

WANG, W.; CHEN, L.; JIE, J.; ZHAO, Y.; ZHANG, J. A novel multi-objective particle swarm optimization algorithm for flow shop scheduling problems. In: **SPRINGER. Advanced Intelligent Computing Theories and Applications. With Aspects of Artificial Intelligence: 7th International Conference, ICIC 2011, Zhengzhou, China, August 11-14, 2011, Revised Selected Papers 7**. 2012. p. 24–31.

WENG, Z.; WANG, J.; SENTHIL, T.; WU, L. Mechanical and thermal properties of abs/montmorillonite nanocomposites for fused deposition modeling 3d printing. **Materials & Design**, Elsevier, v. 102, p. 276–283, 2016.

WENZ, L.; MERRITT, K.; BROWN, S.; MOET, A.; STEFFEE, A. In vitro biocompatibility of polyetheretherketone and polysulfone composites. **Journal of biomedical materials research**, Wiley Online Library, v. 24, n. 2, p. 207–215, 1990.

WICKHAM, H. **ggplot2: Elegant Graphics for Data Analysis**. Springer-Verlag New York, 2016. ISBN 978-3-319-24277-4. Disponível em: <https://ggplot2.tidyverse.org>.

WICKHAM, H.; FRANÇOIS, R.; HENRY, L.; MÜLLER, K. **dplyr: A Grammar of Data Manipulation**. 2022. R package version 1.0.8. Disponível em: <https://CRAN.R-project.org/package=dplyr>.

WILLIAMS, D. New horizons for thermoplastic polymers. **Medical device technology**, v. 12, n. 4, p. 8–9, 2001.

WU, D.; LIU, Y.; LI, D.; ZHAO, X.; LI, C. Effect of materials on the noise of a water hydraulic pump used in submersible. **Ocean engineering**, Elsevier, v. 131, p. 107–113, 2017.

WU, W.; CHEN, G.; ZHANG, Z.; HE, M.; LI, H.; YAN, F. Construction and verification of atopic dermatitis diagnostic model based on pyroptosis related biological markers using machine learning methods. **BMC Medical Genomics**, BioMed Central, v. 16, n. 1, p. 1–15, 2023.

XIAO, K.; ZHANG, L. The role of viscous deformation in the machining of polymers. **International journal of mechanical sciences**, Elsevier, v. 44, n. 11, p. 2317–2336, 2002.

YANG, C.; TIAN, X.; LI, D.; CAO, Y.; ZHAO, F.; SHI, C. Influence of thermal processing conditions in 3d printing on the crystallinity and mechanical properties of peek material. **Journal of Materials Processing Technology**, Elsevier, v. 248, p. 1–7, 2017.

YANG, L.; OHKI, Y.; HIRAI, N.; HANADA, S. Aging of poly (ether ether ketone) by heat and gamma rays—its degradation mechanism and effects on mechanical, dielectric and thermal properties. **Polymer Degradation and Stability**, Elsevier, v. 142, p. 117–128, 2017.

YANG, Z.; CHEN, Y.; HU, J.; SONG, Y.; MAO, Y. Departure delay prediction and analysis based on node sequence data of ground support services for transit flights. **Transportation Research Part C: Emerging Technologies**, Elsevier, v. 153, p. 104217, 2023.

YAO, C.; ZHU, X.; WEIGEL, K. A. Semi-supervised learning for genomic prediction of novel traits with small reference populations: an application to residual feed intake in dairy cattle. **Genetics Selection Evolution**, Springer, v. 48, p. 1–9, 2016.

YIGIT, U.; CIGEROGLU, E.; BUDAK, E. Chatter reduction in boring process by using piezoelectric shunt damping with experimental verification. **Mechanical Systems and Signal Processing**, Elsevier, v. 94, p. 312–321, 2017.

YUAN, Y.; REN, J.; CAMPO, C. H<sub>2</sub>O hot-wet resistance of reinforcement fibers and fiber-resin interface of advanced composite materials. In: SPRINGER. **Mechanics of Composite and Multi-functional Materials, Volume 7: Proceedings of the 2015 Annual Conference on Experimental and Applied Mechanics**. 2016. p. 291–320.

ZALAZNIK, M.; KALIN, M.; NOVAK, S. Influence of the processing temperature on the tribological and mechanical properties of poly-ether-ether-ketone (peek) polymer. **Tribology International**, Elsevier, v. 94, p. 92–97, 2016.

ZAPOTECAS-MARTÍNEZ, S.; GARCÍA-NÁJERA, A.; MENCHACA-MÉNDEZ, A. Engineering applications of multi-objective evolutionary algorithms: A test suite of box-constrained real-world problems. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, Elsevier, v. 123, p. 106192, 2023.

ZHANG, Y.; XU, X. Machine learning surface roughnesses in turning processes of brass metals. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer, v. 121, n. 3-4, p. 2437–2444, 2022.

ZHAO, X.; JIANG, C. The prediction of distant metastasis risk for male breast cancer patients based on an interpretable machine learning model. **BMC Medical Informatics and Decision Making**, Springer, v. 23, n. 1, p. 74, 2023.

ZHAO, Z.; WANG, S.; WANG, Z.; WANG, S.; MA, C.; YANG, B. Surface roughness stabilization method based on digital twin-driven machining parameters self-adaption adjustment: A case study in five-axis machining. **Journal of Intelligent Manufacturing**, Springer, p. 1–10, 2020.

ZHU, C.; ZHANG, H.; LI, J. Thermal aging study of peek for nuclear power plant containment dome. **Journal of Polymer Research**, Springer, v. 29, n. 1, p. 5, 2022.

ZORKO, D.; KULOVEC, S.; DUHOVNIK, J.; TAVČAR, J. Durability and design parameters of a steel/peek gear pair. **Mechanism and Machine Theory**, Elsevier, v. 140, p. 825–846, 2019.

## APÊNDICE A – ETAPAS DA ESTIMATIVA DO DESEMPENHO NA VALIDAÇÃO CRUZADA VIA *BOOTSTRAP*

A seguir esclarece-se de forma mais didática como é estimado o desempenho na validação cruzada via *Bootstrap*. Seja a Tabela 17, representando  $N$  distintas observações de treino, com três variáveis independentes,  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , e uma resposta,  $y$ . O procedimento descrito no item 2.4.1.2 pode ser seguido considerando qualquer métrica de desempenho de interesse, sendo neste trabalho consideradas três: RMSE, MAE e  $R^2$ . Considerando a título de exemplo a métrica  $R^2$ , o procedimento e as equações descritas na seção supracitada podem ser expressas de forma explícita como segue.

**Tabela 17 – Dados de Treino genéricos,  $\mathbf{Z}$**

|   | $x_1$    | $x_2$    | $x_3$    | $y$   |
|---|----------|----------|----------|-------|
| 1 | $x_{11}$ | $x_{12}$ | $x_{13}$ | $y_1$ |
| 2 | $x_{21}$ | $x_{22}$ | $x_{23}$ | $y_2$ |
| 3 | $x_{31}$ | $x_{32}$ | $x_{33}$ | $y_3$ |
| 4 | $x_{41}$ | $x_{42}$ | $x_{43}$ | $y_4$ |
| ⋮ | ⋮        | ⋮        | ⋮        | ⋮     |
| N | $x_{N1}$ | $x_{N2}$ | $x_{N3}$ | $y_N$ |

1. Selecione o nível do hiperparâmetro de ajuste,  $\alpha$ , e construa um modelo,  $f(\mathbf{x}, \alpha)$ , usando os dados de treinamento,  $\mathbf{Z}$ . O desempenho aparente (dos dados de treino) é calculado conforme Equação 48.

$$AP^{(R^2)}(\hat{f}, \alpha) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - f(\mathbf{x}_i, \alpha))^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (48)$$

2. Itere de  $b = 1$  até  $B$ :

- (a) Gere uma amostra via *Bootstrap* a partir dos dados de treino  $\mathbf{Z}_b^*$ . A Tabela 18 Apresenta um exemplo de amostra gerada. Estatisticamente, em uma amostra gerada por *Bootstrap*, cada linha tem 0,632 de probabilidade de ser sorteada

no mínimo uma vez. Logo, espera-se que  $0,368 \times N$  observações não sejam sorteadas.

**Tabela 18 – Reamostragem via *Bootstrap*,  $\mathbf{Z}_b^*$**

|          | $x_1$    | $x_2$    | $x_3$    | $y$      |
|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1        | $x_{11}$ | $x_{12}$ | $x_{13}$ | $y_1$    |
| 2        | $x_{21}$ | $x_{22}$ | $x_{23}$ | $y_2$    |
| 3        | $x_{31}$ | $x_{32}$ | $x_{33}$ | $y_3$    |
| 3        | $x_{41}$ | $x_{42}$ | $x_{43}$ | $y_4$    |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |
| N        | $x_{N1}$ | $x_{N2}$ | $x_{N3}$ | $y_N$    |

(b) Estime o modelo  $\hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i^*, \alpha)$ , a partir da amostra *Bootstrap*,  $\mathbf{Z}_b^*$ ;

(c) Estime o desempenho *Bootstrap* aplicando o modelo  $\hat{f}_b^*(\mathbf{x}, \alpha)$  na amostra *Bootstrap*,  $\mathbf{Z}_b^*$ , conforme a Equação 49.

$$BP_b^{(R^2)} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^* - \hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i^*, \alpha))^2}{\sum_{i=1}^N (y_i^* - \bar{y}_i^*)^2} \quad (49)$$

(d) Estime o desempenho de teste aplicando o modelo *Bootstrap* nos dados de treinamento,  $\mathbf{Z}$ ,  $\hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha)$ , através da Equação 50.

$$TP_b^{(R^2)} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{f}_b^*(\mathbf{x}_i, \alpha))^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (50)$$

3. Estime o otimismo ou viés do erro como a diferença entre os desempenhos de *Bootstrap* e teste, através da Equação 51. Este viés será usado para correção do desempenho aparente.

$$Opt^{(R^2)} = \overline{BP}^{(R^2)} - \overline{TP}^{(R^2)} \quad (51)$$

4. O desempenho ou erro com otimismo ou viés corrigido é obtido como a diferença entre o desempenho aparente e o otimismo, através da Equação 52.

$$OCP^{(R^2)} = AP^{(R^2)} - Opt^{(R^2)} \quad (52)$$

## APÊNDICE B – ARTIGOS PUBLICADOS PELA AUTORA DA TESE DURANTE O DOUTORADO

Expert Systems With Applications 238 (2024) 122372



Contents lists available at ScienceDirect

Expert Systems With Applications

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/eswa](http://www.elsevier.com/locate/eswa)



### Multi-objective evolutionary optimization of extreme gradient boosting regression models of the internal turning of PEEK tubes

Jéssica Tito Vieira <sup>a,b</sup>, Robson Bruno Dutra Pereira <sup>b,c,\*</sup>, Carlos Henrique Lauro <sup>b</sup>, Lincoln Cardoso Brandão <sup>b</sup>, João Roberto Ferreira <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institute of Industrial Engineering and Management, Federal University of Itajubá, Itajubá, MG, Brazil

<sup>b</sup> Center for Innovation in Sustainable - CIMS, Department of Mechanical and Industrial Engineering, Federal University of São João del-Rei, São João del-Rei, MG, Brazil

<sup>c</sup> Center for Innovation in Modelling and Optimization of Systems - CIMOS, Department of Mechanical and Industrial Engineering, Federal University of São João del-Rei, São João del-Rei, MG, Brazil

#### ARTICLE INFO

##### Keywords:

Internal turning  
Polyetheretherketone  
Statistical learning  
Machine learning  
Extreme gradient boosting  
Multi-objective evolutionary optimization

#### ABSTRACT

Internal turning or boring is an attractive machining process for hole enlarging as it presents low costs, good flexibility, and adaptability. The process presents some instability problems due to the high relation length/diameter ratio of the boring bar. To achieve the best process conditions, predictive models must be estimated and optimization must be conducted. This work presents a statistical learning approach for modeling and optimization of the internal turning process in PEEK tubes. Cutting speed, feed rate, and fixture position were considered input parameters. Cross-validation is used for learning and model selection, including k-fold and bootstrap approaches. The results pointed out that the extreme gradient boosting model was the best for all predictors. For  $R_s$  the final prediction metrics results were  $RMSE = 0.1395$ ,  $MAE = 0.1126$ , and  $R^2 = 1.0031$ , for  $F_s$ ,  $RMSE = 1.8609$ ,  $MAE = 0.9311$ , and  $R^2 = 0.9280$ , and for  $Rou_s$ ,  $RMSE = 21.3084$ ,  $MAE = 17.8053$ , and  $R^2 = 0.6562$ . These results were much superior to the other methods. Multi-objective evolutionary optimization was performed considering the extreme gradient boosting models for roughness, total roundness, and cutting force, besides the deterministic model of the material removal rate. The NSGA-II method was selected considering the hypervolume metric. The pseudo-weight approach is used for select high trade-off solutions to be used in practical production scenarios.

#### 1. Introduction

Internal turning or boring seeks to achieve holes with finished surfaces and dimensional accuracy. As this process is one of the last machining operations of the complete production chain, the parts present high added value considering the material and costs of previous operations (Sorby & Östling, 2018). Despite some other possibilities for borehole enlarging, the boring process is still attractive as it presents low costs, good flexibility, and adaptability (Han, Liu, & Wang, 2019).

The high tool overhang length and the limiting diameter of the boring bar, constrained by the pre-hole diameter (Andren, Håkansson, Brandt, & Claesson, 2004), are limiting factors of the process efficiency (Astarloa et al., 2022). As a consequence of these drawbacks, tool deflection, chatter and dynamical instability, high cutting forces, reduced tool life, poor surface quality, and low-dimensional accuracy may arise in boring operations (Thomas, Diniz, & Szilágyi, 2021).

Several authors have studied the boring process to improve process stability and borehole quality. Yuvaraju, Nanda, and Srinivas (2021b) described an experimental approach for identifying the optimum cutting states to improve finishing and minimize vibration using a passive control method. The addition of a viscoelastic layer over the tool as a damping material decreased the vibrations and improved the surface finishing. Suyama and Diniz (2020) studied the internal turning of AISI 4340 hardened steel. Under stable cutting, tool accelerations were 2 times higher for steel bars, when compared to carbide bars.

Aguiar, Hassui, Suyama, and Magri (2020) used a particle impact passive damper aided by compressed air to improve surface roughness. The airflow-aided particle damper reduced the average surface roughness by around 60% compared to non-airflow damping. Astarloa et al. (2022) proposed the use of the mode coupling effect to increase

\* Corresponding author at: Center for Innovation in Modelling and Optimization of Systems - CIMOS, Department of Mechanical and Industrial Engineering, Federal University of São João del-Rei, São João del-Rei, MG, Brazil.

E-mail addresses: [jessicatito@ufsj.edu.br](mailto:jessicatito@ufsj.edu.br) (J.T. Vieira), [robsondutra@ufsj.edu.br](mailto:robsondutra@ufsj.edu.br) (R.B.D. Pereira), [carloslauro@ufsj.edu.br](mailto:carloslauro@ufsj.edu.br) (C.H. Lauro), [lincoln@ufsj.edu.br](mailto:lincoln@ufsj.edu.br) (L.C. Brandão), [jorfe@unifei.edu.br](mailto:jorfe@unifei.edu.br) (J.R. Ferreira).

<https://doi.org/10.1016/j.eswa.2023.122372>

Received 17 January 2023; Received in revised form 18 September 2023; Accepted 26 October 2023

Available online 2 November 2023

0957-4174/© 2023 Elsevier Ltd. All rights reserved.



12º Congresso Brasileiro de Engenharia de Fabricação  
10 a 12 de maio de 2023, Brasília, DF, Brasil

## OTIMIZAÇÃO MULTIOBJETIVO EVOLUTIVA DO PROCESSO DE TORNEAMENTO INTERNO EM TUBOS DE PEEK

Jéssica Tito Vieira, [jessica.tito@hotmail.com](mailto:jessica.tito@hotmail.com)<sup>1</sup>  
Robson Bruno Dutra Pereira, [robsondutra@ufsj.edu.br](mailto:robsondutra@ufsj.edu.br)<sup>2</sup>  
Lincoln Cardoso Brandão, [lincoln@ufsj.edu.br](mailto:lincoln@ufsj.edu.br)<sup>2</sup>  
Carlos Henrique Lauro, [carloslauro@ufsj.edu.br](mailto:carloslauro@ufsj.edu.br)<sup>2</sup>  
João Roberto Ferreira, [jorofe@unifei.edu.br](mailto:jorofe@unifei.edu.br)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Itajubá, Av. BPS, 1303, Bairro Pinheirinho, Itajubá – MG

<sup>2</sup>Universidade Federal de São João del-Rei, Praça Frei Orlando, 170, Centro, São João del-Rei -MG

**Resumo:** O torneamento interno é uma operação de usinagem que visa aumentar o diâmetro interno de um furo pré-existente e a qualidade desse processo é dependente do sistema composto por máquina, conjunto de fixação, ferramenta e material da peça. Aumentam-se ainda os desafios à obtenção da qualidade desejada com elevada exatidão se o processo de torneamento interno for empregado em materiais inovadores, como os termoplásticos de alto desempenho. O poli éter-éter-ketona (PEEK) é considerado um dos termoplásticos mais importantes e os produtos fabricados com tubos desse material podem suportar temperaturas de serviço na faixa de -50 ° C a 260 ° C, mantendo a alta resistência mecânica. O objetivo do presente trabalho foi estudar a otimização multi-objetivo evolutiva do processo de torneamento interno em tubos de PEEK e comparar o método de modelagem tradicional (metodologia de superfície de resposta) com o método não paramétrico (bagging). Ensaios foram realizados seguindo um planejamento composto central com adição de pontos aleatórios na região experimental, viabilizando a obtenção de modelos de regressão com métodos estatísticos/computacionais mais flexíveis. Os parâmetros de entrada considerados foram a velocidade de corte ( $v_c$ ), avanço ( $f$ ) e posição de fixação do tubo na placa ( $f_p$ ). A resposta analisada foi a rugosidade máxima ( $R_z$ ) que é uma medida de amplitude do perfil amostrado filtrado. Por meio dos valores de RMSE (Root Mean Squared Error), do coeficiente de determinação  $R^2$  e do MAE (Mean Absolute Error), observou-se que o método baseado em árvores de regressão (bagging) mostrou-se superior à metodologia de superfície de resposta para a modelagem dos dados. Por fim, foi utilizado o método de otimização multi-objetivo evolutivo NSGA-II para determinar um conjunto de soluções pareto ótimas para as respostas de acabamento e de produtividade. As soluções encontradas possibilitam ao experimentador explorar diferentes cenários de qualidade e produtividade, de forma que o experimentador deve selecionar os níveis dos parâmetros ótimos  $x^* = [v_c^*, f^*, f_p^*]$  para uma determinada situação de planejamento.

**Palavras-chave:** torneamento interno, PEEK, aprendizagem estatística, bagging, otimização multiobjetivo evolutiva.

### 1. INTRODUÇÃO

O torneamento interno é uma operação de usinagem que visa aumentar o diâmetro interno de um furo pré-existente (SUYAMA; DINIZ; PEDERIVA, 2017). A qualidade de uma operação de usinagem interna é determinada pela rigidez, estática e dinâmica, do sistema composto por máquina, sistema de fixação, ferramenta e peça (SUYAMA; DINIZ; PEDERIVA, 2016).

Os tubos de PEEK são fáceis de usinar sem a necessidade de equipamentos especializados. A maioria das aplicações de usinagem interna em tubos de PEEK nas indústrias aeroespacial, biomédica, petróleo e gás necessitam de uma tolerância geométrica e de uma qualidade superficial específica para o bom funcionamento do componente, caso essas especificações não são atingidas, danos e prejuízos podem ser gerados.

No torneamento, ferramentas de corte, parâmetros de corte são os principais parâmetros que afetam a usinabilidade do PEEK e seus compósitos (OZDEN; OTEYAKA; CABRERA, 2021). Assim, modelos adequados para prever as características de saída do processo devem ser desenvolvidos. A modelagem e otimização do processo de torneamento interno são úteis para selecionar os níveis ideais de condições de corte para alcançar a estabilidade do processo e, consequentemente, a capacidade de atender às especificações do produto (VIEIRA et al., 2021).

A metodologia de superfície de resposta (RSM) tem sido amplamente aplicada para modelagem de processos projetados para permitir a otimização. Como os modelos RSM são de regressão múltipla de segunda ordem, eles são baseados na estimativa paramétrica clássica. Para obter a melhor aproximação das saídas e dos parâmetros do processo, a modelagem tem sido realizada por meio de uma abordagem de aprendizado estatístico.

Os métodos de aprendizado se concentram na estimativa de modelos não paramétricos com boa capacidade de generalização, em oposição à metodologia de estimativa de modelos sob suposições estatísticas. A teoria de tais