**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS**

Daniel Aparecido Lopes Vieira da Cunha

**Desenvolvimento de classificador de código aberto para
identificação de polímeros destinados à manufatura
aditiva.**

São Carlos

2021

Daniel Aparecido Lopes Vieira da Cunha

**Desenvolvimento de classificador de código aberto para
identificação de polímeros destinados à manufatura
aditiva.**

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências - Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais.

Área de Concentração: Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais

Orientadora: Profa. Dra. Marcia Cristina Branciforti

Coorientador: Prof. Dr. Rafael Vidal Aroca

Versão Corrigida

São Carlos

2021

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

C972 d	Cunha, Daniel Aparecido Lopes Vieira Desenvolvimento de classificador de código aberto para identificação de polímeros destinados à manufatura aditiva / Daniel Aparecido Lopes Vieira Cunha; orientadora Marcia Cristina Branciforti; coorientador Rafael Vidal Aroca. São Carlos, 2021. Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais e Área de Concentração em Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2021. 1. Manufatura Aditiva. 2. Aprendizado de Máquinas. 3. NIR. 4. Quimiometria. 5. FDM. 6. Automatização. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **DANIEL APARECIDO LOPES VIEIRA DA CUNHA.**

Título da dissertação: "Desenvolvimento de classificador de código aberto para identificação de polímeros destinados à manufatura aditiva".

Data da defesa: 22/01/2021.

Comissão Julgadora

Resultado

Profa. Associada **Marcia Cristina Branciforti**
(Orientadora)
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

__Aprovado__

Dr. **Pedro Yoshito Noritomi**
(CTI – Renato Archer)

__Aprovado__

Prof. Dr. **Marcos Akira D Ávila**
(Universidade Estadual de Campinas/UNICAMP)

__Aprovado__

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Materiais:

Prof. Associado **Marcelo Falcão de Oliveira**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:

Prof. Titular **Murilo Araujo Romero**

*Dedico aos meus pais, Aparecido de Jesus Ignácio da Cunha e Célia Regina Lopes Vieira
que sempre estiveram ao meu lado e são os meus maiores exemplos de vida.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais Aparecido e Célia, às minhas sobrinhas Júlia e Bruna, por todo incentivo, cuidado e carinho depositado em mim a todo momento.

Agradeço aos meus orientadores, Profa. Dra. Marcia Cristina Branciforti e Prof. Dr. Rafael Vidal Aroca pela oportunidade, conselhos, dedicação e apoio constante em todas as etapas da pesquisa. Obrigado por confiarem a mim este projeto.

Ao Prof. Dr. André Carmona Hernandes pela prontidão em ensinar e participar ativamente da fase final da pesquisa, mesmo diante das limitações trazidas pelo confinamento em tempos de pandemia.

Ao Departamento de Química Analítica do Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas (IQ/Unicamp), representado pelos professores Dr. Jarbas J. R. Rohwedder e Dr. Ivo M. R. Júnior, assim como por Rafael L. Ribessi. Obrigado pela parceria e pelas instruções cedidas acerca das medidas de espectroscopia de infravermelho próximo.

Aos parceiros de pesquisa Marcos T. Edo e Gabriel C. Cardinal do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de São Carlos (DEMec/UFSCar) pelo trabalho em equipe e colaboração.

Aos amigos de grupo de pesquisa, Vinícius, Aline, Paula, Francisco e Larissa pelas conversas, ajudas e valiosas informações compartilhadas em reuniões.

Às pessoas que de algum modo fizeram a diferença ao longo deste período, Mariana, Gustavo, Lucas, Victor, Jorge, Nayara e outros mais. Obrigado pelo companheirismo e momentos vividos.

Ao Departamento de Engenharia de Materiais (SMM/USP), bem como à Escola de Engenharia de São Carlos (EESC/USP) e seus funcionários. Agradeço pela estrutura, apoio administrativo e auxílio no desenvolvimento de projetos em que estive envolvido.

Às empresas fornecedoras dos filamentos poliméricos descritos neste trabalho. Obrigado pelo apoio fornecido e contribuição.

Por fim, à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa de mestrado (processo 88887.200686/2018-00) e apoio financeiro para a realização desta pesquisa.

“A mente que se abre a uma nova ideia jamais voltará ao seu tamanho original.”

Albert Einstein.

RESUMO

CUNHA, D. A. L. V. **Desenvolvimento de classificador de código aberto para identificação de polímeros destinados à manufatura aditiva.** 2021. 125p.

Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

Ao longo dos anos de seu desenvolvimento, a Manufatura Aditiva (MA) emergiu como uma técnica de fabricação extremamente promissora e eficiente, capaz de revolucionar boa parte dos ambientes de produção em um novo contexto conduzido pela Indústria 4.0. A fabricação de objetos via adição de camadas subsequentes concede aos processos aditivos uma gama de vantagens que transformam as cadeias produtivas, na medida em que proporcionam a otimização de projetos de manufatura pela liberdade de design e geração de geometrias complexas sob demanda. Do mesmo modo, essas vantagens cativaram outros setores da economia, sendo possível observar a aplicação dos variados equipamentos de impressão 3D, não somente em projetos científicos de alta tecnologia, mas também como método educativo ou simplesmente para uso recreativo. Por outro lado, na proporção em que a MA amadurece, novas demandas do processo surgem, principalmente relacionadas ao aumento da precisão de fabricação, redução do tempo de manufatura, aumento da qualidade das peças produzidas e padronização dos parâmetros de processamento. Nesse sentido, o presente trabalho teve como objetivo atender integralmente tais demandas ao propor o desenvolvimento de um sistema de identificação da matéria-prima via dispositivos de sensoriamento. A partir do reconhecimento do material aplicado, se torna viável definir automaticamente os parâmetros de processamento adequados, tornando a fabricação mais independente, produtiva, rápida e segura. Em sua primeira versão, o classificador recebeu os dados de espectroscopia de infravermelho próximo (NIR), os quais descrevem as características inerentes aos materiais pela resposta de frequência vibracional de suas moléculas. Os dados espectrais provenientes dos filamentos de poli(ácido láctico) (PLA), acrilonitrila butadieno estireno (ABS) e poli(tereftalato de etileno glicol) (PETG) foram previamente tratados por procedimentos derivativos de Savitzky-Golay, que suavizam e minimizam as variações e ruídos dos espectros. Na sequência, esses espectros tratados foram projetados pela Análise dos Componentes Principais (PCA) de modo a reduzir a dimensionalidade do conjunto dos dados por meio da seleção das principais componentes. A PCA organiza os espectros similares de cada classe de material em agrupamentos de *scatters*, auxiliando o processo de predição do modelo de classificação da Análise dos Discriminantes Lineares (LDA). Todas as etapas do *roadmap* do sistema se fundamentaram no alinhamento dos conceitos de aprendizado de máquinas (AM) e nos procedimentos da Quimiometria, configurados e testados previamente pela análise exploratória. Os ajustes resultaram em um percentual de acurácia do treinamento de 100% de predições corretas,

atestando a eficácia da metodologia desenvolvida. Ao final, o sistema de classificação foi codificado com base na análise exploratória e validado por testes com dois subconjuntos de dados distintos. Os resultados apresentaram um alto valor *macro-f1* (0,79) ao submeter o classificador a um subconjunto bastante específico, evidenciando a factibilidade de aplicação do sistema de classificação no escopo do projeto. A principal contribuição do trabalho, portanto, foi o desenvolvimento de um algoritmo de classificação, assim como um projeto conceitual, capazes de conceder procedimentos iniciais de um sistema que propicia o aumento da acessibilidade e da produtividade da MA em variados domínios de fabricação.

Palavras-chave: Manufatura aditiva. Aprendizado de máquinas. NIR. Quimiometria. FDM. Automatização.

ABSTRACT

CUNHA, D. A. L. V. **Development of open source classifier for identification of polymers intended for additive manufacturing.** 2021. 125p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

Over the years of its development, Additive Manufacturing (AM) has emerged as an extremely promising and efficient manufacturing technique, capable of revolutionizing production environments in a new context led by Industry 4.0. The manufacturing of objects by adding subsequent layers gives the additive processes a series of advantages that transform the productive chains, as they provide the optimization of manufacturing projects by the freedom of design and generation of complex geometries on demand. Likewise, these advantages have captivated other sectors of the economy, and it is possible to observe the application of the various 3D printing equipment, not only in high-tech scientific projects but also as an educational method or simply for recreational use. On the other hand, as AM matures, new demands of the process arise, mainly related to the increase of the manufacturing precision, reduction of the manufacturing time, an increase of the quality of the produced parts, and standardization of the processing parameters. Therefore, this project aimed to fully meet these demands by proposing the development of a system for identifying the raw material by sensing devices. From the recognition of the applied material, it is possible to automatically define the appropriate processing parameters, making the manufacturing more independent, productive, fast, and safe. In its first version, the classifier received the data from near-infrared (NIR) spectroscopy, which describes the characteristics of the materials by the vibrational frequency response of their molecules. The spectral data from the filaments of poly(lactic acid) (PLA), acrylonitrile butadiene styrene (ABS), and poly(ethylene glycol terephthalate) (PETG) were previously treated by Savitzky-Golay derived procedures, which soften and minimize the variations and noise of the spectra. In the sequence, these treated spectra were designed by the Principal Component Analysis (PCA) to reduce the dimensionality of the data set through the selection of the main components. The PCA organizes the similar spectra of each class of material into scatters groupings, assisting the process of predicting the classification model of the Linear Discriminant Analysis (LDA). All stages of the system roadmap are based on the alignment of machine learning (ML) concepts and Chemometric procedures, previously configured and tested by exploratory analysis. The adjustments resulted in a percentage of accuracy of the training of 100% of correct predictions, attesting to the effectiveness of the methodology developed. In the end, the classification system was coded based on the exploratory analysis and validated by tests with two distinct subsets of data. The results presented a high macro-f1 value (0.79) when submitting the classifier to a

very specific subset, evidencing the feasibility of applying the classification system in the scope of the project. The main contribution of the work, therefore, was the development of a classification algorithm, as well as a conceptual project, capable of granting initial procedures of a system that provides the increase of accessibility and productivity of the AM in various manufacturing domains.

Keywords: Additive manufacturing. Machine learning. NIR. Chemometrics. FDM. Automation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Processos de funcionamento padrão da MA	27
Figura 2 – Linha cronológica do desenvolvimento da tecnologia da MA	31
Figura 3 – Componentes básicos do equipamento de fabricação FDM	33
Figura 4 – Contribuição percentual da literatura específica sobre a FDM	34
Figura 5 – Polimerização do poli (ácido láctico) (PLA)	38
Figura 6 – Polimerização da acrilonitrila butadieno estireno (ABS)	40
Figura 7 – Polimerização do poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG)	42
Figura 8 – Parâmetros de processamento do processo FDM	45
Figura 9 – Vibrações moleculares gerados por radiação no infravermelho	49
Figura 10 – Representação esquemática do harmônico	50
Figura 11 – Tecnologia DLP	54
Figura 12 – Classificações de métodos de aprendizado de máquinas (AM)	56
Figura 13 – Fluxograma de atividades do aprendizado de máquinas	57
Figura 14 – Filtragem por Savitzky-Golay	62
Figura 15 – Componentes principais PC-1 e PC-2	64
Figura 16 – Conjunto de amostras distribuídas em classes	68
Figura 17 – Estrutura hierárquica da árvore de decisão CART.	72
Figura 18 – Partição do conjunto de dados para para o AM de classificação	74
Figura 19 – Matriz confusão binária.	76
Figura 20 – Fluxograma da metodologia do trabalho proposto.	80
Figura 21 – DLP® NIRscan™: Medições.	81
Figura 22 – Fluxograma da metodologia do trabalho proposto.	83
Figura 23 – Desenho técnico do sistema de identificação para MA.	86
Figura 24 – Espectros NIR adquiridos	87
Figura 25 – Espectros pré-tratados por Savitzky-Golay na análise exploratória	89
Figura 26 – Bandas de absorção NIR de PLA, ABS e PETG	90
Figura 27 – Gráfico <i>score</i> da PCA do conjunto de dados sem pré-tratamento.	91
Figura 28 – Gráfico <i>score</i> da PCA do conjunto de dados com pré-tratamento.	92
Figura 29 – Espectros NIR de PLA e ABS com baixo sinal de absorbância.	93
Figura 30 – Gráfico <i>loading</i> para a criação da PC-1 e PC-2.	94
Figura 31 – Resultado da função de inclinação dos espectros	96
Figura 32 – Savitzky-Golay resultante do algoritmo do do MATLAB®	97
Figura 33 – Planos de decisão da LDA resultantes	98
Figura 34 – Resultado do <i>data augmentation</i>	99
Figura 35 – Diagrama UML de atividades do sistema	125

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Filamentos poliméricos comerciais disponíveis para a FDM.	36
Tabela 2 – Parâmetros de processamento de filamentos poliméricos para a FDM. .	46
Tabela 3 – Atribuições de bandas espectrais para o NIR	51
Tabela 4 – Propriedades dos materiais dos filamentos poliméricos da 3D Lab®. . .	79
Tabela 5 – Matriz confusão resultante do modelo de calibração	95
Tabela 6 – Matriz confusão resultante dos testes com o subconjunto B	100
Tabela 7 – Métricas de desempenho calculadas para as classes e o classificador . .	101
Tabela 8 – Conjunto de amostras aplicadas no trabalho	121
Tabela 9 – Subconjunto A	122
Tabela 10 – Subconjunto B	123

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

3D	Tridimensional
ABS	Acrilonitrila butadieno estireno
AM	Aprendiza do de Máquinas
CAD	<i>Computer Aided Design</i>
CAM	<i>Computer Aided Manufacturing</i>
CNC	<i>Computer Numerical Control</i>
DMD	<i>Digital Micromirror Device</i>
FDM	<i>Fused Deposition Modeling</i>
FFF	<i>Fused Filament Fabrication</i>
FIR	<i>Far Infrared</i>
IoT	<i>Internet of Things</i>
IUPAC	<i>International Union of Pure and Applied Chemistry</i>
LDA	<i>Linear Discriminant Analysis</i>
MA	Manufatura Aditiva
MEMS	Micro-eleto-mecânicos
MID	<i>Middle Infrared</i>
MVA	<i>Multivariate Data Analysis</i>
NIR	<i>Near Infrared</i>
PCA	<i>Principal Components Analysis</i>
PET	Poli(tereftalato de etileno)
PETG	Poli(tereftalato de etileno glicol)
PLA	Poli(ácido láctico)
RNA	Redes Neurais Artificiais
ROP	<i>Ring Opening Polymerization</i>
SLA	<i>Stereolithography</i>
SLS	<i>Selective Laser Sintering</i>
SNR	<i>Signal-to-noise ratio</i>
T_f	Temperatura de fusão
T_g	Temperatura de transição vítrea

LISTA DE SÍMBOLOS

μ	Massa reduzida
AC	Acurácia [%]
b	Coefficiente angular
Covar()	Covariância
E	Energia do sistema [J]
f1	<i>f1-score</i>
h	Constante de Planck
k	Constante de força
Mf1	<i>Macro-f1</i>
PRE	Precisão [%]
<i>recall</i>	Sensibilidade [%]
V	Energia potencial [J]
var()	Variância

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	Considerações Iniciais	23
1.2	Objetivos	26
1.2.1	Objetivos Específicos	26
2	EMBASAMENTO TEÓRICO	27
2.1	Manufatura Aditiva	27
2.1.1	Histórico	29
2.1.2	<i>Fused Deposition Modeling</i> (FDM)	32
2.1.3	Materiais	35
2.1.3.1	Poli (ácido láctico) (PLA)	37
2.1.3.2	Acrilonitrila butadieno estireno (ABS)	39
2.1.3.3	Poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG)	41
2.1.4	Parâmetros de Processamento	42
2.2	Espectroscopia no Infravermelho	47
2.2.1	Fundamentos Teóricos	47
2.2.2	Espectroscopia do Infravermelho Próximo	51
2.2.2.1	DLP® NIRscan™ Nano	53
2.3	Aprendizado de Máquinas	54
2.3.1	Análise Exploratória	57
2.3.1.1	Savitzky-Golay (SG)	60
2.3.1.2	Análise de Componentes Principais (PCA)	63
2.3.1.3	Análise Discriminantes Lineares (LDA)	67
2.3.2	Engenharia de Atributos	69
2.3.3	Árvore de Decisão	71
2.3.4	Treinamento	73
2.3.5	Avaliação do Modelo	75
2.3.5.1	Matriz Confusão	75
3	METODOLOGIA	79
3.1	Materiais	79
3.2	Métodos	80
3.2.1	Coleta de Dados	80
3.2.2	Análise Exploratória	81
3.2.3	Implementação do Algoritmo	82
3.3	Projeto Conceitual	85

4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	87
4.1	Análise Exploratória	87
4.1.1	Espectros Adquiridos	87
4.1.2	Análise de Componentes Principais (PCA)	91
4.1.3	Análise Discriminante Linear (LDA)	94
4.2	Algoritmo	95
4.2.1	Engenharia de atributos	96
4.2.2	Treinamento	97
4.2.3	Avaliação e Testes	99
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	103
5.1	Conclusões	103
5.2	Trabalhos Futuros	104
	REFERÊNCIAS	105
	APÊNDICE A – TABELA DE AMOSTRAS	121
	APÊNDICE B – DIAGRAMA UML DE ATIVIDADES	125

1 INTRODUÇÃO

No capítulo introdutório são apresentadas as considerações iniciais relacionadas ao tema do trabalho, dando enfoque aos conceitos básicos sobre os novos paradigmas trazidos pela Indústria 4.0, a manufatura aditiva neste contexto e o aprendizado de máquinas como ferramenta para o desenvolvimento da automatização do processo. Em seguida, as principais motivações, bem como alguns desafios acerca do projeto são relatados. No fim, o capítulo descreve os principais objetivos desta pesquisa.

1.1 Considerações Iniciais

O desenvolvimento de recentes tecnologias digitais e eletrônicas, bem como novas demandas de mercado, propiciaram a criação de estratégias de produção em indústrias globais, das quais passaram a adotar técnicas de manufatura avançada baseadas na automação do trabalho, robótica, internet das coisas (IoT), inteligência de dados, dentre outras inovações. As indústrias que empregam tais tecnologias, coordenadas de modo a conferir competitividade e otimização da cadeia produtiva, estão inseridas na chamada Indústria 4.0 – também conhecida como Quarta Revolução Industrial (ZHONG et al., 2017). Neste contexto, a fim de melhorar seus modelos de negócios e acelerar o ciclo de desenvolvimento de produtos, empresas são forçadas a se adaptar às exigências da cadeia produtiva e, assim, buscar modernizações do sistema produtivo (SAVOLAINEN; COLLAN, 2020; SCHWAB, 2019). A Manufatura Aditiva (MA) – também denominada impressão 3D, manufatura por camadas, processo aditivo, fabricação aditiva e manufatura aditiva por camadas, é considerada uma das principais alternativas de inovação em manufatura (JEREZ-MESA et al., 2016).

A MA corresponde a um grupo de processos que produz objetos em três dimensões, camada a camada, via modelo digital (SCHWAB, 2019). Trata-se de uma tecnologia oriunda dos anos 1980, inicialmente desenvolvida para a construção de modelos conceituais, arquitetônicos ou anatômicos, sobretudo para criação de protótipos de produtos. Ao longo dos anos, no entanto, a fabricação aditiva evoluiu da prototipagem rápida ou do ferramental rápido para uma manufatura robusta e promissora, capaz de produzir objetos totalmente funcionais. Hoje em dia essa tecnologia atende uma ampla gama de aplicações, desde a indústria aeroespacial, automotiva e de construção civil, até no campo da biomedicina (NGO et al., 2018; SCHWAB, 2019; URHAL et al., 2019).

No âmbito da Indústria 4.0, a necessidade de customização em massa dos bens manufaturados torna a fabricação aditiva essencial, tendo em vista sua grande facilidade de adaptação e personalização. Embora ainda haja dúvidas quanto ao fator aplicabilidade, os processos aditivos vêm ocupando boa parte dos diferentes setores produtivos, auxiliados

principalmente pelos recentes avanços da robótica, programação e ciências dos materiais. À medida que as restrições de custos, tamanho dos objetos e velocidade de produção são superadas, a difusão progressiva da manufatura aditiva se realiza, tendo como tendência a inclusão de componentes eletrônicos integrados, especificamente placas de circuitos elétricos e sensores (DILBEROGLU et al., 2017; SAVOLAINEN; COLLAN, 2020; SCHWAB, 2019).

As tecnologias de MA se diferem pela metodologia de fabricação e pelas espécies de materiais empregados no processo. Dentre as diversas técnicas, considera-se a mais proeminente no mercado a modelagem por fusão e deposição (FDM, do inglês *Fused Deposition Modeling*). A FDM consiste em um processo de produção aditiva que serve ao propósito de fabricar produtos de alta qualidade e em tempo reduzido. Apesar da funcionalidade simples, trata-se de uma técnica capaz de gerar geometrias complexas, tendo precisão e segurança. Por consequência disso, a FDM tem sido amplamente aproveitada não somente nos meios produtivos, mas também em ambientes de escritório, educacionais e de pesquisa. Neste processo, o filamento polimérico é introduzido em um bico aquecido até a temperatura de fusão correspondente. O material fundido é depositado na plataforma de fabricação conforme as orientações no plano XY do modelo digital. A movimentação no plano Z é realizada pela plataforma ou pelo próprio cabeçote de extrusão. Assim, a estrutura tridimensional projetada digitalmente é criada linha a linha (DHINAKARAN et al., 2020; STERN et al., 2019; VYAVAHARE et al., 2020).

O aumento da popularidade das impressoras 3D desktops de baixo custo proporcionou o surgimento de diferentes espécies de filamentos poliméricos, sendo os compostos por acrilonitrila-butadieno-estireno (ABS), poli (ácido láctico) (PLA) e poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG) os mais difundidos no mercado (SING et al., 2017; VYAVAHARE et al., 2020). Apesar disso, o crescimento desses equipamentos nos meios produtivos ainda é limitado devido a baixa resposta mecânica dos componentes fabricados e pela dificuldade de padronizar as melhores configurações do processo (GAO et al., 2015; STANSBURY; IDACAVAGE, 2016). Desta forma, diversos trabalhos têm relatado acerca desses temas nos últimos anos, os quais exploram as propriedades reológicas dos materiais e métodos de otimização dos parâmetros de processamento (DHINAKARAN et al., 2020; SANCHEZ et al., 2019). Boa parte dessas referências expõem a ausência de normas e padrões que permitem a reprodutibilidade do processo e a consequente dificuldade de adaptação do sistema para produção em massa. Ainda, é citado que a qualidade dos processos aditivos por extrusão são altamente influenciados por uma grande variedade de parâmetros e esses dependem diretamente das especificações dos materiais utilizados (GAO et al., 2015; NGO et al., 2018; PEREIRA; KENNEDY; POTGIETER, 2019; VYAVAHARE et al., 2020). Contudo, apesar dos sistemas de monitoramento e controle da MA serem objetos de diversos estudos recentes, ainda há poucos trabalhos que apresentam soluções para a acessibilidade e adaptabilidade, principalmente orientados para a automatização de equipamentos comerciais.

O processo de automatização tem como principal objetivo aplicar conhecimentos muitas vezes multidisciplinares em projetos de equipamentos, de forma a ampliar a capacidade produtiva de uma tecnologia com melhor qualidade, segurança e com menor consumo possível de energia e de mão de obra (MORAES, 2007). Portanto, o projetista deve se apoiar em conceitos da engenharia e das ciências para o desenvolvimento de soluções semiautomáticas ou automáticas, buscando otimizar o desempenho do processo. Cummings (2014) define a automatização como sendo o uso computadorizado de máquinas para a realização de diferentes tarefas com o mínimo de esforço humano. Para tanto, o uso da robótica, hardwares e dispositivos de assistência são fundamentais, quando auxiliados diretamente por softwares de controle. Nesse sentido, os fundamentos da inteligência artificial, sobretudo de aprendizado de máquinas são aqui, amplamente aproveitados e aplicados (BRYNJOLFSSON; MITCHELL, 2017; SUN et al., 2017). De acordo com Haverkort e Zimmermann (2017) ao aprender com os dados de produção, os algoritmos de aprendizado de máquinas são capazes de melhorar a eficiência e segurança do processo, ao torna-lo mais dinâmico e inteligente.

No contexto deste trabalho, o aprendizado de máquinas permite com que um sistema seja capaz de identificar previamente as classes de materiais, de modo a configurar as condições de processamento e automatizar o processo de fabricação aditiva ao diminuir a dependência com o operador. O sistema deve, portanto, coletar *in-loco* os dados característicos de cada material, distinguir suas peculiaridades e direcionar os respectivos melhores parâmetros de processamento. Neste caso, o dispositivo de sensoriamento necessariamente precisa ser capaz de realizar a leitura de tais peculiaridades da estrutura do material e se comunicar diretamente com o classificador. A alternativa é o uso da espectroscopia de infravermelho próximo (NIR), que consiste em um método analítico capaz de identificar um composto a partir das frequências específicas de vibrações de seus grupos funcionais, emitidas pela absorção da radiação infravermelha. A NIR, quando alinhada com os procedimentos matemáticos e estatísticos derivados da Química Analítica, especificamente da Quimiometria, fornece uma impressão digital particular do material analisado (SIESLER et al., 2008). Somado a essa vantagem, na última década, essa técnica testemunhou uma extensa transformação de sua tecnologia, a partir do surgimento de dispositivos extremamente portáteis, miniaturizados, acessíveis e conectados. Atualmente, alguns espectrofotômetros de infravermelho próximo já são considerados *smart objects*, uma vez que são capazes de interligar o mundo físico a sistemas online, inclusive fazendo-se uso de recursos da computação em nuvem (*cloud computing*) (PASQUINI, 2018).

O próximo passo para evolução do sistema idealizado neste trabalho é que o método proposto possa ser integrado a outras tecnologias emergentes vinculadas a melhoria da fabricação aditiva. Uma possibilidade é a sua adaptação à sistemas de monitoramento e controle, como o projeto proposto por Parsekian et al. (2020). Neste, foi desenvolvido um procedimento capaz de retomar o processo aditivo após qualquer tipo de interrupção,

mediante informações do código G do equipamento. Outra possibilidade é o desenvolvimento de um modelo integrado que possa dar início à fabricação e ter um acompanhamento remoto em tempo real das etapas do processo ([CHEN et al., 2014](#)).

Portanto, a premissa da presente pesquisa é contribuir com o desenvolvimento de um sistema de classificação capaz de automatizar as configurações dos processos aditivos, tendo como base as informações sobre o material aplicado. A ideia é dar início aos procedimentos que torne a tecnologia mais independente aos usuários, tendo em vista a atual expansão e popularização das técnicas de MA e a consequente demanda por um sistema mais acessível, integrado e seguro.

1.2 Objetivos

A pesquisa propõe o desenvolvimento de um classificador de código aberto baseado no aprendizado de máquinas e na Quimiometria, apto a identificar em tempo real o material empregado na MA e viabilizar os posteriores ajustes dos seus respectivos parâmetros de processamento. Desse modo, o sistema tem por objetivo reduzir as falhas de fabricação consequentes da seleção imprópria dos parâmetros de processamentos intrínsecos a cada material, bem como busca aumentar a acessibilidade da tecnologia para o grande público, ao diminuir a dependência do processo com o operador.

1.2.1 Objetivos Específicos

1. Aquisição dos filamentos poliméricos (PLA, ABS e PETG) de colorações diferentes, fornecidos por ao menos quatro diferentes fabricantes;
2. Obtenção dos espectros de infravermelho próximo com auxílio do espectrofotômetro NIR;
3. Realização da análise exploratória dos dados;
4. Realização da engenharia de recursos dos dados;
5. Execução do treinamento do aprendizado de máquinas auxiliado pelas diretrizes da árvore de decisão;
6. Avaliação do classificador gerado;
7. Disposição do código fonte para a comunidade.

2 EMBASAMENTO TEÓRICO

Na parte inicial do segundo capítulo são apresentados os conceitos fundamentais pertencentes à manufatura aditiva. Posteriormente, uma breve revisão histórica é introduzida sobre o tema, seguida por informações relacionadas às suas tecnologias, aplicações, materiais e parâmetros de processamento. Na segunda parte são apresentadas referências sobre a técnica de espectroscopia de infravermelho próximo (NIR), seguida por esclarecimentos sobre seu sistema, suas tecnologias e possíveis aplicações. Por fim, na terceira parte, os temas relacionados às técnicas de programação são abordados mediante uma visão de aprendizado de máquinas (AM), requerida pela metodologia na qual o trabalho está estruturado.

2.1 Manufatura Aditiva

De acordo com a *American Society for Testing and Materials*, a Manufatura Aditiva (MA) consiste em processos em que há a combinação de materiais a partir de modelos computacionais, gerados, via de regra, camada a camada. Em geral, o processo é apoiado e orientado por quatro princípios essenciais: (1) o uso do software desenho assistido por computador (CAD, do inglês *Computer Aided Design*) para criação do modelo virtual 3D, com geometria e dimensões pretendidas para a peça a ser construída; (2) a estrutura padrão deve ser fatiada em diversas camadas contínuas mediante a um software de execução assistida por computador (CAM, do inglês *Computer Aided Manufacturing*); (3) a construção da peça ocorre, camada a camada, pela adição sequencial de porções controladas de material; e (4) pós-processamento, com limpeza e acabamento da peça (NGO et al., 2018; VOLPATO, 2018; WONG; HERNANDEZ, 2012). A estrutura e a adesão do conjunto de camadas depositadas dependem da matéria-prima, do equipamento de fabricação e dos parâmetros de processo (THOMPSON et al., 2016). A Figura 1 ilustra as etapas de funcionamento padrão dos sistemas de MA.

Figura 1 – Processos de funcionamento padrão da MA.

Fonte: Autoria Própria.

A norma ISO/ASTM 52900:2015¹ que trata da terminologia sobre as tecnologias de MA classifica os processos aditivos em sete categorias: fotopolimerização em cuba, jateamento de material, jateamento de aglutinante, extrusão de material, fusão em leito de pó, deposição de energia direcionada e laminação de folhas. Cada família de processos possui princípios operacionais distintos, características de produção e materiais compatíveis (THOMPSON et al., 2016). A extrusão de material (ME3DP, do inglês *Material Extrusion 3D Printing*), no entanto, consiste em um dos processos mais populares em relação às outras categorias e constitui-se basicamente na deposição, mediante a um cabeçote de extrusão, de matéria-prima, após o seu processo de fusão (TORRADO et al., 2015; VYAVAHARE et al., 2020). O modelo ME3DP mais conhecido comercialmente é a modelagem por fusão e deposição (FDM) (NGO et al., 2018; VYAVAHARE et al., 2020). Atualmente é possível encontrar diversas variações de equipamentos que utilizam a técnica FDM, inclusive alguns com projetos abertos, baseados na fabricação de filamentos fundidos (FFF, do inglês *Fused Filament Fabrication*) (VYAVAHARE et al., 2020). A abordagem completa sobre a tecnologia FDM será dada na seção 2.1.2 deste capítulo.

Um dos principais motivos que tornaram a tecnologia de MA mais acessível ao grande público foi o vencimento das patentes anteriores, que deu aos fabricantes a possibilidade de desenvolver novos dispositivos – como as impressoras 3D de mesa, também denominada desktops. Por consequência, nos últimos anos tem ocorrido a tendência do surgimento de equipamentos e materiais de reposição de baixo custo, viabilizando assim, a expansão da tecnologia em escolas, residências, bibliotecas e laboratórios (GAO et al., 2015; NGO et al., 2018). Segundo o recente relatório da Wohlers (2019), o valor de mercado global da MA atingirá cerca de quinze bilhões de dólares em 2020. Ainda, estima-se o aumento deste número para vinte e três bilhões em 2022 e trinta e cinco bilhões de dólares em 2024 (WOHLERS, 2019). Quanto ao contexto educacional, as impressoras 3D de código aberto são particularmente relevantes, não somente pelo baixo custo, mas também por reproduzir de forma prática e direta, os conceitos de design e fabricação (MENANO et al., 2019; SCHELLY et al., 2015).

A adoção da MA e outras tecnologias de manufatura avançada parece anunciar um futuro em que as cadeias produtivas serão mais curtas, mais bem localizadas, mais colaborativas e que, conseqüentemente, oferecerão mudanças profundas no atual modelo de mercado. Esse potencial de transformar os atuais paradigmas de negócios explica-se pela variedade de métodos e as incalculáveis possibilidades ligadas aos processos (FORD; DESPEISSE, 2016; SAVOLAINEN; COLLAN, 2020). Em estudo realizado por Jiang, Kleer e Piller (2017), no qual foi aplicada o método Delphi² para projetar como a MA influenciará

¹ ISO/ASTM 52900:2015: *Standard Terminology for Additive Manufacturing – General Principles – Terminology*.

² Metodologia de pesquisa qualitativa, baseada em entrevistas de um grupo de especialistas para previsões de tendências da área estudada.

no ecossistema de negócios de empresas, consumidores e sociedade até 2030, foi previsto fortes mudanças na estrutura da indústria e na dinâmica competitiva do mercado. Por enquanto, a adaptação híbrida entre os métodos de manufatura tradicionais e processos aditivos se mostra uma opção interessante para os meios de produção (FORD; DESPEISSE, 2016; TOSELLO et al., 2018). Tal consenso se apoia nas vantagens que a MA pode oferecer para melhorar o efeito sinérgico da combinação dos processos (GAO et al., 2015; NGO et al., 2018; TOFAIL et al., 2018). Dentre essas, cita-se a capacidade de produzir objetos por informações digitais, sem a necessidade de ferramentas adicionais. Isto leva a redução do tempo e do custo, bem como a possibilidade de fabricação de peças complexas, as quais os métodos tradicionais não seriam capazes de realizar (URHAL et al., 2019). De fato, quando comparada aos métodos ditos tradicionais – como a fabricação por moldagem, remoção e conformação de materiais – a MA possui maior facilidade de automatização, pois nesta se utiliza as informações geométricas fornecidas diretamente pelo sistema CAD. Soma-se a isso, o impacto extremamente positivo que o fluxo de projetos digitais gera à logística de produção, ao aproximar o ambiente produtivo com o mercado consumidor (ATTARAN, 2017).

Apesar das amplas vantagens, a MA ainda apresenta algumas limitações, principalmente relacionadas à ausência de normas e padrões que garantem reprodutibilidade, bem como a dificuldade em melhorar a qualidade das camadas sem o aumento do tempo de fabricação (GAO et al., 2015; NGO et al., 2018). Esses fatores estão associados à seleção dos parâmetros de processamento, que afetam diretamente a precisão do processo e a qualidade dos objetos produzidos, especialmente quanto suas propriedades físicas (URHAL et al., 2019). Logo, o desafio está em otimizar esses parâmetros, levando em conta as condições de fabricação e os diferentes materiais aplicados, de modo a automatizar o processo (POPESCU et al., 2018; TOFAIL et al., 2018).

Embora os sistemas de monitoramento e controle da MA sejam assuntos de diversos estudos recentes, ainda há poucos trabalhos que apresentam soluções para a acessibilidade e adaptabilidade do sistema. De acordo com Vyavahare et al. (2020) uma das principais lacunas para o avanço da fabricação aditiva está no desenvolvimento de sistemas de seleção automática dos parâmetros de processamento, mediante informações oferecidas pelo material. Tal proposição é apoiada pelos recentes esforços de aplicação de novos materiais e a consequente necessidade de se lidar com as novas condições de processamento aplicando, inclusive, métodos de aprendizagem de máquinas para identificar e definir ações preditivas, otimizando a qualidade da fabricação (HASSANIN et al., 2020; LI et al., 2019).

2.1.1 Histórico

O conceito de construção de objetos físicos da MA não é recente. Os fatos históricos revelam que as primeiras técnicas envolvendo os conceitos de MA tem origem no

século XIX, quando o fundamento de construção em camadas passou a ser aplicado em projetos de mapas topográficos e de fotoesculturas (GAO et al., 2015; VOLPATO, 2018). No entanto, a primeira concepção de uma máquina de MA surgiu somente em 1981, quando o pesquisador Hideo Kodama do Instituto de Pesquisas Industriais Municipal de Nagoya, propôs um sistema de fabricação baseada na composição de camadas criadas por fotopolímeros (KODAMA, 1981). O princípio dessa técnica consiste na formação de um modelo tridimensional a partir da exposição do fotopolímero líquido a raios ultravioletas (UV).

Posteriormente, em 1986, o engenheiro norte-americano Charles W. Hull publica uma patente que descreve um sistema robusto de fabricação aditiva, semelhante ao princípio de construção de camadas via exposição a raios UV, futuramente conhecido como estereolitografia (SLA, do inglês *Stereolithography*) (CALIGNANO et al., 2017). Tendo êxito no desenvolvimento inicial da tecnologia, Hull funda a primeira empresa relacionada a manufatura aditiva – na época, dita prototipagem rápida – nomeada 3D System®. A fabricante, além de popularizar o uso comercial da tecnologia lançando os primeiros modelos de máquinas SLA, também estabeleceu bases para o progresso ao desenvolver o formato de arquivo STL, onde estão contidas as instruções de fabricação. Atualmente o formato STL é o mais difundido para manuseio do modelo e parâmetros de fabricação em softwares de impressão 3D.

Em 1986, a tecnologia de MA denominada sinterização seletiva a laser (SLS, do inglês *Selective Laser Sintering*) foi patenteada pelo pesquisador da Universidade do Texas (EUA), Carl Deckard (HUANG et al., 2012; SING et al., 2017). A SLS é um processo que utiliza um feixe laser de alta potência para sinterizar o material, geralmente polimérico, camada a camada, de forma a construir o modelo projetado (SING et al., 2017). Ao longo dos anos esta técnica passou a ser adaptada para o uso em fabricação de modelos a base de materiais metálicos (aço e alumínio) e uma gama de compostos cerâmicos, obtendo resultados satisfatório principalmente no quesito qualidade e precisão (NGO et al., 2018; SING et al., 2017).

Hoje bastante divulgada e disseminada no mercado, a FDM teve sua patente depositada pelo inventor norte-americano Scott Crump em 1989 e licenciada pela empresa Stratasys®, do qual Crump foi o co-fundador, em 1992 (FERDINAND, 2017; VYAVAHARE et al., 2020).

A evolução da MA ao longo da década de 1990 e início dos anos 2000 teve ligação direta com o avanço de tecnologias computacionais importantes, como o projeto assistido por computador (CAD), a manufatura auxiliada por computador (CAM) e o controle numérico computadorizado (CNC, do inglês *Computer Numerical Control*). Desta forma, a medida em que tecnologias periféricas foram se transformando, as técnicas de fabricação aditiva foram, proporcionalmente, se inserindo em ambientes industriais e meios produtivos.

O progresso contínuo da tecnologia proporcionou o surgimento de projetos de máquinas de MA de design aberto, auto-reproduzíveis e disponíveis gratuitamente para toda a comunidade. Esta iniciativa, denominada *Replicating Rapid Prototyper* ou RepRap, foi inicialmente idealizada pelo professor da Universidade de Bath (Reino Unido), Doutor Adrian Bowyer em 2005 (JEREZ-MESA et al., 2016). A visão do projeto se baseia na tentativa de democratização do método de manufatura, permitindo com que usuários estejam constantemente contribuindo para o desenvolvimento de projetos derivados e que, assim, houvesse o crescimento da disponibilidade das informações sobre equipamentos e técnicas de MA (JEREZ-MESA et al., 2016; PEARCE et al., 2010). A Figura 2 apresenta a linha cronológica do desenvolvimento da tecnologia de MA até o início de sua expansão (2010), proporcionada pela facilidade de acesso dado pelo projeto RepRap.

Figura 2 – Linha cronológica do desenvolvimento da tecnologia da MA.

Fonte: Autoria Própria.

O surgimento da técnica de fabricação aditiva de código aberto, somado ao decréscimo do custos desses dispositivos, levaram a rápida expansão da tecnologia no meio doméstico (GAO et al., 2015; JEREZ-MESA et al., 2016). A MA revelou-se como um recurso educativo inovador, estando cada vez mais presente em centros educacionais e de pesquisa (GAO et al., 2015; NGO et al., 2018; SCHELLY et al., 2015). O sistema passou a ser explorado e avaliado como uma ferramenta de negócio e de estratégia produtiva, principalmente destinado à setores de alta tecnologia. Dentre esses, destacam-se a aeroespacial, o automotivo, mecatrônico, biomédico e de geração de energia (GAO et al., 2015; URHAL et al., 2019). A MA vem transformando os meios produtivos que, ao longo dos anos, foram incentivados

pela concorrência a aumentar a complexidade e qualidade dos produtos em altas taxas de produção (TOFAIL et al., 2018).

Sob uma perspectiva futura, espera-se que mais organizações produtivas sigam esta tendência à medida em que novos insumos são inseridos à técnica (TOFAIL et al., 2018). Além dos já consolidados em processos de MA, novos materiais podem ser explorados como os materiais metálicos (p. ex., ligas de alumínio e manganês modificadas), materiais cerâmicos (p. ex., sistemas Al_2O_3 e $Al_2O_3 - ZrO_2$) e compósitos termoplásticos reforçados com nanotubos de carbono, fibras biológicas ou biovidros (BARBOSA, 2018; CUNHA et al., 2019; LI et al., 2019). Nesse contexto, dada a complexidade de definição de parâmetros de processamento dependentes desses novos materiais, a automação e otimização do processo de MA serão fundamentais.

2.1.2 *Fused Deposition Modeling* (FDM)

No processo de modelagem por fusão e deposição (FDM) um filamento contínuo de polímero termoplástico é depositado de forma a construir camadas consecutivas que, no final do processo, formarão o objeto modelado digitalmente. Para tanto, o filamento é aquecido no bico até atingir um estado semi-líquido e depois extrudado na plataforma ou acima das camadas previamente depositadas. O cabeçote extrusor geralmente realiza movimentos nos planos X e Y, enquanto a plataforma se move na direção Z fornecendo altura ao objeto. Assim, a estrutura tridimensional é criada em uma rotina camada por camada (DHINAKARAN et al., 2020; NGO et al., 2018; VYAVAHARE et al., 2020).

A impressora 3D FDM básica é composta por um carretel de filamentos poliméricos que alimenta o cabeçote extrusor por tracionamento. O segmento eletrônico da máquina é formado por motores de passo e seus *drivers* de potência, bem como por mantas de aquecimento térmico do extrusor, plataforma de aquecimento, dispositivo de controle e sensores de posição e de temperatura. Toda estrutura física deve ser capaz de sustentar a movimentação do cabeçote nos planos de fabricação, principalmente quanto a rigidez estrutural a esforços de flexão, torção e vibração decorrentes (KUN, 2016; VYAVAHARE et al., 2020).

Um fator excepcionalmente importante para o processo FDM é a termoplasticidade do material depositado; isto é, a propriedade que permite com que o polímero se funda e solidifique à temperatura ambiente, durante a fabricação. Tal procedimento é essencial ao processo, dada a necessidade de vínculo e sustentação entre camadas para a estrutura do objeto. O resfriamento demasiadamente rápido pode dificultar a adesão, criando espaços vazios entre camadas. Segundo algumas pesquisas, a principal consequência da falta de adesão é o prejuízo nas propriedades mecânicas do produto final, especialmente quanto a resistência à tração e compressão (CUAN-URQUIZO et al., 2019; KUMAR; SINGH; AHUJA, 2018; NGO et al., 2018). Nesse contexto, o principal desafio das pesquisas relacionadas

ao processo FDM é melhorar a resposta mecânica das peças fabricadas ao passo que se mantêm a alta produtividade. Isto, visando principalmente o aperfeiçoamento dos parâmetros de processamento e o desenvolvimento de novos materiais para o processo (DHINAKARAN et al., 2020; THANGAVEL; PONNUSAMY; SRIVASTAVA, 2020). A Figura 3 ilustra um equipamento de fabricação aditiva FDM básica e seus componentes.

Figura 3 – Componentes básicos do equipamento de fabricação aditiva FDM.

Fonte: Autoria Própria.

Diversos trabalhos têm sido apresentados abordando melhorias ao processo FDM, visando a precisão e aperfeiçoamento da qualidade da fabricação. Segundo estudo de revisão realizado por Vyavahare et al. (2020), 56% das literaturas específicas sobre a técnica FDM abordam soluções de otimização dos parâmetros de processamento. Tais pesquisas buscam minimizar, por exemplo, os efeitos que o comportamento anisotrópico, inerente ao processo, gera na resistência mecânica de peças produzidas (CHOCKALINGAM; JAWAHAR; PRAVEEN, 2015; TORRADO et al., 2015). Ainda de acordo com Vyavahare et al. (2020), 12% das literaturas específicas tratam de recentes avanços da técnica FDM. Dentre esses, estão os trabalhos relacionados ao controle, monitoramento e automação do equipamento. Como exemplo tem-se o trabalho de Heras et al. (2018), que propuseram um método de detecção de falhas de processamento, verificando avanço do filamento polimérico

via *enconders* ópticos. Wu, Wang e Yu (2015), por sua vez, criaram um método que permite monitorar in situ as condições do filamento polimérico via emissões acústicas. De modo similar, Kim et al. (2018) apresentaram um sistema de monitoramento do processo FDM, usando duas categorias de sensores: um acelerômetro e um sensor de emissão acústica. Também, foi desenvolvido um software de controle para avaliação do desempenho do processo em tempo real. A Figura 4 exibe a contribuição percentual da literatura específica vinculada ao processo aditivo FDM.

Figura 4 – Contribuição percentual da literatura específica sobre o processo aditivo FDM.

Fonte: Adaptado de Vyavahare et al. (2020).

Apesar das limitações presentes na tecnologia, as quais são focos de diversas abordagens científicas, atualmente já existem inúmeras aplicações da FDM em muitos campos (THANGAVEL; PONNUSAMY; SRIVASTAVA, 2020; VYAVAHARE et al., 2020). Na indústria aeronáutica, a agência reguladora *Federal Aviation Administration* (FAA) recentemente certificou o uso de polímeros retardadores de chama como insumo para fabricação de componentes de aviação por processos aditivos FDM (THANGAVEL; PONNUSAMY; SRIVASTAVA, 2020). Klippstein et al. (2017) relataram amplo uso desta técnica para o desenvolvimento de estruturas leves de aeronaves não tripuladas. Na produção automotiva, a qual vem progressivamente exigindo o uso de componentes leves e de alto desempenho, tem aplicado a FDM para a produção de peças destinadas tanto para o motor, quanto para acessórios (CAZÓN et al., 2015; PRADA et al., 2016). Para o setor de serviços, Laplume, Petersen e Pearce (2016) propuseram a ideia da criação de uma

loja de fabricação 3D que trabalharia sob demanda; isto é, formação de uma "fazenda" de equipamentos FDM controlada por uma central de pedidos. Essas tantas possibilidades comprovam a versatilidade da tecnologia, mostram o seu amplo campo de aplicação e a consequente necessidade do desenvolvimento tecnológico do método para atender as futuras demandas de produção.

2.1.3 Materiais

Os materiais poliméricos aplicados à MA são geralmente termoplásticos que, ao serem aquecidos até um estado viscoso, podem ser depositados continuamente para a construção de camadas com propriedades específicas. Os termoplásticos são polímeros com a capacidade de amolecer e fluir quando sujeitos a um aumento de temperatura e pressão. Quando essas condições são retiradas, o polímero se solidifica em um produto com formas definidas (CANEVAROLO, 2006). Ainda, consistem em materiais que podem ser fundidos e solidificados repetidas vezes, com pouca ou nenhuma variação em suas propriedades básicas. Essa característica permite que sejam processados e reprocessados sucessivamente (MANRICH, 2005). Quanto as classificações, os termoplásticos podem ser divididos em termos de desempenhos mecânicos e processabilidade. Por exemplo, os convencionais, também denominados *commodities*, são termoplásticos de baixo custo, baixo nível de exigência mecânica e alta processabilidade. Os termoplásticos de engenharia, por sua vez, são polímeros aplicados na confecção de peças de bom desempenho que exigem alta resistência mecânica, boa tenacidade e estabilidade dimensional. Em virtude dessas propriedades, correspondem aos materiais com um custo mais elevado em comparação aos termoplásticos convencionais (CANEVAROLO, 2006).

A seleção dos polímeros na aplicação em processos aditivos pode ser um grande desafio, tendo em vista os fatores a serem ponderados. Um problema presente aos termoplásticos convencionais é a baixa resposta mecânica quando submetidos a altas cargas. O uso de termoplásticos de engenharia ou polímeros de alto desempenho seria uma solução, mas o alto custo e as exigentes condições de processamento são aspectos desfavoráveis (VALINO et al., 2019). Devido a este contexto, atualmente há um grande esforço em aumentar a paleta de opções ao desenvolver novos polímeros, aditivos e compósitos termoplásticos objetivando, sobretudo, a melhoria do próprio processo de fabricação 3D (LIGON et al., 2017; VALINO et al., 2019). Pesquisas relatam, por exemplo, vantagens na aplicação de reforços particulados em matrizes termoplásticas quanto a resistência à tração, resistência mecânica e alongamento (CUNHA et al., 2019; LIGON et al., 2017; TORRADO et al., 2015). Sob outra perspectiva, estudos exploram a criação de diferentes blends poliméricas capazes de reduzir a anisotropia das propriedades mecânicas (TORRADO et al., 2015; ZALDIVAR et al., 2018; ZHUANG et al., 2017). Também, relata-se o uso de compatibilizantes, plastificantes e outros aditivos sinérgicos aptos a aumentar o fator de processabilidade desses materiais (CHING et al., 2017; VALINO et al., 2019).

Quanto aos filamentos comerciais destinados à FDM, estes são produzidos pela extrusão do polímero termoplástico principal em conjunto de cargas, fibras, corantes e outros aditivos poliméricos (LIGON et al., 2017). Entre a grande variedade, destacam-se a acrilonitrila butadieno estireno (ABS), o poli (ácido láctico) (PLA), o poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG), o policarbonato (PC) e as poliamidas (PA), como polímeros mais proeminentes no mercado (LIGON et al., 2017; STANSBURY; IDACAVAGE, 2016). Nos últimos anos, porém, tem-se observado o surgimento de uma série de novos termoplásticos, sobretudo variações químicas de materiais já existentes (NOVAKOVA-MARCINCINOVA; NOVAK-MARCINCIN, 2013; WU et al., 2020). Como exemplo, cita-se as diferentes classes de ABS disponíveis, como o ABS-ESD7, ABSi, ABS-M30, ABS-M30i e o ABSplus. O ABS-ESD7 é um material dissipativo eletrostático, durável e de boas propriedades mecânicas, adequado para produtos eletrônicos e equipamentos industriais (VYAVAHARE et al., 2020). O ABS-M30 é fabricado para ser 25 a 70% mais forte mecanicamente que o ABS normal, oferecendo excelentes resistências à tração, impacto e flexão. A sua variação ABS-M30i, além de apresentar as propriedades mecânicas equivalentes ao ABS-M30, também é considerado um material biocompatível que pode ser esterilizado. Por fim, o ABSplus consiste em um ABS aprimorado não somente em termos de propriedades mecânicas, mas também quanto a sua processabilidade (VAIRIS et al., 2016; WU et al., 2020).

Os exemplos descritos evidenciam o avanço significativo no desenvolvimento de novos materiais para aplicação em MA. Tal progresso corresponde a um modo de expandir o portfólio de desempenho e características dos materiais, de forma a aumentar a flexibilidade das exigências dos projetos (WU et al., 2020). O surgimento de novos materiais exige que a relação processamento, estrutura e desempenho seja explorada no contexto da MA, especialmente quanto suas particularidades. A Tabela 1 expõe os principais filamentos poliméricos destinados a FDM, disponíveis atualmente no mercado.

Tabela 1 – Principais filamentos poliméricos comerciais disponíveis para o processo FDM.

Polímero	Descrição	Fabricante
ABS	Acrilonitrila butadieno estireno	Ultimaker ® , Makerbot ® , 3dxtex ® , etc.
	ABS-ESD7	Stratasys ®
	ABSSi	Stratasys ®
	ABS-M30	Stratasys ®
	ABS-M30i	Stratasys ®
	ABSplus	Stratasys ®
	Agilus 30	Stratasys ®
ASA	Acrilonitrila estireno acrilato	Stratasys ® , 3dxtex ® , etc.
PE	Polietileno de alta densidade (HDPE)	Filaments.ca ®
PP	Polipropileno	Ultimaker ® , etc.
		(continua)

(conclusão)		
PC	Polycarbonato	Ultimaker ® , 3dxtech ® , etc.
PPSF/PPSU	PC-ABS	Stratasys ® , 3dxtech ® , etc.
	Polifenilsulfona	Stratasys ® , 3dxtech ® , etc.
	Náilon 6	Stratasys ® , 3dxtech ® , etc.
Náilon	Náilon 12	Stratasys ®
	PC-ISO	Stratasys ®
PLA	Poli (ácido láctico)	Stratasys ® , Ultimaker ® , 3dxtech ® , etc
TPE	Elastômeros termoplásticos	MatterHackers ®
TPU	Poliuretano termoplástico	Stratasys ® , Ultimaker ® , etc.
PS	Poliestireno de alto impacto (HIPS)	MatterHackers ® , etc.
ULTEM ™	Polieterimida	SABIC ®
PEEK	Poli(éter-éter-cetona)	Solvay ® , Evonik ® , Victrex ®
PEKK	Policer(éter-cetona-cetona)	Arkema ®

Fonte: Wu et al. (2020).

2.1.3.1 Poli (ácido láctico) (PLA)

O poli (ácido láctico) (PLA) é um poliéster alifático, cristalino, biodegradável e de base biológica, derivado de fontes renováveis, como o milho, batata, beterraba, mandioca, cana-de-açúcar e outros vegetais ricos em amido (CASTRO-AGUIRRE et al., 2016; CHEN et al., 2016; JEM; TAN, 2020). O PLA possui propriedades mecânicas relevantes, tendo módulo elástico entre 3 e 4 GPa e resistência a tração entre 50 e 70 MPa, dependendo da massa molar e da composição estereoquímica (FARAH; ANDERSON; LANGER, 2016). Termicamente, trata-se de um polímero que apresenta uma faixa de temperatura de transição vítrea (T_g) entre 55 e 65 °C e, quando semicristalino, ponto de fusão no intervalo de 170 a 180 °C. Tais faixas térmicas e as demais propriedades termomecânicas fazem com que PLA seja considerado um material de excelente processabilidade em processos de MA (SANTANA et al., 2018). Contudo, algumas deficiências deste polímero, como limitado alongamento até a ruptura e a baixa resistência ao impacto, representam desafios para a ampla aplicação do material. Por isso, ao longo de anos, houve um grande esforço em pesquisas relacionadas a obtenção de composições de PLA unido a outras resinas e plastificantes ou seu emprego em blendas, que tendem a minimizar essas restrições e melhorar suas propriedades (CASTRO-AGUIRRE et al., 2016; NOFAR et al., 2019; NOFAR; SALEHIYAN; RAY, 2019).

O PLA é formado por uma longa cadeia linear composta por dois tipos de monômeros estéreos de ácido láctico (LA), o isômero L e o isômero D (CASTRO-AGUIRRE et al., 2016; CHEN et al., 2016). Geralmente, existem três rotas para a produção deste polímero a partir dessas variações de ácido láctico. Uma das rotas, a polimerização por condensação direta, gera PLA de baixa massa molecular. A polimerização em duas etapas, por sua vez, produz PLA de maior massa molecular, mas ainda é limitada pela reação de

equilíbrio da policondensação, devido à hidrólise das ligações éster. Em alternativa, tem-se a síntese por abertura de anel (ROP, do inglês *Ring Opening Polymerization*), onde o ácido láctico é primeiramente polimerizado em um oligômero de baixo peso molecular e então despolimerizado via catalisadores especiais. O lactídeo resultante promove a polimerização por abertura de anel com o auxílio de um iniciador, formando o PLA de alta massa molecular (HU et al., 2016). Trata-se de uma rota que envolve três etapas de reações químicas e outros passos de purificação adicional tendo, portanto, um custo mais elevado (AURAS, 2010; HU et al., 2016; JEM; TAN, 2020). A Figura 5 mostra as três rotas de polimerização do PLA, descritas anteriormente.

Figura 5 – Rotas de polimerização do poli (ácido láctico) (PLA).

Fonte: Adaptado de Hu et al. (2016).

A maioria dos processos de fermentação responsáveis pela formação do ácido láctico produz predominantemente o isômero L, gerando o L-ácido láctico (L-LA). No entanto, mediante a diversas reações químicas o L-LA pode se converter no monômero D-ácido láctico (D-LA). Em complemento, a presença de igual quantidade de L-LA e D-LA gera um composto heterogêneo denominado ácido meso-láctico (CHEN et al., 2016; JEM; TAN, 2020). O arranjo estereoquímico na formação do polímero influencia diretamente em suas propriedades, especialmente na cristalinidade. Por exemplo, o PLA composto por um teor superior a 90% de L-ácido láctico tende a ser semicristalino, ao passo que teores a baixo deste valor apresentam características amorfas (AURAS, 2010). O PLA comercial geralmente é um copolímero entre o poli (L-ácido láctico) e poli (meso-ácido láctico) (CHEN et al., 2016).

O poli (ácido láctico) é um dos bioplásticos de maior sucesso no mercado, sendo aplicado em diversos setores de produção. Segundo estimativa de [Jem e Tan \(2020\)](#) o volume global de produção de PLA foi de 190 mil toneladas em 2019. Dentre as categorias produtivas de aplicação do PLA cita-se a indústria têxtil, de embalagens de curta duração, plasticultura, dentre outros ([CASTRO-AGUIRRE et al., 2016](#); [NOFAR](#); [SALEHIYAN](#); [RAY, 2019](#)). As propriedades de biodegradabilidade, biocompatibilidade e bioabsorção, aliadas ao fato de ser constituído por um recurso inesgotável, fizeram com que o PLA seja muito utilizado em aplicações biomédicas e pesquisas no campo da medicina regenerativa ([ALSSABBAGH et al., 2017](#); [SERRA et al., 2013](#)).

2.1.3.2 Acrilonitrila butadieno estireno (ABS)

O acrilonitrila butadieno estireno (ABS) é um termoplástico amorfo composto por uma mistura copolimérica de acrilonitrila, estireno e polibutadieno, o qual é considerado um polímero de engenharia graças a suas boas propriedades mecânicas, estabilidade química, resistência ao calor e ótima processabilidade ([TARANTILI; MITSAKAKI; PETOUSSI, 2010](#); [WU; LI, 2014](#)). Mecanicamente, o ABS apresenta a combinação do carácter rígido dos polímeros de acrilonitrila e estireno com a resistência das borrachas de butadieno. Tais propriedades são descritas pelos valores de módulo elástico e de resistência à tração que são, respectivamente, 2300 MPa e 45 MPa. Quanto suas propriedades térmicas, o ABS geralmente apresenta temperaturas de fusão (T_f) na faixa de 225 a 245 °C e temperatura de transição vítrea (T_g) próxima a 105 °C, que representam valores ótimos para o processamento em MA. Entretanto, dentre as principais desvantagens deste material, cita-se sua inflamabilidade inerente, exibindo uma liberação de calor específica de aproximadamente 35 kJ/g, e a comprovada emissão de partículas tóxicas de estireno durante o processamento ([FARCAS et al., 2019](#); [FINK, 2010](#); [OLIVERA et al., 2016](#); [WU; LI, 2014](#)).

Em um processo típico de polimerização do ABS, os monômeros de estireno e acrilonitrila são copolimerizados na presença de um elastômero à base de dieno (polibutadieno ou um copolímero de butadieno). Em resumo, o elastômero é dissolvido nos monômeros e uma fase homogênea contínua prevalece. Tal procedimento pode ser estabelecido por qualquer iniciador gerador de radicais livres de butadieno, que seja ativado nas temperaturas de reação correspondentes e promova o processo de enxertia. Nesse processo, os monômeros são copolimerizados simultaneamente sozinhos e incluídos na estrutura do elastômero. Em consequência, ao longo do processo, duas fases se tornam visíveis: a polimérica formada por estireno-acrilonitrila (SAN) e a elastomérica formada pelo butadieno, as quais podem ser descritas como fase A e B, respectivamente. De início, a fase B predomina e o polímero menor na fase A é dissolvido no elastômero maior da fase B. No entanto, a medida em que a polimerização prossegue, o polímero da fase A ganha volume ao ponto de que haja o fenômeno de inversão de fase, onde o elastômero da fase B se dispersa na matriz polimérica da fase A. A partir deste ponto, o monômero é convertido em polímero, a

viscosidade da mistura aumenta e se faz preciso maior potência para manter a temperatura e a uniformidade da composição (FINK, 2010; OLIVERA et al., 2016; PETERSON, 2019).

Tendo em vista todo o processo de polimerização do ABS, algumas questões importantes devem ser salientadas. Primeiramente, deve-se saber que a reticulação do elastômero é controlada pelo uso de agentes de transferência de cadeias e pela concentração e tipo do iniciador empregado. Portanto, a proporção das fases A e B é controlado por esses fatores, além da temperatura da reação. Ainda sobre os agentes de transferência de cadeia, estes são usados no controle do grau geral de enxerto e, conseqüentemente, do peso molecular resultante da polimerização (FINK, 2010). Os teores dos monômeros que constituem o ABS podem variar de 20 a 30% para acrilonitrila, de 5 a 35% para o butadieno e de 35 a 75% para estireno (SCHEIRS, 2000). A Figura 6 ilustra o processo de polimerização do ABS, conforme descrito.

Figura 6 – Processo de polimerização da acrilonitrila butadieno estireno (ABS).

Fonte: Autoria Própria.

O elevado equilíbrio de propriedades somado a ampla janela de processamento fizeram com que o ABS seja um dos termoplásticos mais proeminentes no mercado (FINK, 2010; OLIVERA et al., 2016). A aplicação deste material ocorre em diversos segmentos produtivos, sobretudo naqueles relacionados a produtos de elevado conteúdo tecnológico, acessórios automotivos e itens de segurança. Ademais, alguns estudos como o realizado por Peeters et al. (2015) constataram a presença do ABS na formação de uma série de blendas aplicadas ao setor eletroeletrônicos, como as composições de PC/ABS e ABS/PMMA.

2.1.3.3 Poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG)

O poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG) é um termoplástico produto da copolimerização do poli (tereftalato de etileno) (PET) e o dietileno glicol. Trata-se de uma resina plástica pertencente à família dos poliésteres aromáticos, que pode ser processada em condições mais amplas que sua formulação base. O PETG é reconhecido por suas excelentes características mecânicas, as quais destacam-se a elevada resistência ao impacto, a notável tenacidade e a alta ductilidade ([GUESSASMA; BELHABIB; NOURI, 2019](#); [SANTANA et al., 2018](#)). Ademais, apresenta bom desempenho em resistência à tração (25 MPa), alongamento até a ruptura (93%) e módulo de elasticidade (1,6 GPa). Quanto as propriedades térmicas, o PETG expõe uma temperatura de transição vítrea (T_g) próxima a 80 °C e uma temperatura de fusão (T_f) que varia entre 250 a 260 °C ([LOKENS GARD, 2013](#); [WIEBECK, 2005](#)).

O processo de polimerização do PETG se inicia com a produção do PET, um polímero termoplástico semicristalino bastante empregado em diferentes segmentos industriais. Em geral, o PET é obtido por duas rotas químicas: a esterificação do ácido tereftálico (PTA) e a transesterificação do dimetil tereftalato (DMT) com etileno glicol (EG). O procedimento de modificação do PET para o PETG ocorre com a adição de um novo composto, o 1,4 ciclo-hexanodimetanol (CHDM). A inclusão deste glicol na composição confere a resina um aumento da ductilidade e resistência ao impacto, ao passo que reduz a sua cristalinidade. A taxa de cristalização e a cristalinidade dos copoliésteres de PETG são controláveis justamente com a taxa de inclusão do CHDM. Considera-se o polímero totalmente amorfo quando o conteúdo deste glicol está na faixa de 32 a 62%. Portanto, o produto resultante desta reação é um polímero amorfo e transparente, que apresenta um equilíbrio entre as boas propriedades do PET com um ótimo fator de processabilidade ([CHEN; ZHANG; ZHANG, 2015](#); [GUESSASMA; BELHABIB; NOURI, 2019](#); [WIEBECK, 2005](#)). A Figura 7 apresenta um exemplo de rota de obtenção do PETG, descrito por [Chen et al. \(2015\)](#). A modificação do PET para a produção do PETG é realizada a partir do PTA, EG e CHDM, com auxílio do estanho orgânico, acetado de antimônio e acetado de cobalto como catalisadores. O resultado é a formação e posterior policondensação em segunda etapa dos compostos intermediários tereftalato de bis-hidroxietila (BHET) e tereftalato bis-hidroximetilciclohexano (BHCT), os quais mediante os catalisadores produzem o PETG.

As propriedades do PETG se destacam pela combinação das características funcionais do ABS e a confiabilidade do processamento do PLA ([SANTANA et al., 2018](#)). Em razão disso, emprega-se este polímero na fabricação aditiva de produtos que requerem alguma flexibilidade, boa resistência e atoxidade, como equipamentos de proteção ou recipientes para alimentos, os quais são totalmente recicláveis. Em outra linha de produção, tal como moldagem e termoformagem, o PETG pode ser utilizado como matéria-prima de segmentos de produtos que exigem transparência como chapas, embalagens, expositores e

etc (LOKENSARD, 2013; WIEBECK, 2005).

Figura 7 – Processo de modificação do PET para a produção do poli (tereftalato de etileno glicol) (PETG).

Fonte: Adaptado Chen et al. (2015)

2.1.4 Parâmetros de Processamento

A definição adequada dos parâmetros de processo na fabricação aditiva é necessária para garantir qualidade superior à peça, alta taxa produtividade, segurança, baixo custo de produção, diminuição do tempo de fabricação e redução do desperdício de matéria-prima (MOHAMED; MASOOD; BHOWMIK, 2015; GROZA; SHACKELFORD, 2019). Trata-se de um procedimento complexo, tendo em vista a presença de um grande número de variáveis conflitantes altamente dependentes das propriedades dos materiais (MOHAMED; MASOOD; BHOWMIK, 2015; POPESCU et al., 2018). Na atualidade, boa parte dos procedimentos usuais para atribuição desses parâmetros ocorre mediante diversos testes prévios, onde principalmente são observados os comportamentos do material sob fluxo. Essa compreensão é determinante para a seleção da matéria-prima para uma determinada aplicação e/ou processo, bem como para prever sua morfologia final (BRETAS; D'ÁVILA, 2005; MANRICH, 2005).

A maioria dos materiais poliméricos apresentam um comportamento tipicamente viscoso como os líquidos, superposto a um comportamento elástico, como os sólidos

Hookeanos. Essa natureza dual dos polímeros é denominada viscoelasticidade e está associada à sua resposta à deformação (CANEVAROLO, 2006; MANRICH, 2005). O estado viscoso ocorre em temperaturas acima da temperatura de fusão (T_f) e consiste no ponto no qual os materiais poliméricos são processados (CANEVAROLO, 2006). Em geral, o comportamento da deformação de um polímero viscoso é especificado em termos da viscosidade; isto é, a medida da resistência do material ao escoamento quando submetido às forças de cisalhamento (CALLISTER; RETHWISCH, 2007). Sabe-se, por exemplo, que a variação da temperatura do processo influencia diretamente nas propriedades de viscosidade dos polímeros, o que interfere propriamente no fluxo e na vazão do extrudado (BRETAS; D'ÁVILA, 2005). Por outro lado, a elasticidade é uma propriedade física desses materiais em que suas cadeias tendem a retornar à sua forma e volume originais após serem deformados (CANEVAROLO, 2006). Ambas as propriedades são de extrema importância quando um material polimérico é empregado em um processo baseado em extrusão (SANCHEZ et al., 2019).

Outro fator importante para o processamento de polímeros é a propriedade morfológica de suas estruturas moleculares. Tal aspecto consiste no modo como as cadeias estão organizadas para formar a massa sólida. O processo de cristalização dos materiais poliméricos difere dos sólidos cristalinos convencionais devido à natureza peculiar de sua estrutura, formada por longas cadeias. Nesse caso, a cristalinidade ocorre como empacotamento dessas cadeias moleculares que, conseqüentemente, produzem um arranjo atômico ordenado. Contudo, em razão do tamanho e da complexidade, as moléculas dos polímeros são, em geral, apenas parcialmente cristalinas, estando dispersas no material amorfo restante (CANEVAROLO, 2006). A desordem ou falta de alinhamento das cadeias moleculares irá resultar em uma estrutura totalmente amorfa (CALLISTER; RETHWISCH, 2007).

Sabe-se que o grau de cristalinidade influencia diretamente a maioria das propriedades físicas, mecânicas e termodinâmicas dos materiais poliméricos (MANRICH, 2005). Por exemplo, ao aumentar a porcentagem de cristalinidade do polímero, eleva-se proporcionalmente as suas temperaturas de fusão (T_f) e de transição vítrea (T_g). Essas temperaturas são parâmetros fundamentais em relação às condições de serviço dos polímeros, pois definem os limites térmicos superior e inferior para inúmeras aplicações (CALLISTER; RETHWISCH, 2007). Ao conhecer tais limites, tem-se a possibilidade de se compreender as mudanças microestruturais do material, conseqüentes do aquecimento e do resfriamento inerentes aos processos de fabricação. De fato, os polímeros semicristalinos têm seu grau de cristalinidade definido no processo de resfriamento. Isto pois, quanto maior for o tempo de resfriamento, maior será o período para formação dos cristalitos³ em temperaturas entre T_g e T_f . Em contrapartida, maiores taxas de resfriamento induzem estruturas pre-

³ Domínios cristalinos dos polímeros, dos quais estão interconectados com as regiões amorfas (CANEVAROLO, 2006).

dominantemente amorfas e particularmente distintas no que diz respeito a propriedades (CANEVAROLO, 2006; MANRICH, 2005). Na maioria dos processos aditivos, a taxa de resfriamento do material pode ser controlada diretamente pela velocidade de deposição, que consiste em um dos vários parâmetros de processamento.

A técnica FDM, assim como as demais, também é diretamente influenciada pelos comportamentos reológicos dos materiais (CICALA et al., 2018; MOHAMED; MASOOD; BHOWMIK, 2015). No caso, conhecer a faixa ideal de viscosidade pode ajudar a prever se a matéria-prima é processável nas condições do projeto. Tal entendimento pode evitar, por exemplo, com que haja falhas de deposição, entupimento de bico de extrusão e flambagem do filamento polimérico (ARMENTA; SALAZAR-CRUZ, 2018; TLEGENOV; HONG; LU, 2018). Essa última ocorre especialmente devido ao aumento demasiado da viscosidade do material em processamento. O filamento atua como um pistão que conduz o processo de extrusão. Se o material não for extrudado a uma taxa de cisalhamento suficiente, haverá uma contrapressão que fará com que o filamento dobre, interrompendo a condução do processo. Outra consideração importante é sobre o inchamento de extrudado, que consiste em um fenômeno recorrente em processos tradicionais de manufatura de polímeros e atualmente bastante relatado em estudos sobre MA. Trata-se do aumento das dimensões do perfil extrudado devido à recuperação elástica do material ao sair da matriz (BRETAS; D'ÁVILA, 2005; MANRICH, 2005). A consequência é o diâmetro do extrudado superior ao do bico de extrusão, afetando diretamente a resolução de fabricação do processo aditivo (ARMENTA; SALAZAR-CRUZ, 2018).

Os exemplos mostram que o sucesso da fabricação aditiva depende do conhecimento do comportamento reológico do material, bem como da seleção adequada dos parâmetros de processamento. A Figura 8 indica os principais parâmetros inerentes ao processo FDM, os quais podem ser categorizados como os de trabalho, de orientação e os de condições de temperatura. Os parâmetros de trabalho contemplam aqueles relacionados às características de deposição do material e a geometria do modelo em fabricação. Dentre esses cita-se a velocidade de extrusão e de retração, vazão, *air gap*, espessura e altura da camada, etc. Os parâmetros de orientação são aqueles associados à direção de construção do modelo; isto é, ao caminho de deposição do material. Por fim, os parâmetros de temperatura estão relacionados às temperaturas de extrusão, do ambiente de processamento e da mesa de fabricação (POPESCU et al., 2018).

Atualmente, diversos estudos se concentram na análise dos parâmetros de processamento a fim de aumentar o padrão de qualidade do processo. Zhang et al. (2017) desenvolveram um modelo capaz de simular a influência da velocidade de extrusão e da variação térmica no desempenho de produção. Ortega et al. (2016), por sua vez, aplicaram modelos reológicos para fornecer as melhores condições de temperatura e tensão de cisalhamento em processos de deposição fundida de biomateriais (SANCHEZ et al.,

2019). Em outra linha de pesquisa, trabalhos buscam mitigar a limitação dos processos de impressão 3D, avaliando a viabilidade de novos materiais e, portanto, novas configurações. Por exemplo, [Tian et al. \(2016\)](#) propuseram modificação do método FDM para a fabricação de compósitos termoplásticos reforçados com fibra contínua. Nessa pesquisa, o filamento de PLA e a fibra de carbono foram alimentados simultaneamente ao equipamento e o desempenho de processamento foi otimizado acerca dos parâmetros de temperatura e pressão. Definidos os valores ótimos das configurações do sistema, foi possível fabricar amostras com 27% de teor de fibra, obtendo propriedades mecânicas suficientes para aplicação em estruturas aeroespaciais.

Figura 8 – Principais parâmetros de processamento do processo FDM.

Fonte: Adaptado de [Hu et al. \(2016\)](#).

Em relação aos polímeros ditos tradicionais, PLA, ABS e PETG, os parâmetros de processos da modelagem de deposição fundida também se diferem demasiadamente. Em estudos de [Santana et al. \(2018\)](#), comprovou-se que o PETG, quando comparado ao PLA, possui maior estabilidade térmica, visto que seu comportamento reológico foi pouco afetado pelas variações de temperatura inerentes ao processo. Isto ocorre basicamente graças ao fator cristalinidade desses materiais, uma vez que o PETG é um polímero totalmente amorfo, com uma ampla faixa de amolecimento ([MANRICH, 2005](#)). [Sanchez et al. \(2019\)](#) avaliaram a qualidade de modelos de PLA e ABS impressos em diferentes velocidades de deposição, isto é, em diferentes taxas de cisalhamento. Os resultados mostraram defeitos mínimos em modelos feitos em ABS, mesmo quando fabricados em altas velocidades de deposição. Por outro lado, o PLA se revelou um material muito mais sensível a qualquer variação de taxa

de cisalhamento, verificado pelos diversos defeitos resultantes do aumento da velocidade de deposição. Nesse contexto, foi comprovado que o fator elasticidade do polímero aplicado em técnicas FDM interfere diretamente na qualidade de fabricação. Em experiências de laboratório para práticas do presente trabalho, foi constatada a necessidade de ativação da retração dos filamentos de PLA e PETG durante a movimentação vertical do bico de extrusão. Isto devido ao comportamento viscoso desses materiais que, possivelmente afetados pela absorção de umidade, geram gotejamento após a deposição. Quanto ao ABS, atestou-se que os cuidados na atribuição da temperatura da mesa de construção do equipamento são indispensáveis, haja vista o coeficiente de contração maior verificada para esse material. A Tabela 2 exibe os principais parâmetros de processamento para filamentos de PLA, PETG e ABS utilizados em FDM, os quais foram atribuídos em testes de laboratório.

Tabela 2 – Principais parâmetros de processamento de filamentos poliméricos de PLA, ABS e PETG para a FDM.

Parâmetros de Processamento	PLA	ABS	PETG
Temperatura de Extrusão (°C)	210	225	250
Temperatura da Plataforma (°C)	70	100	85
Velocidade de Deposição (mm/s)	45	45	25
Velocidade de Retração (mm/s)	40	10	40

Fonte: Autoria Própria.

Outra significativa abordagem de pesquisa consiste na avaliação da influência dos aditivos de coloração dos filamentos comerciais, sob o comportamento reológico do material em processamento. [Wittbrodt e Pearce \(2015\)](#) demonstraram por difração de raios-x (DRX) que o percentual de cristalinidade de filamentos de PLA dependem da coloração. Os resultados indicam que o PLA natural (sem adição de corante) contém a menor porcentagem de regiões cristalinas (0,93%), ao passo que o PLA branco apresentou os maiores valores percentuais (5,05%). O grau de cristalinidade afeta a temperatura crítica de impressão, de modo a ser necessário modificar as condições térmicas para filamentos de mesmo material, mas de colorações diferentes. Sob outra perspectiva, [Spina \(2019\)](#) avaliou os efeitos da pigmentação de filamentos comerciais de PLA (natural e preto) nos dados de viscosidade em processo FFF. De acordo com os resultados, devido a sua menor viscosidade e elasticidade, o PLA natural apresentou maior propensão ao fluxo e gotejamento após a deposição do material. Consequentemente, em processos onde este filamento é aplicado, é indispensável a ativação do parâmetro de retração para minimizar os erros de impressão. Conclui-se, portanto, que diversos fatores como pigmentação, aditivação e história de processamento da matéria-prima podem ser determinantes para a definição dos parâmetros

de processamento de um mesmo material, destinado aos processos aditivos.

2.2 Espectroscopia no Infravermelho

Os primeiros estudos de apoio para o entendimento sobre radiação infravermelha foram publicados por Sir Isaac Newton (1643-1727), dos quais comprovaram que a luz solar pode ser decomposta em diferentes cores através de um prisma (FARA, 2015). Esses trabalhos publicados em 1672, serviram como base científica para obras futuras, como as desenvolvidas pelo astrônomo alemão-inglês Friedrich Wilhelm Herschel (1738-1822) (OLIVEIRA; SILVA, 2014). Em 1800, Herschel, envolvido com suas observações astronômicas e com o aprimoramento dos instrumentos, buscou estudar as propriedades físicas da radiação eletromagnética na região do visível (OLIVEIRA; SILVA, 2014). Tendo em vista que a luz solar, além de ser fonte de calor, também contém todas as cores do espectro, procurou-se descobrir quais eram as cores responsáveis pelo aquecimento dos objetos. Herschel observou um aumento de temperatura, a medida em que se movia o termômetro de violeta para o vermelho no espectro criado pela luz do sol atravessando o prisma. Em conclusão, descobriu-se que a temperatura mais quente ocorria além da luz vermelha e que, portanto, a radiação que causou tal aquecimento não era visível (BURNS; CIURCZAK, 2008). Sendo assim, Herschel comprovou a existência de formas de luz que não podem ser observadas pelo ser-humano abrindo a possibilidade de novas investigações acerca de outras faixas espectrais, tais como a ultravioleta e o infravermelho próximo, médio e distante (SIESLER et al., 2008).

A espectroscopia no infravermelho é reconhecida por ser uma análise que apresenta a impressão digital de algumas substâncias orgânicas. Isto é possível graças aos dados coletados pela absorbância em uma frequência particular, característico do grupo funcional, presente no composto químico analisado (SIESLER et al., 2008). O primeiro estudo envolvendo a identificação de substâncias puras e grupos funcionais, fazendo-se uso da radiação infravermelho, foi realizado pelo físico norte-americano William Coblentz, em 1900 (PASQUINI, 2018). Por esse motivo, a espectroscopia no infravermelho oferece oportunidades analíticas quase que ilimitadas para muitas áreas de produção e controle de qualidade, sendo aplicada atualmente em indústrias farmacêuticas, de alimentos, têxteis, além de laboratórios analíticos e indústrias petroquímicas (NAZARENKO; RODIN; SHPIGUN, 2019; PANTOJA et al., 2017; ZAREEF et al., 2020; ZHOU et al., 2015).

2.2.1 Fundamentos Teóricos

A espectroscopia é um conjunto de técnicas que analisa a interação de ondas com a matéria, isto é, corresponde ao estudo interpretativo de espectros de emissão e absorção de radiações eletromagnéticas produzidas, com base nas diferentes frequências do espectro eletromagnético (SIESLER et al., 2008). A radiação infravermelha se divide em três regiões:

o infravermelho próximo (NIR, do inglês *Near Infrared*), do qual compreende a faixa de número de onda de 13.330 a 4.000 cm^{-1} ; o infravermelho médio (MID, do inglês *MIR, Middle Infrared*), na faixa de 4.000 a 400 cm^{-1} e, por fim, o infravermelho distante (FIR, do inglês *Far Infrared*), do qual abrange a região de 400 a 10 cm^{-1} (PASQUINI, 2018; SIESLER et al., 2008; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009).

A incidência da radiação eletromagnética em um material pode gerar diferentes fenômenos de interação entre a radiação e a amostra. No caso dos mecanismos de caracterização dos compostos no infravermelho, tem-se a absorção, a transmissão, a reflexão e refração da luz incidente (BURNS; CIURCZAK, 2008; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009). No processo de absorção, as frequências de radiação no infravermelho são absorvidas de modo equivalente às frequências vibracionais naturais da molécula (PAVIA et al., 2015). Esse processo está limitado as espécies moleculares que possuem pequenas diferenças de energia entre vários estados de movimento vibracional ou rotacional. Nesse sentido, para que o fenômeno de absorção ocorra, é necessário com que as moléculas do material em análise tenham um momento dipolo elétrico causado por tais estados de movimento (SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009). As ligações simétricas como as do H_2 e Cl_2 , por exemplo, não absorvem radiação no infravermelho (PAVIA et al., 2015). A incidência da radiação no infravermelho por reflexão pode ocorrer por reflexão difusa, reflexão especular, reflexão interna e reflexão total atenuada (BURNS; CIURCZAK, 2008). No caso dos espectros obtidos via espectrometria NIR, a interação por reflexão difusa é a mais proeminente. Consiste em um processo onde a radiação penetra na camada superficial das partículas e excita os movimentos vibracionais das moléculas do material sólido. A energia refletida difusamente pela amostra carrega informações suficientes para a obtenção dos espectros na região do infravermelho (FOLHA, 2014; PASQUINI, 2003).

As vibrações moleculares podem ser classificadas em deformações axiais ou estiramentos e deformações angulares ou dobramentos; tais vibrações são denominadas vibrações fundamentais. Os estiramentos são caracterizados pelas transições da distância internuclear dos átomos, enquanto as deformações angulares consistem nas alterações dos ângulos de ligação de um grupo de átomos em relação ao restante da molécula (FORATO et al., 2010). Dentro dessas categorias há algumas variações mais complexas dos modos de vibrações, tais como os estiramentos simétricos e assimétricos e deformações angulares simétricas e assimétricas no plano e fora do plano. Normalmente, as vibrações de estiramento assimétrico ocorrem com maior frequência do que vibrações simétricas, assim como vibrações de estiramento em geral são mais frequentes do que as vibrações de dobramento (PAVIA et al., 2015; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009). A Figura 9 mostra as vibrações moleculares gerados pela incidência da radiação no infravermelho.

Figura 9 – Vibrações moleculares gerados por radiação no infravermelho: (A) vibrações de estiramento e (B) vibrações de dobramento.

Fonte: Adaptado de Pavia et al. (2015).

Ao longo do tempo, diferentes teorias foram propostas para explicar o comportamento vibracional das moléculas. O modelo clássico de esfera-mola se destaca como a descrição mais didática sobre a interação da radiação no infravermelho e a matéria (PASQUINI, 2003). De acordo com este modelo, uma molécula diatômica pode ser aproximada a um sistema de duas massas esféricas (átomos) conectadas a uma mola de força elástica constante (ligação atômica). A molécula só estará em posição estática caso submetida a uma temperatura de zero absoluto (0 °K). Para qualquer outra condição térmica, ocorre o movimento vibracional representado pelo alongamento da mola, com um limite máximo e mínimo (PASQUINI, 2003; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009).

De acordo com Pasquini (2003), Pavia et al. (2015) e Skoog, Holler e Crouch (2009), o modelo clássico de esfera-mola pode ser estudado algebricamente como um conceito de oscilador harmônico simples para uma molécula diatômica. A energia do sistema (E) é calculada mediante a Lei de Hooke, como segue:

$$E = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (2.1)$$

Na equação 2.1, h consiste na constante de Planck, k a constante de força e μ é a

massa reduzida das duas massas esféricas (m_1 e m_2), calculada pela Equação 2.2.

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.2)$$

Por fim, a vibração molecular pode ser descrita ao considerar o sistema equivalente a um oscilador harmônico, tendo a energia potencial (V) em função do deslocamento dos átomos (x), como segue:

$$V = \frac{1}{2} k x^2 \quad (2.3)$$

Geometricamente, a Equação 2.3 descreve uma parábola como apresentado na Figura 10-A, na qual está descrito o comportamento da energia potencial (V) em função do deslocamento atômico a partir da posição de equilíbrio. Verifica-se que a energia potencial (V) é mínima na posição de equilíbrio e é máxima quando a mola é solicitada na amplitude máxima (PASQUINI, 2003). Eventualmente, observou-se que o modelo harmônico, apesar de expor uma visão didática do sistema de vibração, apresenta limitações quando aplicado na descrição dos movimentos vibracionais moleculares. Isto, pois este avalia apenas as energias contínuas em sua teoria e não as energias discretas, presentes nos sistemas moleculares. Uma solução foi obtida com o modelo de oscilador anarmônico, que considera a relação de repulsão quando dois átomos se aproximam e o consequente decréscimo da energia potencial (V) com o distanciamento interatômico Figura 10-B (FOLHA, 2014; PASQUINI, 2003).

Figura 10 – Representação esquemática do harmônico: (A) potencial harmônica e (B) potencial anarmônica.

Fonte: Adaptado de Pasquini (2003).

2.2.2 Espectroscopia do Infravermelho Próximo

A faixa de interação energética da espectroscopia do infravermelho próximo (NIR) é o suficiente para promover o estado vibracional mais excitado das moléculas e inferiores aos valores típicos necessários para a excitação dos elétrons. Assim sendo, os objetivos gerais do uso desta técnica está em investigar amostras, de modo a se obter informações qualitativas e/ou quantitativas resultantes das interações entre as ondas eletromagnéticas no infravermelho próximo com seus constituintes (PASQUINI, 2003). As absorções moleculares mais frequentes na espectrometria NIR são harmônicas de estiramentos das ligações C-H, N-H, S-H ou O-H e bandas de ligação, conforme mostra a Tabela 3 (PASQUINI, 2003; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009).

Tabela 3 – Atribuições de bandas espectrais para as transições vibracionais no NIR.

Região espectral (nm)	Transição vibracional
2200-2450	Combinação de estiramentos C-H
2000-2200	Combinação de estiramentos N-H e O-H
1650-1800	Primeiro sobretom do estiramento C-H
1400-1500	Primeiro sobretom do estiramento N-H e O-H
1100-1225	Segundo sobretom do estiramento C-H
950-1100	Segundo sobretom do estiramento N-H e O-H
850-950	Terceiro sobretom do estiramento C-H
775-850	Terceiro sobretom do estiramento N-H e O-H

Fonte: Folha (2014).

As análises realizadas na região do infravermelho próximo, em geral, são rápidas (duram menos de um minuto por amostra), possuem aplicações quase universais, não geram subprodutos tóxicos, apresentam simplicidade na preparação de amostras, além de ser um método não destrutivo e não invasivo (adequado para uso *in-process*). Ademais, para essa região, é possível promover medidas de amostras em todos os estados físicos, desde o estado gasoso, líquido e sólido, até em amostras semissólidas, pastas e géis (SIESLER *et al.*, 2008; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009). De início, a principal desvantagem técnica do uso do NIR foi a obtenção de espectros de complexa leitura e interpretação; isto, principalmente, devido a sobreposição das faixas de absorção. Contudo, o emprego do algoritmo da Transformada de Fourier, de novas e modernas melhorias de espectrofotômetros, assim como o desenvolvimento de softwares para tratamento de dados, tornou esta técnica muito mais acessível para o desenvolvimento de novas aplicações e pesquisas (PASQUINI, 2018).

As principais aplicações da região compreendida da NIR, consistem nas avaliações

de materiais industriais e agrícolas e no controle de processos, destacando as aplicações petroquímicas, medicinais, farmacêuticas e de alimentos (PASQUINI, 2018; SKOOG; HOLLER; CROUCH, 2009). No setor agrícola, a NIR provou ser uma técnica líder quando associada a algoritmos quimiométricos, principalmente quanto ao monitoramento não-destrutivo da qualidade e segurança dos produtos agroalimentares; como exemplo, a triagem de alimentos saudáveis ou não saudáveis ainda no meio produtivo (CORTÉS et al., 2019; GRASSI; ALAMPRESE, 2018). No âmbito da medicina a espectroscopia de infravermelho próximo é amplamente usada, por exemplo, para analisar a função cerebral, a partir do monitoramento do fluxo sanguíneo (SAKUDO, 2016). Por sua vez, na indústria petroquímica, referências mostram o avanço da técnica não somente na avaliação de adulteração de óleos e combustíveis, mas também na análise da qualidade do petróleo bruto extraído em diferentes locais (DOUGLAS et al., 2018). Por fim, em relação a aplicação da NIR no contexto da engenharia de materiais, boa parte das pesquisas abordam o seu uso como dispositivo para separação de materiais reciclados (HUCK, 2016). Contudo, atualmente tem-se presenciado diversos novos estudos que contemplam temas como degradação polimérica, avaliação de nanomateriais e identificação de resíduos plásticos (ALASSALI; FIORE; KUCHTA, 2018; JIANG et al., 2019; ZHU et al., 2019).

Os avanços da instrumentação, concedidos principalmente com o desenvolvimento da miniaturização de instrumentos analíticos, proporcionaram aos dispositivos de espectrometria no infravermelho próximo a facilidade de manipulação e maior acessibilidade (PASQUINI, 2018; SORIANO-DISLA et al., 2017). A última década testemunhou o desenvolvimento de vários aparelhos NIR portáteis, alguns deles extremamente pequenos, leves e de baixo custo que estão transformando as diretrizes de aplicação da técnica, permitindo medições em campo, no ponto de entrega, produção, venda, compra e uso. Dentre as diversas variações de espectrofotômetros portáteis atuais, destacam-se os que dispõem de modernos sistemas micro-eleto-mecânicos (MEMS), os quais possuem fontes de radiação interna, são alimentados por bateria e oferecem modernas tecnologias de troca de dados digitais sem fio, como o *Bluetooth*® (PASQUINI, 2018). Tais dispositivos estão sendo examinados cientificamente quanto ao desempenho de suas aplicações em setores onde os aparelhos convencionais de bancadas são empregados. Nesse sentido, Soriano-Disla et al. (2017) estudaram quatro espectrofotômetros NIR portáteis aplicados na avaliação das propriedades do solo. Os resultados mostraram que os dispositivos portáteis apresentaram desempenhos semelhantes aos instrumentos convencionais, quando comparados a uma mesma faixa espectral. Outros trabalhos comprovam o desempenho eficiente, indicando resultados comparáveis as técnicas convencionais mais robustas (MODROÑO et al., 2017; PEZZEI et al., 2017).

Os instrumentos miniaturizados atualmente comercializados ainda necessitam de uma avaliação cuidadosa quanto a reprodutibilidade entre as unidades e estabilidade ao longo prazo (PASQUINI, 2018). No entanto, a maior acessibilidade e democratização da

tecnologia, somada a qualidade e precisão de aquisição dos dados, permitem com que haja o aumento do interesse comercial da técnica, ampliando as possibilidades e níveis de aplicações.

2.2.2.1 DLP® NIRscan™ Nano

O DLP® NIRscan™ Nano consiste em um espectrofotômetro de alto desempenho e portátil, desenvolvido pela Texas Instruments®, capaz de efetuar medidas na região do infravermelho próximo na faixa entre 900 a 1700 nm, com uma resolução espectral de 10 nm e tempo de leitura de 20 segundos (GELABERT et al., 2016; PASQUINI, 2018). O processamento digital de luz (DLP, do inglês *Digital Light Processing*), aplicado ao equipamento, assegura diversas vantagens como maior desempenho e maior relação sinal e ruído (SNR, do inglês *Signal-to-noise ration*), menor custo do sistema, arquitetura mecânica robusta, ótimo sinal de captura etc. (GELABERT et al., 2016). Trata-se de uma tecnologia também concebida pela Texas Instruments®, na qual a imagem é criada mediante a uma matriz de espelhos microscópicos, que permite a geração rápida e flexível de padrões de luz (WAGNER et al., 2012). As imagens geradas são organizadas sobre um dispositivo digital de micro espelhos (DMD, do inglês *Digital Micromirror Device*), que atua como um modulador da radiação, incidindo diferentes comprimentos de ondas no detector InGaAs (ponto único) com alta velocidade e precisão (GELABERT et al., 2016). Além dessas vantagens, o DLP® NIRscan™ Nano suporta conexões *Bluetooth* 4.0 e opera à bateria em modo independente, o que permite maior mobilidade e o emprego remoto do dispositivo (PASQUINI, 2018). .

De modo geral, o mecanismo óptico do espectrofotômetro DLP NIRscan Nano é composto por uma fonte de radiação de duas lâmpadas de filamento de tungstênio de banda larga, que emite radiação no infravermelho próximo para a amostra disposta em uma janela de safira. A amostra absorve uma quantidade específica de radiação NIR e reflete difusamente a luz não absorvida ao sistema. A quantidade de luz absorvida em cada comprimento de onda depende da composição molecular do material sendo, portanto, sua impressão digital química. A radiação não absorvida é coletada pelo sistema óptico por uma fenda de entrada e então é colimada pelo primeiro conjunto de lentes, passando por um filtro que bloqueia comprimentos de onda menores do que 885 nm. A radiação então atinge uma grade reflexiva que, em combinação com um conjunto de lentes focalizadoras, a decompõem em seus comprimentos de ondas constituintes. O dispositivo digital de microespelhos (DMD) recebe as informações e reflete um comprimento de onda de cada vez para o condensador, que direciona essa radiação até o detector InGaAs (GELABERT et al., 2016; PASQUINI, 2018).

Atualmente, modernos dispositivos portáteis de infravermelho próximo estão sendo desenvolvidos tendo como base o sistema integrado do DLP® NIRscan™ Nano. A evolução

técnica de tais equipamentos é evidente. Com o rápido progresso da Internet das Coisas (IoC) e da computação em nuvem, por exemplo, novos aplicativos de armazenamentos de dados vêm sendo criados, conferindo ao aparelho mais confiabilidade e independência. Esse desenvolvimento e propagação de sistemas sofisticados e modularizados amplia as possibilidades de uso e também promove a redução dos custos de operação (WANG et al., 2018). A Figura 11 descreve o sistema baseado na tecnologia DLP aplicada para o dispositivo DLP® NIRscan™ Nano.

Figura 11 – Tecnologia DLP aplicada ao dispositivo DLP® NIRscan™ Nano.

Fonte: Adaptado de Gelabert et al. (2016).

2.3 Aprendizado de Máquinas

O conceito de aprendizado de máquinas (AM), ou *machine learning*, se fundamenta sob a própria perspectiva de aprendizagem. A maior parte dos autores definem a aprendizagem como sendo um processo de aperfeiçoamento do desempenho a partir das experiências adquiridas (BATISTA, 2019). Segundo Marsland (2015), o processo de aprendizagem envolve as etapas de recordar, se adaptar e generalizar. No contexto de máquinas, significa que a partir de um padrão anteriormente visto, os computadores seriam capazes de adaptar suas ações e ainda, identificar as similaridades entre as diferentes

situações. Outra descrição é dada por [Mitchell \(1997\)](#) em que o termo “aprender” se associa diretamente ao aperfeiçoamento mediante a experiência. Precisamente, o autor define: “Um programa aprende a partir de experiências (E), com respeito a alguma classe de tarefas (T) e medida de desempenho (P), se o desempenho de tarefas em (T), medido por (P), melhora com a experiência (E).”.

Exemplo prático desta descrição são os algoritmos com a capacidade de previsão de ações e habilidades de estratégia como os aplicados em jogos de xadrez. No processo de aprendizado, o programa pode aperfeiçoar a tarefa (T) de prever e realizar as melhores jogadas, a partir de uma medida de desempenho (P) baseada nos dados previamente inseridos sobre as possíveis condições de jogo (E). Tendo aprendido, o sistema é capaz de usar as mesmas estratégias em situações similares; isto é, ter inferência indutiva e capacidade de generalização ([MARSLAND, 2015](#)). Fundamentado nesses conceitos, há pouco mais de vinte anos, um computador da IBM® denominado *Deep Blue* venceu o então campeão mundial de xadrez Garry Kasparov, dando ao público uma primeira percepção sobre a inteligência artificial e a capacidade de aprendizado de máquinas ([HASSABIS, 2017](#)).

Atualmente, o AM se tornou uma concepção não somente vinculada a inteligência artificial, mas também já considerada uma ciência multidisciplinar. Consiste em um ramo das ciências da computação que emprega teorias da estatística, tecnologia da informação, matemática, física, neurociência, biologia, etc. ([MARSLAND, 2015](#); [SARKAR](#); [BALI](#); [SHARMA, 2017](#)). Dentre as atuais aplicações, destacam-se os sistemas de automação de atividades como os programas de detecções e de invasões de redes, reconhecimentos óticos e sonoros, controle não assistido de veículos, diagnósticos médicos e processos de fabricação inteligentes.

O AM possui diversos algoritmos, técnicas e metodologias que podem ser empregadas para criar modelos capazes de resolver problemas reais. Cada método de aprendizado deve ser aplicado conforme as especificações e o contexto do problema. Segundo classificação referenciada por [Sarkar, Bali e Sharma \(2017\)](#), os algoritmos de AM são divididos em três categorias de aspectos distintos: os baseados no grau de supervisão humana, na forma de generalização e na capacidade de aprendizado continuado (Figura 12). Dentre esses, os aprendizados supervisionados e o não supervisionado são os mais proeminentes e os mais aplicados atualmente. Nesse sentido, considere um conjunto de exemplos e respostas corretas que podem ser inseridos ao algoritmo, de modo que este possa aprender um conceito específico. No aprendizado supervisionado este conjunto de exemplos – também denominado conjunto de treinamento – são fornecidos para que o algoritmo seja capaz de aprender o conceito e generalizar as respostas corretas para futuras entradas. No aprendizado não supervisionado, por sua vez, o vetor de respostas não é fornecido para supervisionar a análise e assim, o programa busca aprender o conceito ao identificar

similaridades entre os dados do conjunto de treinamento (BATISTA, 2019; LUXBURG; SCHÖLKOPF, 2011; MARSLAND, 2015). A Figura 12 mostra as diversas classificações possíveis para os métodos de AM.

Figura 12 – Classificações de métodos de aprendizado de máquinas (AM).

Fonte: Autoria Própria.

Os métodos supervisionados e não supervisionados são subdivididos conforme os vetores de saída resultantes do processo (SARKAR; BALI; SHARMA, 2017). Os problemas de classificação correspondem ao tipo de aprendizado supervisionado mais discutidos e abordado em pesquisas relacionadas ao AM (BATISTA, 2019). Consistem em algoritmos capazes de determinar a classe a que os vetores de entradas pertencem, baseados no aprendizado realizado com o conjunto de treinamento. Em essência, os classificadores são capazes de encontrar padrões que possam ser usados como forma de distinção e separação das diferentes classes. O ponto mais importante sobre o problema de classificação é que ele é discreto, ou seja, cada dado de entrada pertence a exatamente uma classe e o conjunto das classes cobre todo o espaço de saída (MARSLAND, 2015). Conceitualmente, o algoritmo de classificação pode ser explicado considerando os objetos de entrada X e os de saída Y , sendo a classificação descrita como $f : X \rightarrow Y$. O objetivo é desenvolver um algoritmo de classificação que tome como entrada exemplos de treinamento e produza como saída um classificador f (BATISTA, 2019; LUXBURG; SCHÖLKOPF, 2011). Para tanto, o processo de AM deve cumprir um fluxo de atividades que determinará a eficácia do funcionamento do modelo.

A Figura 13 apresenta o fluxo de atividades descrito de acordo com Marsland (2015), o qual expõe seis etapas de desenvolvimento do AM: 1) coleta de dados; 2) análise

exploratória; 3) engenharia de atributos; 4) escolha do algoritmo; 5) determinação de parâmetros; 6) treinamento e 7) avaliação. Em resumo, ao longo do processo, deve-se coletar uma quantidade considerada de dados, entendê-los e encontrar nestes os recursos úteis para o problema em questão. Isto requer conhecimento prévio sobre todas as variáveis envolvidas, o que torna necessário realizar a análise exploratória dos dados e, posteriormente, a engenharia de atributos. Em seguida, tendo definido o problema e com um conjunto adequado de dados, o algoritmo de AM é selecionado. Nessa etapa, é fundamental para muitos desses modelos a configuração manual de alguns parâmetros, como o número de iterações, número de camadas de rede ou tolerâncias. O treinamento então pode ser realizado, de modo a empregar recursos computacionais para a construção do classificador. Na etapa final, promove-se um ciclo de testes com o objetivo de se verificar a precisão de leitura dos dados, compreensão e generalização das ações. Para isso, uma parcela de dados do conjunto de treinamento é separada para esta avaliação do modelo (BATISTA, 2019; LUXBURG; SCHÖLKOPF, 2011; MARS LAND, 2015). As metodologias e as peculiaridades de cada etapa do processo de aprendizado supervisionado de máquinas serão discutidas nas próximas seções.

Figura 13 – Fluxograma de processos do aprendizado de máquinas (AM).

Fonte: Adaptado de Sarkar (2018).

2.3.1 Análise Exploratória

A análise exploratória equivale a primeira etapa do processo de AM dos dados coletados, na qual as informações serão melhor explicadas por técnicas estatísticas e modelos gráficos. Com base nos resultados deste processo, os comportamentos, padrões e tendências dos dados são caracterizados, tornando-se úteis para o processo de extração de conhecimento para o modelo (BATISTA, 2019). Segundo Sarkar, Bali e Sharma (2017), na etapa de análise exploratória, o analista deve explorar, descrever e visualizar os recursos; selecionar recursos e subconjuntos de dados importantes; realizar testes de hipóteses; analisar correlações e associações de dados e identificar dados ausentes. Em relação aos dados espectrais, as técnicas da Quimiometria podem auxiliar sobremaneira o

desenvolvimento da análise descritiva.

De acordo com a União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC, do inglês *International Union of Pure and Applied Chemistry*) a Quimiometria é a aplicação de estatística à análise de dados químicos (de química orgânica, analítica ou química medicinal) e o planejamento de experimentos químicos e simulações (MCNAUGHT, 1997). A Quimiometria é a disciplina química que usa a matemática, a estatística e a lógica formal para planejar e otimizar os procedimentos experimentais, extrair o das informações relevantes dos dados e obter conhecimento sobre os sistemas químicos (FERREIRA, 2014).

Graças ao desenvolvimento da química teórica e, posteriormente, dos instrumentos eletrônicos e óticos, a química evoluiu e hoje já se estendeu e se consolidou ao nível computacional. Atualmente é possível criar, via softwares, simulações dinâmicas moleculares, planejar e verificar variações de reações químicas, relacionar propriedades moleculares e estruturais e calcular métodos estatísticos complexos para a extração de informações relevantes de um número elevado de dados, como os de espectroscopia. Vários pacotes computacionais comerciais e de domínio público estão disponíveis para aplicação em Quimiometria. Dentre esses destacam-se o Unscrambler® X (CAMO Inc.), SIMCA® (Umetrics Inc.) e PLS Toolbok® (Eigenvector Inc.) (CORNEJO-BÁEZ et al., 2020; FERREIRA, 2014; MARK, 2018).

Em geral, os dados resultantes da espectroscopia contêm tanto informações substanciais provenientes dos atributos do material, quanto informações ambientais e instrumentais que podem afetar a efetividade de análise. Em razão disso, os dados espectrais devem ser pré-tratados de modo a aprimorar os sinais informativos dos componentes intrínsecos aos materiais e minimizar os sinais não-informativos. Nesse sentido, os métodos pré-tratamento derivativos são extremamente pertinentes e, portanto, comumente usados para melhorar a resolução dos espectros ao aumentar a ordem da derivada. Tal procedimento, contudo, reduz a força dos sinais espectrais, fazendo-se necessária uma avaliação prévia dos parâmetros de derivação aplicados aos espectros (TONG et al., 2015; ZHENG et al., 2015). Dentre as técnicas de pré-tratamento espectral amplamente utilizadas, a suavização por Savitzky-Golay (SG) corresponde a de maior destaque (TONG et al., 2015). Trata-se de um método capaz de eliminar os ruídos dos dados, sobreposições de bandas, desvios da linha base e outros efeitos prejudiciais na relação sinal-ruído (CHEN et al., 2013; TONG et al., 2015). Para tanto, o SG promove a suavização dos dados por método polinomial dos mínimos quadrados; isto é, determina uma janela j amostras para ajustar o valor suavizado por regressão polinomial de uma ordem específica (SCHAFFER, 2011). Os detalhes dos conceitos matemáticos relativos ao método de suavização por SG serão melhor descritos na seção 2.3.1.1 deste capítulo.

A etapa de pré-processamento e a aplicação de métodos de suavização são fundamentais para o sucesso de análises estatísticas, uma vez que permite a eliminação de

informações não relevantes, tornando a matriz de dados melhor condicionada para a avaliação (SOUZA; POPPI, 2012). Dentre as análises estatísticas mais importantes, destaca-se a análise multivariada (MVA, do inglês *Multivariate Data Analysis*), que consiste em uma ferramenta da Quimiometria capaz de encontrar padrões, influências e relações entre várias variáveis. Em termos técnicos, a análise multivariada se refere a todas as técnicas estatísticas que simultaneamente organizam, analisam e determinam padrões de múltiplas medidas de dados (HAIR, 2009). Os métodos de reconhecimento de padrões garantem, ao organizar tendências e agrupamentos em um determinado conjunto de amostras, que os resultados sejam melhor interpretados e as melhores decisões sejam tomadas. Esses métodos quimiométricos estão reunidos em dois grupos distintos: os métodos ditos supervisionados e os métodos não supervisionados de reconhecimento de padrões (CORNEJO-BÁEZ et al., 2020; FERREIRA, 2014).

Nos métodos supervisionados, cada amostra analisada provém de uma classe preestabelecida e essa informação é utilizada durante a construção dos modelos de classificação. Os métodos não supervisionados, por sua vez, não requerem nenhum conhecimento prévio a respeito da classificação das amostras. Nesse caso, os agrupamentos ocorrem naturalmente conforme as informações que estão contidas nos dados experimentais. Ambos os métodos, no entanto, se baseiam na validade das mesmas suposições: 1) as amostras do mesmo tipo são semelhantes; 2) existem diferenças significativas entre diferentes tipos de amostras e 3) o conjunto de medidas disponíveis é capaz de detectar essas semelhanças e diferenças (FERREIRA, 2014).

Em resumo, os métodos supervisionados de reconhecimento de padrões classificam os dados a partir de modelos construídos com base a uma predefinição de classe. Portanto, as amostras descritas por um conjunto de medidas experimentais são classificadas conforme uma propriedade de interesse. Como exemplo de técnica estatística que aplica esses conceitos tem-se a Análise Discriminante Linear (LDA, do inglês *Linear Discriminant Analysis*). No que se refere aos métodos não supervisionados de reconhecimento de padrões, estes ocorrem sem a construção de uma regra preditiva e, assim, são conhecidas como métodos de análise exploratória de dados. Como exemplo de técnica baseada neste contexto, tem-se a Análise de Componentes Principais (PCA, do inglês *Principal Components Analysis*) (CORNEJO-BÁEZ et al., 2020; FERREIRA, 2014). A aplicação dos métodos estatísticos vinculados à Quimiometria é de suma importância no processo de desenvolvimento de um algoritmo fundamentado na classificação de materiais, tendo em vista a necessidade da confirmação prévia das diferenças estatísticas presentes no conjunto de amostras. No processo de AM, esta verificação ocorre na etapa de análise exploratória onde os dados são sintetizados por esses métodos estatísticos, bem como por técnicas gráficas que permitem a compreensão sobre o padrão e as tendências dos dados (BATISTA, 2019).

2.3.1.1 Savitzky-Golay (SG)

A qualidade dos dados submetidos a técnicas de aprendizado de máquinas e inteligência artificial é fundamental para o êxito do processo, uma vez que a aplicação de um *dataset* inconsistente pode interferir fatalmente na capacidade de predição do modelo proposto. Nesse sentido, torna-se essencial adicionar uma etapa de tratamento ou normalização dos dados no fluxo de atividades do aprendizado de máquinas. Conforme descrito anteriormente, o objetivo do pré-tratamento de dados é reduzir as variações indesejáveis que não foram eliminadas no decurso de coleta, mas podem influenciar nos resultados estatísticos finais e no desempenho de classificação (FILHO et al., 2019). De acordo com Ferreira (2014), a escolha e aplicação de algum método de transformação de dados tem de ser pautada na compreensão das informações finais desejadas, bem como em uma razão de uso específica e justificada. No que concerne a tratamento de dados espectrais, as técnicas de suavização (ou alisamento) correspondem a procedimentos de aplicação rotineira, devido a inevitabilidade da redução de componentes aleatórios aos dados e o consequente aumento da relação sinal/ruído. Também, nesse caso, a suavização é capaz de destacar pequenos picos de absorbância característicos, que muitas vezes estão mascarados pelo alto grau de ruído presente (CHEN et al., 2013; FERREIRA, 2014; TONG et al., 2015).

Por via de regra, as técnicas de suavização consideram uma pequena faixa ou janela de comprimentos de onda, de modo que as suas intensidades são normalizadas em uma única resposta. A definição da janela determina o grau de suavização resultante do tratamento, sendo que quanto maior o tamanho da janela, maior será a quantidade de ruído filtrado. Em contrapartida, o aumento da janela de suavização pode causar a transfiguração do espectro, levando a perda de informações relevantes (FERREIRA, 2014). Por isso, autores recomendam selecionar cuidadosamente o tamanho da janela de comprimentos de onda para que não haja distorção dos dados e perda de resolução (FERREIRA, 2014; RAHMAN; RASHID; AHMAD, 2019; ZIMMERMANN; KOHLER, 2013). As metodologias de alisamento pela média e pela média móvel são tratamento mais proeminentes, assim como algumas variações ainda mais robustas como a suavização por Savitzky-Golay (SG).

O SG é um filtro digital fundamentado no método da média móvel, o qual suaviza os ruídos de dados espectrais por ajuste polinomial. Em síntese, a execução deste ajuste ocorre por mínimos quadrados, especificamente pela convolução dos dados de entrada em uma janela de $2m + 1$ pontos, determinando o valor suavizado do ponto central do conjunto dados por regressão polinomial de grau k . Tal processo se repete até que o valor do polinômio tenha sido calculado em um novo centro e todas as janelas do espectro tenham sido suavizadas. Deste modo, o filtro de SG depende significativamente tanto do número de janelas selecionado, quanto do grau n do polinômio ajustado (FILHO et al., 2019; FERREIRA, 2014).

Exemplificando, considere que um polinômio de grau $n = 2$ e uma janela de tamanho 5 ($m = 2$) seja conveniente para a suavização de um conjunto de dados espectrais (FERREIRA, 2014). A fórmula geral do polinômio a ser ajustado (Equação 2.4) se reduz ao que é ilustrado na Equação 2.5, como segue:

$$x_k = a_0 + a_1k + a_2k^2 + \cdots + a_nk^n, \quad k = -m, \dots, 0, \dots, +m. \quad (2.4)$$

$$x_k = a_0 + a_1k + a_2k^2, \quad k = -2, -1, 0, 1, 2. \quad (2.5)$$

A resposta de cada uma das cinco janelas selecionadas para a suavização é verificada na forma matricial, conforme exibido na Equação 2.6.

$$[x] = [M][a] \quad \therefore \quad \begin{bmatrix} x_{-2} \\ x_{-1} \\ x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

Os valores x_{-2} , x_{-1} , x_0 , x_1 e x_2 são conhecidos por corresponderem aos resultados experimentais de cada ponto da janela. Assim, o ajuste é realizado por regressão polinomial, de modo que os coeficientes a_0 , a_1 e a_2 sejam calculados por quadrados mínimos (Equação 2.7), resultando nas expressões dadas pela Equação 2.8.

$$\hat{a} = (M^T M)^{-1} M^T x. \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{35}(-3x_{-2} + 12x_{-1} + 17x_0 + 12x_1 - 3x_2), \\ a_1 &= \frac{1}{35}(-7x_{-2} - 7/2x_{-1} + 0x_0 + 7/2x_1 + 7x_2), \\ a_2 &= \frac{1}{35}(5x_{-2} - 5/2x_{-1} - 5x_0 - 5/2x_1 + 5x_2). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Os coeficientes a_0 , a_1 e a_2 são combinações lineares de x_{-2} , x_{-1} , x_0 , x_1 e x_2 , de forma ser possível o cálculo do valor estimado de cada ponto da janela (Equação 2.9). O resultado desta operação é apresentada pela Equação 2.10 e representa o valor suavizado da primeira janela correspondente ao valor do polinômio no ponto central. Esse procedimento

se repete até que todos os pontos presentes sejam continuamente alisados (FILHO et al., 2019; FERREIRA, 2014).

$$\bar{x} = M\hat{a} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \bar{x}_{-2} &= \frac{1}{35}(31x_{-2} + 9x_{-1} + 3x_0 - 5x_1 - 3x_2), \\ \bar{x}_{-1} &= \frac{1}{35}(9x_{-2} + 13x_{-1} + 12x_0 + 6x_1 - 5x_2), \\ \bar{x}_0 &= \frac{1}{35}(-3x_{-2} + 12x_{-1} + 17x_0 + 12x_1 - 3x_2). \\ \bar{x}_1 &= \frac{1}{35}(-5x_{-2} + 6x_{-1} - 12x_0 + 13x_1 + 9x_2). \\ \bar{x}_2 &= \frac{1}{35}(3x_{-2} - 5x_{-1} - 3x_0 + 9x_1 + 31x_2). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Além do seu emprego como método de suavização, o SG também é bastante adotado como técnica derivativa de correção de linha de base. Em muitos casos, devido as variações do instrumento de medida ou da amostragem, os espectros adquiridos podem apresentar deslocamentos constantes em relação ao eixo das ordenadas, os quais são corrigidos calculando-se suas derivadas. Sendo a primeira derivada de uma constante igual a zero, o resultado dessa operação é um espectro deslocado para o zero de absorbância. Nesse sentido, quando aplicamos a segunda derivada, é possível obter informações sobre a concavidade da curva, o que facilita a localização dos picos de absorbância (FERREIRA, 2014; TONG et al., 2015; ZHENG et al., 2015). O método de SG quando implementado para o cálculo diferencial de um espectro, determina diretamente a derivada de x em relação k do polinômio descrito pela Equação 2.4 (FERREIRA, 2014). Por fim, tem-se como resultado o que se observa na Figura 14, isto é, curvas espectrais com o nível de ruídos reduzido e linha base ajustada.

Figura 14 – Filtragem por SG: (A) suavização do espectro; (B) aplicação da primeira derivada; e (C) aplicação da segunda derivada.

Fonte: Autoria Própria.

2.3.1.2 Análise de Componentes Principais (PCA)

A análise de componentes principais (PCA) foi inventada e reinventada ao longo dos anos (BRO; SMILDE, 2014). A primeira concepção foi desenvolvida por Karl Pearson (1901), e apresentava uma abordagem mais estatística da PCA. Posteriormente, na década de 1930, Harold Hotelling desenvolveu um tratamento geométrico ao método, causando grande inovação aos conceitos de visualização e interpretação de dados (KROONENBERG, 2008). Na atual era de análise computacional, novos modelos estatísticos baseados na PCA foram criados e modernos algoritmos são capazes de aplicar a técnica, de modo a simplificar um conjunto n -dimensional de informações (JOLLIFFE; CADIMA, 2016).

Por definição, a PCA consiste em um método capaz de projetar os dados multivariados em um espaço de menor dimensão, reduzindo assim, a dimensionalidade do espaço original do conjunto dos dados, sem que as relações entre as amostras sejam afetadas (FERREIRA, 2014). Em outras palavras, trata-se de uma ferramenta estatística utilizada para encontrar um grupo de parâmetros que tendem a ser sempre correlacionados, agrupando-os, posteriormente, em um único parâmetro a fim de se obter uma simplificação (BRO; SMILDE, 2014). Consequentemente, as informações relevantes são separadas e ampliadas, tornando-se mais evidentes para análise e inspeção visual (FERREIRA, 2014).

Quando aplicada a um elevado número de amostras de medições, a PCA permite mitigar as redundâncias e reduzir a dimensionalidade do sistema criando uma nova base, cujas componentes são linearmente independentes e em menor número (ROSSI, 2017). Essa redução de variáveis é denominada compressão dos dados e é obtida fazendo-se combinações lineares das variáveis originais, de modo a agrupar os dados de informações semelhantes. Como resultado, um novo conjunto de variáveis, que são capazes de descrever aproximadamente todas as informações contidas nos dados originais, é definido (FERREIRA, 2014; JOLLIFFE; CADIMA, 2016; KROONENBERG, 2008). Tais novas variáveis são as componentes principais (PC) obtidas pela PCA e possuem propriedades específicas importantes, como o fato de serem ortogonais e não correlacionadas entre si. Outra propriedade importante é a quantidade de informações dos dados originais que cada uma dessas novas variáveis é capaz de descrever. A primeira componente principal (PC-1) é definida pela direção que descreve a máxima variância dos dados originais; isto é, explica a maior parte das variáveis estatísticas do conjunto de dados. A segunda componente principal (PC-2), tem direção de máxima variância dos dados no subespaço ortogonal à PC-1, e as componentes subsequentes são ortogonais às anteriores e orientadas de modo a descrever a máxima variância restante. Todavia, uma vez que as redundâncias são removidas, é possível descrever quase a totalidade das informações contidas nos dados originais utilizando apenas algumas componentes principais (FERREIRA, 2014). A Figura 15 exibe a representação gráfica das direções das componentes principais dependentes da variabilidade do conjunto de dados.

Figura 15 – Componentes principais (PC-1 e PC-2) obtidos pela aplicação da PCA.

Fonte: Autoria Própria.

A dedução matemática da PCA deriva diretamente do conceito apresentado, ou seja, os componentes principais são ordenados de acordo com a sua variância. Seja um vetor $X = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ de p variáveis aleatórias, com matriz de covariância Σ , dos quais os autovalores são $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$ e autovetores $e_1, e_2, \dots, e_p$. A análise dos componentes principais procura reproduzir essas variáveis por um menor conjunto de projeções ortogonais $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$. Para tanto, os dados são organizados em uma matriz A , com $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, p$, de forma que as linhas representam as amostras e as colunas as diferentes variáveis (Equação 2.11). Portanto, x_{ij} consiste no valor da i -ésima variável na j -ésima amostra.

$$A = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \dots \\ \dots \\ x_i^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & \dots & x_{1j} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & \dots & x_{2j} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i1} & x_{i2} & \dots & \dots & x_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & \dots & x_j \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Conforme ilustra a Equação 2.12, considere as seguintes combinações lineares dos elementos do vetor X :

$$\begin{aligned}\xi_1 &= A_1^T X = A_{11}X_1 + A_{12}X_2 + \cdots + A_{1n}X_n \\ \xi_2 &= A_2^T X = A_{21}X_1 + A_{22}X_2 + \cdots + A_{2n}X_n \\ &\vdots \\ \xi_n &= A_n^T X = A_{n1}X_1 + A_{n2}X_2 + \cdots + A_{nn}X_n\end{aligned}\tag{2.12}$$

Logo, sendo $i = 1, 2, \dots, n$, a variância de ξ_i é dada por:

$$var(\xi_i) = A_i^T \Sigma A_i \tag{2.13}$$

A primeira componente principal ξ_i é selecionada ao maximizar a função $var(\xi_i)$, que está sujeita a uma restrição dada por $A_i^T A_i = 1$. A solução desta função consiste em realizar a transformação da otimização restrita em um problema de otimização irrestrita (Equação 2.14). No que segue:

$$\begin{aligned}\max_{\lambda_i, A_i} \mathcal{L}(\lambda_i, A_i) \\ \mathcal{L}(\lambda_i, A_i) = A_i^T \Sigma A_i + \lambda_i(A_i^T A_i - 1)\end{aligned}\tag{2.14}$$

Ao desenvolver a Equação 2.14, verifica-se que a máxima variância de ξ_i é igual ao maior autovalor (λ_i) da matriz Σ e A_i equivale ao autovetor associado a (λ_i). Portanto, selecionando os valores de A_i como sendo os autovetores e_i da matriz de covariância Σ do vetor X , tem-se:

$$\begin{aligned}var(\xi_i) &= e_i^T \Sigma e_i = \lambda_i \\ Covar(\xi_i, \xi_k) &= e_i^T \Sigma e_k = 0 \\ i, k &= 1, 2, \dots, n\end{aligned}\tag{2.15}$$

De mesmo modo, pode-se encontrar a segunda componente principal ξ_{i+1} , contanto que seja inserida uma restrição adicional referente a condição de ortogonalidade entre as componentes; isto é, $A_{i+1}^T A_i = 0$.

A variância total do conjunto de dados é dada pela soma das variâncias de cada componente principal, conforme ilustra a Equação 2.16:

$$var_{total} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \tag{2.16}$$

Logo, a proporção de variância de cada componente principal, ou seja, o percentual de informações dos dados originais em que cada componente principal expressa, pode ser expressa pela relação entre a variância deste componente e a variância total do conjunto de dados (Equação 2.17).

$$var_{PC} = \frac{\lambda_i}{\sum_{i=1}^n} \quad (2.17)$$

Os resultados das proporções de variância de cada componente principal são indicações fundamentais para a visualização e compreensão dos dados pelo método PCA. Por exemplo, quando o percentual de variância de um dado componente principal é baixo, isto pode ser um grande indício de que este componente expressa apenas ruídos causados por erros experimentais. Portanto, a experiência de leitura dos dados e a intuição provenientes do conhecimento de análise são indispensáveis para o melhor entendimento dos resultados concedidos por este método (FERREIRA, 2014).

As investigações estatísticas multivariadas garantem não só a observação qualitativa dos espectros de refletâncias, mas também permitem acessar as diferenças e semelhanças entre as suas propriedades. Além disso, devido ao demasiado número de variáveis intrínsecas aos espectros, tais análises são ferramentas essenciais quando aplicadas as tecnologias NIR, pois possibilitam a visualização e especificação dos dados. Por isso, a combinação da técnica NIR e o método PCA vem sendo altamente explorada em estudos de classificação de amostras. Por exemplo, Yan e Siesler (2018) desenvolveram um estudo que investigou o desempenho de classificação de polímeros recicláveis, empregando o método PCA na análise dos espectros obtidos por diferentes espectrofotômetros portáteis reais. Os resultados mostraram que a PCA forneceu relevantes parâmetros para os espectros de dados desconhecidas. Em outra linha de pesquisa, Garmarudi et al. (2019) propuseram um estudo em que os espectros obtidos de amostras de petróleo bruto sejam classificados baseados em suas origens geológicas, também aplicando o PCA como ferramenta quimiométrica. A pesquisa comprovou o potencial de aplicação da técnica em identificar características geoquímicas do petróleo bruto de diferentes regiões geográficas.

Os algoritmos que operam sob os conceitos estatísticos da análise de componentes principais estão cada vez mais presentes nas diversas áreas de pesquisa. Atualmente, aplica-se a PCA em modernos sistemas de reconhecimento de padrões em que a diminuição da velocidade de processamento é garantida pela redução de dimensionalidade dos dados (ALLEGRETTA et al., 2020). No desenvolvimento do algoritmo proposto por este trabalho, a compreensão das variáveis espectrais das amostras é possível graças a este método, que fornece não somente a redução da dimensionalidade com o mínimo de perda de informação, mas também, a primeira classificação estatística dos espectros.

2.3.1.3 Análise Discriminantes Lineares (LDA)

A análise de discriminantes lineares (LDA) é uma técnica estatística multivariada clássica de reconhecimento de padrões, inicialmente elaborada pelo estatístico Robert A. Fisher em 1936 (FISHER, 1936). Em seu trabalho intitulado "*The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems*", Fisher desenvolveu um método estatístico para se obter uma combinação linear de dados característicos e análogos correspondentes a dois diferentes conjuntos de dados, com intuito de caracterizar uma classe definida. A LDA como conceito consiste em uma reinterpretação da análise discriminante de Fisher, uma vez que o principal objetivo da técnica é maximizar o quociente de variância das classes, de modo a caracterizar os dados para cada classe equivalente. Para isto, o método busca limitar o espaço N -dimensional para cada classe, sendo N o número de variáveis, mediante classificação supervisionada; isto é, conforme o padrão pré-estabelecido das informações determinadas por um conjunto de treinamento dos dados (JOHNSON, 2007).

De modo geral, os métodos de classificação são agrupados em duas categorias: os paramétricos e os não paramétricos. A LDA se adequa na categoria paramétrica, visto que esta assume o conhecimento da função de densidade de probabilidade de cada classe (FERREIRA, 2014; JOHNSON, 2007). Segundo Ferreira (2014), a LDA como técnica de classificação paramétrica considera, sobretudo, que as variáveis satisfazem uma distribuição normal e usam a homogeneidade da matriz de variância-covariância das classes para definir e posicionar a região limitada de classificação. Nesse sentido, considere amostras de um conjunto de dados de duas classes são agrupadas em duas regiões limitadas do espaço (Figura 16). O intuito é definir uma superfície de decisão ou um classificador, de modo a satisfazer a expressão para $k(x) = 0$ da Equação 2.18, a seguir:

$$k(x) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 = 0 \quad (2.18)$$

As amostras classificadas como a classe A, se encontram acima do plano e deve ter coordenadas tais que $k(x) > 0$, enquanto as amostras pertencentes a classe B devem ter coordenadas do tipo $k(x) < 0$. Também de acordo com Ferreira (2014), esse conceito pode ser representado no formato matricial como apresentado na Equação 2.19.

$$k(x) = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & \dots & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Nesse caso, as classes A e B são indicadas pela atribuição de valores do tipo $+1$ e -1 , por exemplo. Os coeficientes a_n são obtidos por regressão linear múltipla, a qual é responsável por construir um modelo que descreva razoavelmente as relações entre as variáveis do conjunto de dados. A partir deste procedimento, tem-se uma expressão matemática para cada classe, resultante da combinação linear das variáveis originais $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ (FERREIRA, 2014; JOHNSON, 2007). A Figura 16 ilustra a disposição de um conjunto de amostras em um espaço tridimensional definida pelas variáveis x_1 , x_2 e x_3 , onde as classes A e B são discriminadas por um plano de decisão.

Figura 16 – Conjunto de amostras definidas pelas variáveis x_1 , x_2 e x_3 e distribuídas nas classes A e B.

Fonte: (FERREIRA, 2014).

Assim como os algoritmos baseados na PCA, os algoritmos de LDA também são bastante aplicados para a análise multivariada de dados espectrais. A diferença entre esses dois métodos está na abordagem. A PCA encontra os eixos principais de variação de um conjunto de dados, reduzindo a dimensionalidade do problema sem discriminação de classes. Por outro lado, a LDA considera a existência de classes para o conjunto de dados e projeta sua distribuição conforme a melhor região de decisão, determinada pelas características das amostras. Seguindo essa lógica, tais técnicas podem ser reunidas como métodos complementares de análise multivariada ou até mesmo como um sistema robusto de classificação (BORADE; DESHMUKH; RAMU, 2016; FERREIRA, 2014; JOHNSON, 2007; MARTINEZ; KAK, 2001). Nesse trabalho, contudo, a aplicação desses métodos

tem como propósito compreender as variáveis das amostras, não somente ao reduzir a dimensionalidade com o mínimo de perda de informação (PCA), mas também ao realizar a classificação estatística das informações espectrais (LDA).

2.3.2 Engenharia de Atributos

A engenharia de atributos é considerada a etapa mais importante no fluxo de atividades de um projeto de AM, tendo em vista a inevitável necessidade de se compreender as variáveis intrínsecas e suas influências em um grande conjunto de dados. Como visto na seção anterior, o AM tem como função adaptar os modelos matemáticos a um conjunto de informações, a fim de se obter insights, previsões ou classificações. Nesse contexto, o papel da engenharia de atributos é fundamental, uma vez que a partir de seus procedimentos os atributos dos dados são coletados e transformados em um formato legível ao modelo (ZHENG; CASARI, 2018). A escolha dos recursos mais pertinentes para o problema, diante a um grande número de dados brutos pode ser um trabalho difícil, mas essencial para se obter as melhores respostas de aprendizado. Por isso, a engenharia de atributos é frequentemente referida em literatura como um processo que demanda criatividade, intuição, conhecimento e domínio profundo do projeto e de ferramentas matemáticas (ANDERSON; CAFARELLA, 2016; DONG; LIU, 2018; ZHENG; CASARI, 2018).

A construção de inteligência de máquina é um processo de várias camadas e diversas particularidades (SARKAR; BALI; SHARMA, 2017). Por consequência, a prática da engenharia de atributos só é definida dentro das circunstâncias do modelo e dos dados específicos do projeto. No entanto, em geral, os métodos ainda podem ser divididos conforme a premissa de aplicação e/ou os tipos de dados de entrada. Desta forma, pode-se classificar a engenharia de atributos como quando aplicada em imagens, dados de texto, dados numéricos e em dados categóricos (DONG; LIU, 2018; ZHENG; CASARI, 2018). A engenharia de atributos aplicada a dados numéricos requer um aprofundamento, devido ao escopo deste projeto.

Os dados numéricos são informações geradas por diversas fontes, como em sistemas de compra e venda de produtos, volume de tráfego de veículos e medidas de um sensor. Tratam-se de informações que já se encontram no formato de leitura feita pelo modelo, porém que possivelmente ainda precisam ser analisados e tratados para a melhor assimilação do algoritmo. O primeiro ponto de análise é verificar se as magnitudes dos dados importam para a construção de aprendizagem; isto é, avaliar se o conjunto de dados numéricos são acumulativos ou não. Outra consideração é sobre a dimensão dos recursos. Nesse quesito, é preciso avaliar quais são os limites máximos e mínimos no conjunto, bem como padronizar as unidades. Também é pertinente verificar a quantidade de dados disponíveis para o treinamento do modelo e realizar um processo de seleção de variáveis úteis. Se não houver recursos informativos suficientes, o modelo perderá a precisão em realizar a tarefa desejada.

Já no caso de haver muitos recursos ou se a maioria deles for irrelevante, o modelo terá dificuldades de aprendizado, diminuindo o seu desempenho final (ZHENG; CASARI, 2018). Para a primeira condição, existem técnicas de aumento de dados, ou *data augmentation*, que fornecem cópias ligeiramente modificadas com o intuito de preencher a carência de novos dados (WONG et al., 2016).

De todo modo, as técnicas de engenharia de atributos são aplicadas de forma a tornar os atributos de entrada mais eloquentes, fazendo com que o próprio modelo seja mais simples, mais fácil de treinar e, portanto, mais preciso (DONG; LIU, 2018; ZHENG; CASARI, 2018). Um importante procedimento de otimização de recursos é a normalização por escala máximo e mínimo, onde os valores do conjunto de dados em questão estão inseridos em um intervalo pré-estabelecido. Essa metodologia tem como objetivo dimensionar os recursos para casos em que os modelos são sensíveis às escalas dos recursos de entrada. Como exemplos, pode-se citar os algoritmos que operam com intervalos de valores numéricos restritos, como um sistema de localização baseado em coordenadas de latitude e longitude (MARTIN et al., 2015). No caso de dados de espectroscopia, a técnica de normalização por escala também é indispensável, tendo em vista a necessidade de padronizar os atributos de entrada, como os valores máximos e mínimos de absorbância em um intervalo de comprimento de onda. Ainda, tendo a disposição um extenso conjunto de dados espectrais, torna-se conveniente efetuar o dimensionamento dos recursos via procedimentos de poda (*data pruning*), os quais simplificam o aprendizado ao considerar regiões espectrais que contenham informações úteis para o modelo de classificação, ao passo que eliminam as fontes de incertezas e minimizam os ruídos inerentes aos espectros brutos (ZHANG; CAO, 2014; ZHENG; CASARI, 2018).

A extração das características corresponde a outra etapa fundamental da engenharia de atributos aplicada em modelos classificação de espectros (WANG; GUO; LUO, 2016). Atualmente estão disponíveis variados algoritmos que intensificam os picos de absorbância, reduzem as sobreposições de bandas, suavizam os ruídos e diminuem a dimensionalidade dos dados. Diversos exemplos desses métodos matemáticos, inclusive, se baseiam em técnicas derivativas e/ou de estatística multivariada da Quimiometria, as quais foram mencionadas anteriormente. De fato, graças ao rápido desenvolvimento da NIR e do AM, a combinação dessas tecnologias com promissores algoritmos quimiométricos tem se mostrado uma excelente estratégia de modelagem de classificadores (FAN; MA; WU, 2020; MEDEIROS et al., 2020; SEXTON et al., 2020). Nesse sentido, o propósito do presente trabalho foi agregar os procedimentos de pré-tratamento de dados espectrais da Quimiometria ao algoritmo de classificação proposto. Dentre as principais técnicas de engenharia de atributos empregadas, cita-se a normalização por escala, a poda (*data pruning*) dos espectros de ambas as extremidades de comprimento de onda obtido e a aplicação de algoritmos de filtragem Savitzky-Golay.

2.3.3 Árvore de Decisão

A solução de um problema complexo de aprendizado de máquinas pode ser encontrada em um espaço de diversas hipóteses. Diante disso, entre uma coleção incontável de possibilidades, há uma estratégia muito efetiva que propõe dividir tal problema em subproblemas mais simples, de modo a facilitar a tomada de decisão (FACELI et al., 2011; MARSLAND, 2015). Segundo Faceli et al. (2011), a força dessa proposta vem da capacidade de dividir o espaço de instâncias em subespaços e cada subespaço é ajustado fazendo-se uso de diferentes modelos ou ferramentas. Quando esses subespaços são organizados em estruturas hierárquicas, como ramos de uma árvore, de forma a auxiliar a visualização, a interpretação e a compreensão do problema, tem-se um modelo em árvore de decisão.

O aprendizado da árvore de decisão é um dos métodos mais práticos e poderosos atualmente à disposição para o desenvolvimento de inferências indutivas (MARSLAND, 2015; MITCHELL, 1997). Trata-se de uma ferramenta de suporte a decisão, no qual é exibido o caminho para um determinado evento ocorrer (NETTO, 2013). Como vantagens, pode-se citar o reduzido custo computacional para a realização das deduções e a facilidade de compreensão do aprendizado como um todo, a julgar pela resposta transparente do método, que permite que o usuário tenha controle de todo o processo de classificação – diferente da resposta *blackbox* fornecida por um modelo de Rede Neural Artificial (RNA), por exemplo (MARSLAND, 2015). Por isso, os algoritmos de árvore de decisão vêm sendo amplamente aplicados em tarefas de classificação de diversos segmentos de problemas médicos, bancários, *data mining*, avaliação da qualidade de processos, dentre outros (ELGHIBARI; ELOUAHBI; KHOUKHI, 2018; KRAJUSHKINA et al., 2018; ZHANG; CAO, 2014).

Em síntese, uma árvore de decisão é um grafo acíclico composto por segmentos denominados nós, os quais podem ser do tipo raiz, divisão ou folha (FACELI et al., 2011). O nó do tipo raiz contém todos os elementos do problema e pode ser desmembrado em nós do tipo divisão, também nomeado como nó filho. O nó de divisão contém um teste condicional baseado nos valores de algum atributo informativo presente nos dados. Em geral, esse teste é processado de forma univariado, ou seja, as condições compreendem a um único atributo e seus valores de resposta. O nó folha ou nó terminal, por sua vez, corresponde ao segmento sem divisão, o qual é rotulado como uma função que fornece a classificação da instância (FACELI et al., 2011; MARSLAND, 2015). Dessa forma, independentemente do algoritmo utilizado, o processo desenvolvido pela árvore de decisão se resume em classificar as instâncias do nó raiz até um número n de nós folha. Entre esses extremos estão os nós decisões, que especificam um teste de algum atributo das instâncias, e cada ramo descendente desses nós corresponde a um dos valores de resposta dos atributos (GOLLAPUDI, 2016; MITCHELL, 1997).

Seguindo essa linha de pensamento, Netto (2013) descreve um método relativamente

simples para a construção de uma árvore de decisão com base em um conjunto de dados T . Tendo definido um número k de classes ($C_1, C_2, \dots, C_k$) presentes em T , basta compreender algumas condições básicas. Primeiro, se T contém um ou mais exemplos, todos pertencentes a uma mesma classe C_j , a árvore de decisão para T será um nó folha de identificação dessa classe C_j . No caso de T não conter exemplos, novamente a árvore resultará em um nó folha, porém a classe associada a este nó deverá ser definida mediante a informações além de T ; por exemplo, a classe dominante ao nó raiz pode ser utilizada. Na hipótese de T conter exemplos referentes à várias classes, é preciso refinar o conjunto T em diversos subconjuntos de uma classe única e definir um teste que gere resultados mutuamente exclusivos. Desta forma, as mesmas condições descritas devem ser consideradas recursivamente para cada subconjunto de T , de modo a formar subárvores de decisão de classificação independente (MARS LAND, 2015; NETTO, 2013).

Na atualidade estão disponíveis diversos algoritmos baseados na estrutura da árvore de decisão, os quais são variantes dos mesmos princípios descritos anteriormente, porém divididos pelo critério de separação dos nós (FACELI et al., 2011; GOLLAPUDI, 2016; MARS LAND, 2015; MITCHELL, 1997). Dentre os exemplos com uso mais proeminentes, destacam-se o algoritmo ID3 de John Ross Quinlan e suas extensões C4.5 e CART (BREIMAN et al., 1993; MARS LAND, 2015; QUINLAN, 1986). A metodologia para a construção do algoritmo proposto neste trabalho fez uso dos conceitos básicos do algoritmo CART, desenvolvido por Breiman et al. (1993). Trata-se de uma metodologia que propõe um fluxo de decisão binário (duas ramificações por nó), sendo indicado para problemas não lineares de variáveis numéricas ou categóricas (BREIMAN et al., 1993; SANTOS, 2015). A Figura 17 ilustra a estrutura hierárquica da aprendizagem por árvore de decisão do algoritmo CART.

Figura 17 – Estrutura hierárquica da árvore de decisão CART.

Fonte: Santos (2015).

2.3.4 Treinamento

O aprendizado de máquinas tem como objetivo melhorar o desempenho de previsão dos resultados, sejam eles rótulos de classes ou valores de regressão. O método básico para avaliar tal desempenho é inicialmente comparar as previsões realizadas com os rótulos previamente conhecidos, averiguando os erros cometidos pelo modelo. Com os resultados dessa primeira etapa, pode-se implementar modificações pertinentes nas configurações de engenharia de atributos, visando ampliar a acurácia de previsão do classificador. Em seguida, em uma segunda etapa, é preciso validar a precisão de predição fazendo-se uso de um conjunto de dados teste, o qual não foi anteriormente utilizado para a construção ou treinamento do modelo. Assim, se executa a avaliação de generalização do algoritmo, bem como desenvolve sua capacidade de aprendizado, monitorando os modelos criados, os parâmetros utilizados e seus resultados (MARS LAND, 2015; SARKAR, 2018).

O processo descrito anteriormente explica resumidamente o ciclo de treinamento de um modelo de AM. De acordo com Mitchell (1997), a experiência de treinamento empreendida ao modelo tem um impacto decisivo no sucesso ou fracasso do sistema de aprendizado. Por esse motivo, tal autor recomenda atenção em três atributos-chave de treinamento: (1) o *feedback* dado ao sistema; (2) o grau de controle da sequência de exemplos de treinamento; e (3) o quão o conjunto de treinamento representa a realidade (MITCHELL, 1997). O primeiro quesito diz respeito a resposta que a experiência de treinamento fornece ao sistema, podendo ser do tipo direta ou indireta. As respostas diretas informam ao sistema se os resultados obtidos a partir do conjunto de dados de treinamento são válidos (aprendizado supervisionado), enquanto nas respostas indiretas o sistema é independente e adota decisões com bases nas informações indiretamente inseridas (aprendizado não-supervisionado). O segundo quesito se refere ao controle que o sistema empreende em relação a sequência de treinamento, administrando ou não os aspectos válidos para a função proposta; ou seja, a capacidade do sistema de ignorar informações que não são válidas para o treinamento. O terceiro e último aspecto-chave considera a coerência do conjunto de treinamento no que diz respeito ao domínio real das ações. Ainda segundo Mitchell (1997), no geral, o aprendizado é mais confiável quando os exemplos de treinamento seguem uma distribuição semelhante à dos exemplos de testes futuros. Portanto, se o sistema tiver um bom desempenho para um determinado conjunto restrito, não se pode garantir que o sistema terá o mesmo desempenho para qualquer outro grupo de exemplos (MITCHELL, 1997; PILA, 2001).

Um modo de evitar as imprecisões de treinamento do modelo é dividir o conjunto de dados em três subconjuntos: treinamento, validação e teste. O subconjunto de treinamento é destinado para a modificação dos pesos do modelo, enquanto o da validação estima a capacidade de generalização durante o processo de aprendizagem. O subconjunto de teste, por sua vez, verifica a exatidão do algoritmo, produzindo uma avaliação final (BRAGA;

CARVALHO; LUDERMIR, 2012; LOY, 2019; MARSLAND, 2015). De acordo com Marsland (2015), a proporção de divisão dos subconjuntos não somente influencia no desempenho do aprendizado, como também depende diretamente da quantidade de dados disponíveis. Então, no caso de haver grande disponibilidade de dados, o autor sugere uma proporção de 50:25:25 ao passo que quando houver pouca, uma proporção de 60:20:20 é indicada. Ademais, outro fator excepcionalmente importante consiste na forma pela qual os dados são apresentados para o sistema de aprendizado. Segundo Marsland (2015), muitos conjuntos de dados são expostos de maneira ordenada pelas classes; isto é, o primeiro grupo de dados corresponde a classe 1, o segundo grupo a classe 2, e assim sucessivamente. Ao escolher o primeiro grupo de dados como subgrupo de treinamento, os resultados de aprendizado não serão positivos, tendo em vista que foram escolhidos apenas dados referentes a classe 1. Por isso, o aconselhável é reordenar os dados de forma aleatória (Figura 18) via particionamento pautado em métodos de amostragem, como a validação cruzada ou *K-fold Cross Validation*, *holdout* e *bootstrap* (MARSLAND, 2015).

Figura 18 – Partição do conjunto de dados para o AM de classificação.

Fonte: Adaptado de Marsland (2015).

A validação cruzada é descrita como um método computacional intensivo que divide de forma aleatória um conjunto k de subconjuntos e todos os subconjuntos participam das etapas de treinamento e de teste. Mais precisamente, o conjunto de dados s é dividido em k partes $(d_1, d_2, \dots, d_k)$ de tamanho próximo m_k . O processo então terá k interações, sendo o subconjunto de validação dado por d_k , com $k = 1, 2, \dots, k$ e o subconjunto de treinamento será o conjunto das outras $k - 1$ partes, isto é $d_k = d_1, d_2, \dots, d_k - 1, d_k + 1, \dots, d_k$. Desta forma, ao final das k etapas, todos os dados foram utilizados tanto para o treinamento, quanto para a validação (MITCHELL, 1997).

Levando em consideração o ciclo de aprendizado e as recomendações apresentadas,

verifica-se que os maiores desafios no desenvolvimento do AM se encontram nas dificuldades em orientar o treinamento, bem como na obtenção da generalização do modelo de acordo com a complexidade do problema. Segundo [Braga, Carvalho e Ludermir \(2012\)](#), a questão de ajuste da complexidade do algoritmo ao problema é tratada como um dilema entre o viés (rigidez) e a variância (flexibilidade). A forma pela qual é possível avaliar o equilíbrio deste dilema é averiguar a suficiência do treinamento realizado ([BATISTA, 2019](#)). No caso do treinamento perdurar por muito tempo, o algoritmo perde o poder de generalização ao se adaptar aos dados, de modo a também considerar ruídos e imprecisões de amostragem. Esse fenômeno, conhecido como *overfitting*, provoca o aumento da complexidade do modelo e o seu superdimensionamento em relação ao conjunto de dados. Por outro lado, se o treinamento for ineficaz, de forma a resultar em um modelo que não tem o real conhecimento da complexidade do conjunto de dados, constata-se o subdimensionamento do algoritmo, causado por um fenômeno denominado *underfitting* ([BATISTA, 2019](#); [BRAGA; CARVALHO; LUDERMIR, 2012](#); [MARSLAND, 2015](#); [MITCHELL, 1997](#)). Tais fenômenos devem ser continuamente monitorados ao longo de todo o estágio de treinamento e, para tanto, tem-se a disposição métodos de avaliação que fornecem o status concreto da performance de treinamento.

2.3.5 Avaliação do Modelo

A necessidade contínua de experimentação consiste em uma das características mais singulares do AM. De fato, ao propor uma solução de um problema complexo aplicando-se algoritmos de AM, os ciclos de validação são fundamentais, uma vez que diferentes modelos podem ser candidatos para um mesmo problema. Em relação a isso, [Faceli et al. \(2011\)](#) relatam que em alguns casos as próprias particularidades das técnicas pretendidas, bem como as do problema a ser solucionado, auxiliam na escolha da metodologia de aprendizado. Ainda assim, mesmo quando um único algoritmo tenha sido escolhido, pode ser indispensável realizar ajustes no treinamento empreendido ([FACELI et al., 2011](#); [MARSLAND, 2015](#)). A partir dos resultados dos métodos de avaliação é possível analisar a validade, a generalização e a reprodutibilidade do algoritmo criado, de modo a qualificar o desempenho das previsões efetuadas. Tal processo de avaliação pode ser desempenhado com auxílio de ferramentas de análise gráficas como a matriz de confusão, assim como por métricas de desempenho ([FACELI et al., 2011](#); [GOLLAPUDI, 2016](#); [MARSLAND, 2015](#)).

2.3.5.1 Matriz Confusão

A matriz confusão corresponde a um popular método de avaliação de modelo de classificação, constituído por uma estrutura tabular que fornece as frequências de especificação de cada classe do conjunto de dados ([SARKAR; BALI; SHARMA, 2017](#)). Deste modo, pode-se comparar as respostas dadas pelo algoritmo e os rótulos originais que se

dispõe, assegurando uma avaliação qualitativa do desempenho de aprendizado (BATISTA, 2019).

A Figura 19 mostra uma matriz confusão binária típica e suas frequências. A estrutura é composta por colunas que representam as contagens de instâncias classificadas com base em previsões do modelo e por linhas que descrevem as instâncias com base nos rótulos reais das classes (A e B) (SARKAR; BALI; SHARMA, 2017). Os verdadeiros positivos (VP) são as amostras da classe positiva que foram classificadas corretamente, enquanto os verdadeiros negativos (VN) consistem em exemplos da classe negativa que também foram classificados de modo correto. Por sua vez, os falsos positivos (FP) são as amostras da classe positiva que foram incorretamente classificadas pelo modelo, ao passo que os falsos negativos (FN) são os exemplos da classe negativa que também foram classificados equivocadamente.

Figura 19 – Matriz confusão binária.

		Previsto	
		Classe A	Classe B
Real	Classe A	Verdadeiro Positivo (VP)	Falso Negativo (FN)
	Classe B	Falso Positivo (FP)	Verdadeiro Negativo (VN)

Fonte: Autoria Própria.

Alguns modelos de controle de sistemas ilustram bem o significado das frequências em uma matriz confusão. Imagine um algoritmo de aprendizado com a função de atestar positivo ou negativo para detecção de *spams*. As amostras de mensagens VP são aquelas que são *spams* e foram classificadas corretamente pelo modelo. As amostras VN são mensagens que não são *spams* e que foram corretamente apontadas como não sendo. Por outro lado, as amostras de mensagens FP são aquelas que não são *textit{spams}*, mas que foram atestadas como sendo pelo classificador, e os FN são mensagens *spams* que o classificador previu incorretamente como não sendo.

Fundamentada nas frequências fornecidas pela matriz confusão, a avaliação do desempenho do modelo pode também ser quantificada ao se calcular métricas, como a acurácia, a taxa de verdadeiro positivo (*recall*), a precisão e o fator *f1-score* de classificação.

A acurácia (AC) corresponde a razão da soma de todos os exemplos corretamente classificados pelo número total de objetos no conjunto de dados (Equação 2.20) (SOKOLOVA; LAPALME, 2009).

$$AC = \frac{VP + VN}{VP + VN + FP + FN} \quad (2.20)$$

A taxa de verdadeiros positivos, ou *recall*, consiste na taxa de acerto na classe positiva verdadeira, isto é, calcula o quão bom o modelo é para prever o evento de interesse. Algebricamente, corresponde a razão entre o verdadeiro positivo e a soma do verdadeiro positivo e o falso negativo (Equação 2.21) (BATISTA, 2019; SOKOLOVA; LAPALME, 2009).

$$recall = \frac{VP}{VP + FN} \quad (2.21)$$

A precisão (PRE), por sua vez, define a proporção de identificações positivas que foram corretamente prevista pelo modelo, isto é, consiste na razão entre o verdadeiro positivo e a soma do verdadeiro positivo e o falso positivo (Equação 2.22) (SOKOLOVA; LAPALME, 2009).

$$PRE = \frac{VP}{VP + FP} \quad (2.22)$$

Por fim, a *f1-score* (Equação 2.23) consiste na relação entre a precisão (PRE) e o *recall* que fornece a pontuação geral da qualidade do classificador. Em síntese, a pontuação F1 gera uma medida entre 0 e 1, onde quanto maior o valor obtido melhor será a qualidade do classificador (BROWN, 2018; SOKOLOVA; LAPALME, 2009).

$$f1 = \frac{2 \times PRE \times TVP}{PRE + TVP} \quad (2.23)$$

De acordo com Sarkar, Bali e Sharma (2017), uma matriz confusão pode ser criada tanto para uma classificação binária, bem como para um modelo de classificação de várias classes pois as métricas são as mesmas. A diferença está no modo pela qual tais variáveis são calculadas. Em problemas de classificação multi-classe, tem-se a macro-média e a micro-média. Na macro-média, calcula-se as métricas para cada classe, tratando-as como um problema de classificação binárias e em seguida, mede-se a média para todas as classes. Por outro lado, a micro-média corresponde a média ponderada das frequências correspondentes (SARKAR; BALI; SHARMA, 2017; SOKOLOVA; LAPALME, 2009). As Equações 2.24, 2.25, 2.26 e 2.27 a seguir, formulam a acurácia (AC_M), a taxa de verdadeiro positivo ($recall_M$), precisão (PRE_M) e a macro-f1 ($Mf1$) de uma classificação multi-classe (n classes), quando calculadas para uma classe individual C_i por macro-média. Atualmente,

contudo, existem bibliotecas computacionais e *toolboxes* específicos que podem auxiliar na visualização e quantificação da matriz confusão de classificadores multi classes.

$$AC_M = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{VP_i + VN_i}{VP_i + VN_i + FP_i + FN_i}}{n} \quad (2.24)$$

$$recall_M = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{VP_i}{VP_i + FN_i}}{n} \quad (2.25)$$

$$PRE_M = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{VP_i}{VP_i + FP_i}}{n} \quad (2.26)$$

$$Mf1 = \frac{\sum_{i=1}^n f1_i}{n} \quad (2.27)$$

3 METODOLOGIA

No terceiro capítulo são apresentados os principais aspectos acerca da metodologia aplicada na pesquisa. A princípio são expostas as principais propriedades dos materiais utilizados no trabalho. Em seguida, os métodos são definidos e suas etapas são indicadas e organizadas em um fluxograma. No final do capítulo é desenvolvida a concepção a respeito do projeto conceitual do sistema proposto.

3.1 Materiais

Foram selecionados 19 filamentos poliméricos comerciais com $1,75 \pm 0,05$ mm de diâmetro de PLA, ABS e PETG, indicados para o processo FDM. Tais materiais foram providos por cinco diferentes fabricantes: a 3D Fila®, 3D Lab®, Cliver® e a UP3D®. Buscou-se selecionar filamentos de variadas colorações, visando mensurar a influência de corantes e pigmentos nas configurações dos espectros NIR.

Segundo as informações dos *datasheets* referentes aos filamentos poliméricos, as características dos materiais não divergem demasiadamente de um fabricante ao outro. O PLA, por exemplo, apresenta uma densidade de $1,24 \text{ g/cm}^3$ e temperaturas de transição vítrea (T_g) e de fusão (T_f) de $60 \pm 5 \text{ }^\circ\text{C}$ e $185 \text{ }^\circ\text{C}$, respectivamente. No caso do ABS, a densidade é de $1,05 \text{ g/cm}^3$ e as T_g e T_f são, nessa ordem, $100 \text{ }^\circ\text{C}$ e $210 \pm 10 \text{ }^\circ\text{C}$. Por fim, o PETG apresenta uma densidade de $1,27 \text{ g/cm}^3$, T_g de $85 \pm 10 \text{ }^\circ\text{C}$ e T_f de $240 \pm 10 \text{ }^\circ\text{C}$ (3D LAB, 2020; 3D FILA, 2020; UP 3D, 2020). A Tabela 4 expõe as propriedades relativas aos materiais poliméricos (grãos) que compõem os filamentos produzidos pela empresa 3D Lab®.

Tabela 4 – Propriedades dos polímeros que compõem os filamentos da 3D Lab®.

Propriedade	PLA	ABS	PETG
Densidade (g/cm^3)	1,24	1,04	1,27
T_f ($^\circ\text{C}$)	185	220	240
T_g ($^\circ\text{C}$)	60	100	85
Tensão de escoamento (MPa)	66	38	51
Resistência flexão (MPa)	130	66	72
Módulo elástico (MPa)	4350	2200	2120

Fonte: 3D Lab (2020).

Como suporte para medição dos dados de espectroscopia dos filamentos poliméricos,

utilizou-se uma placa de politetrafluoretileno (PTFE). O PTFE é invisível para a radiação no infravermelho e por isso é utilizado como material de referência.

3.2 Métodos

A Figura 20 apresenta os procedimentos definidos para o desenvolvimento do algoritmo de aprendizado de máquinas, os quais foram organizados em quatro etapas. Na primeira etapa, os filamentos poliméricos advindos de distintos fabricantes e com diferentes colorações foram obtidos. Em seguida, os dados espectrais característicos de cada espécie de filamento polimérico foram colhidos e as atribuições das bandas de absorção foram realizadas. Na terceira fase da pesquisa, ocorreu a análise exploratória dos dados espectrais, cujo os métodos de análise principal de componentes (PCA), análise discriminante linear (LDA) e de normalização dos espectros foram aplicados. O intuito desta etapa é promover um primeiro resultado do desempenho de classificação dos espectros, baseada pela metodologia de Quimiometria previamente planejada. Com base na análise exploratória, na quarta e última etapa, o algoritmo de classificação foi codificado a partir dos procedimentos da engenharia de atributos, treinamento, avaliação e testes do modelo criado.

Figura 20 – Fluxograma de desenvolvimento do algoritmo de aprendizado de máquinas proposto neste trabalho.

Fonte: Autoria Própria.

3.2.1 Coleta de Dados

A aquisição dos dados espectrais ocorreu com auxílio do espectrofotômetro portátil DLP® NIRscan™ Nano, produzido pela *Texas Instruments*®. Esse dispositivo realiza leituras da absorbância em no máximo sete segundos e opera na faixa espectral de 900 a 1700 nm com resolução de 10 nm. O software para o recebimento dos espectros do NIR utilizado

foi o NIRscan^{TM} Nano GUI versão 1.9.11 de código aberto, também desenvolvido pela *Texas Instruments*®. Conforme o procedimento mostrado na Figura 21, foram adquiridos três espectros para três posições diferentes de cada filamento polimérico. Uma peça de politetrafluoretileno (PTFE) foi utilizada como referência de medida (Figura 21-A), bem como um anteparo de fixação do filamento no equipamento (Figura 21-B). A Tabela 6 (Apêndice A) apresenta as nomenclaturas atribuídas para as amostras analisadas, compreendendo os materiais, os fabricantes e as colorações dos filamentos.

Figura 21 – DLP® NIRscan^{TM}: (A) medida de referência e (B) medida do filamento polimérico.

Fonte: Autoria Própria.

3.2.2 Análise Exploratória

Os procedimentos da análise exploratória dos dados ocorreram com auxílio do software de avaliação analítica *The Unscrambler X* versão 10.4, desenvolvido pela *CAMO Software*®. Inicialmente, os dados espectrais foram importados ao software no formato de uma matriz $X_{n \times p}$ de n objetos (amostras) por p variáveis (comprimentos de onda). No caso, foi criada e inserida uma matriz com dimensões 114x229. Então, deu-se início ao pré-processamento dos dados pela filtragem digital Savitzky-Golay, aplicando-se a segunda derivada em um polinômio de 2^a ordem e janela de sete pontos. O objetivo da normalização é minimizar as variações da linha base dos espectros e suavizar os possíveis ruídos causados por interferências na obtenção dos dados. Com isso, facilita-se a visualização, a avaliação dos padrões das curvas e a criação do modelo das análise PCA e LDA.

Como visto na seção 2.3.1.2 do capítulo anterior, a PCA cria projeções dos resultados analíticos das amostras no espaço das novas componentes principais, possibilitando avaliar as diferenças estatísticas dos dados. Para tanto, recebe o conjunto total de dados adquiridos e suavizados anteriormente. Neste trabalho, a PCA avaliou o dados espectrais obtidos pela medida das duas triplicatas das amostras, baseando-se no método de decomposição em valores singulares (SVD, do inglês *Singular Value Decomposition*). O SVD corresponde a um algoritmo capaz de distinguir as dimensões junto com as quais os dados mostram maior variação (TANWAR; RAMANI; TYAGI, 2018). De acordo com Mateen et al. (2018), a PCA em combinação com o SVD, proporcionam a redução da dimensionalidade do conjunto de dados com maior rapidez e estabilidade quando comparadas a outras técnicas.

Conforme também conceituado, a LDA gera uma classificação estatística pela maximização da variância entre as classes. Aqui, esta análise foi elaborada com auxílio dos resultados obtidos pela redução de dimensionalidade concedida pela PCA, uma vez que a LDA requer um equilíbrio da relação entre o número de variáveis e de amostras disponíveis. Os dados foram divididos em dois conjuntos referentes a calibração (70% dos dados) e a validação do modelo (30% dos dados), os quais foram selecionados via algoritmo de Kennard-Stone. Esse algoritmo busca escolher aleatoriamente um conjunto de dados, de modo a selecionar as amostras que representam com precisão a variabilidade dos espectros avaliados. Para tanto, utiliza-se da distância euclidiana para selecionar as amostras representativas de tal variabilidade (SOUSA et al., 2011). Em seguida, a classificação LDA foi preparada com base no método Linear. A partir dos resultados obtidos, foi possível verificar a acurácia de classificação linear dos espectros, bem como avaliar quais amostras se destoam estatisticamente das demais. Tal procedimento foi fundamental para a previsão do desempenho de classificação das amostras no algoritmo codificado posteriormente.

3.2.3 Implementação do Algoritmo

A metodologia do algoritmo proposto foi formulada com base na linha de atividades da Quimiometria aplicada a dados espectrais, assim como nos resultados da análise exploratória previamente obtidos. Primeiramente, foi desenvolvida uma sequência de ações a ser desempenhada pelo programa, que se fundamentou nos princípios da arquitetura de árvore de decisão do algoritmo CART. Seguindo as diretrizes sugeridas por Marsland (2015), o aprendizado supervisionado se estabeleceu em algumas fases básicas: entrada de dados, engenharia de atributos e pré-tratamento de dados, treinamento, avaliação e teste. Toda a implementação do algoritmo fora efetuada na linguagem de programação do ambiente MATLAB®, versão 8.5. A escolha deste sistema se deu pela simplicidade do uso de aplicativos de aprendizado de máquinas, confiabilidade nos algoritmos disponíveis para codificação e facilidade de geração dos resultados. A Figura 22 apresenta a estrutura de decisão do algoritmo construído neste trabalho.

Figura 22 – Fluxograma de desenvolvimento do algoritmo de aprendizado de máquinas proposto neste trabalho.

Fonte: Autoria Própria.

Os dados espectrais foram importados ao MATLAB® no formato de uma matriz

114x228, gerando um vetor numérico entre 0,1 a 0,5 de absorbância (UA) e 228 valores de comprimento de onda (nm). Para a identificação das classes, criou-se um vetor de respostas numéricas, sendo -1, 0 e 1 os indicadores de PLA, ABS e PETG, respectivamente. Inicialmente, os espectros foram plotados com o propósito de comparação com os resultados espectrais obtidos na análise exploratória. Em seguida, conforme será justificado no próximo capítulo, foi incluído o cálculo do coeficiente angular dos espectros na faixa de 901,32 a 1701,23 nm, tendo como intuito discriminar àqueles com poucas informações de absorbância. De acordo com a Equação 3.1, a função b retorna a linha de inclinação da regressão linear dos espectros formados por x valores de comprimento de onda e y medidas de absorbância, sendo $\bar{x}$ e $\bar{y}$ as médias amostrais de x e y . Essa operação corresponde ao primeiro nó de decisão do algoritmo, que tem como saídas a continuação do processo de classificação ou a seleção manual dos parâmetros de processamento do equipamento de fabricação aditiva.

$$b = \frac{\sum(x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum(x - \bar{x})^2} \quad (3.1)$$

Ainda na fase de engenharia de atributos, tem-se início o pré-tratamento dos dados com a aplicação da filtragem por Savitzky-Golay (SG), de acordo com as mesmas configurações descritas anteriormente; isto é, cálculo da segunda derivada em um polinômio de segunda ordem e janela de sete pontos. Devido a desvios nos sinais da extremidade dos espectros resultantes do algoritmo de SG incluso ao MATLAB®, foi preciso aplicar a poda dos dados (*data pruning*) referentes aos sete primeiros e sete últimos valores de comprimento de onda, de forma a minimizar qualquer fator prejudicial ao desempenho de classificação. Na etapa de treinamento, os espectros pré-tratados foram redimensionados pela projeção da PCA, especificada por cinco componentes principais. O resultado alcançado auxiliou no desempenho do treinamento desenvolvido pelo aplicativo *Classification Learner* do MATLAB®, no qual o método LDA foi selecionado como modelo de classificação. Para tanto, o programa recebeu uma matriz de treinamento formada por 96 espectros pré-tratados de PLA, ABS e PETG composto por 214 valores de comprimento de onda. Também, foi adicionada uma coluna extra correspondente aos vetores de resposta, gerando uma matriz final de estrutura 96x215. Por último, a validação do treinamento foi auxiliada por procedimentos de seleção da validação cruzada, gerando 10 segmentos. Tal configuração foi definida baseando-se em relatos de autores como Mitchell (1997) e Borra e Ciaccio (2010), os quais citam o emprego do valor $k = 10$ como aquele que gera um melhor desempenho de viés do método de partição.

Após ter sido desenvolvido o treinamento, o código do modelo proposto foi exportado para a execução das etapas de testes e avaliação. Na etapa de testes, novos espectros foram apresentados ao classificador para a verificação das métricas de predição. Esses novos espectros foram concebidos aplicando-se a técnica *data augmentation*, sendo possível a produção de dois novos subconjuntos de dados, conforme apresentado nas Tabela 7 e 8 do

Apêndice A. Deste modo, o teste do classificador ocorreu de acordo com duas abordagens diferentes: (1) aplicação de dados gerados pela média da absorbância de espectros de mesmo material, porém de colorações diferentes (subconjunto A); e (2) aplicação de dados gerados pela adição percentual da absorbância de espectros de filamentos poliméricos distintos, porém de mesma coloração (subconjunto B). As matrizes de cada um dos dois subconjuntos foram inseridas no software MATLAB® e o comando de teste de predição do código de treinamento foi aplicado. Para a avaliação do modelo, por fim, considerou-se a análise das matrizes confusão geradas segundo os resultados dos testes feitos, além do cálculo das métricas de desempenho. O processo de avaliação permitiu com que ajustes na metodologia do algoritmo fossem desenvolvidos, bem como viabilizou compreender o limite de predição do classificador.

3.3 Projeto Conceitual

O projeto propõe a associação de dispositivos de sensoriamento e máquinas de fabricação aditiva com o intuito de desenvolver um sistema capaz de promover a identificação prévia e automática do material a ser processado e o ajuste automático dos parâmetros de processamento. O método de sensoriamento e aquisição dos dados é diretamente dependente do modo pela qual os insumos são introduzidos ao processo. No que diz respeito aos equipamentos FDM ou FFF, cuja a alimentação do material decorre pelo tracionamento do filamento polimérico pelo cabeçote, o uso de espectrofotômetros portáteis para medidas das características intrínsecas aos materiais corresponde a uma ótima alternativa; isto, graças a evolução tecnológica e a miniaturização dos dispositivos de espectroscopia.

O desenho técnico da Figura 23 ilustra a visão geral do projeto conceitual, no qual uma impressora 3D (1) composta por uma mesa de deposição (2), um cabeçote de extrusão (3) e um carretel de filamento polimérico (4), tem anexado ao seu ambiente um espectrofotômetro portátil (5) que, auxiliado por seu anteparo de referência (6), recebe e envia informações espectrais para uma placa de aquisição (7). Para o funcionamento efetivo do sistema, o filamento necessariamente precisa ter contato direto com as janelas de captura durante o tempo de leitura do dispositivo. As informações adquiridas são enviadas para a placa de aquisição, que opera em conjunto ao classificador desenvolvido neste trabalho. O sistema verifica a identidade do material pelas características espectrais próprias de cada classe. Em caso de identificação, dão-se as entradas das configurações dos parâmetros de processamento próprios do material. As informações de configuração podem estar armazenadas em um banco de dados conectados à nuvem. Desta forma, o usuário é capaz de inserir e compartilhar parâmetros desconhecidos. Em seguida, a fabricação é iniciada e um relatório informativo do processo é enviado à nuvem, estando disponível ao usuário. Por outro lado, caso o material não seja identificado, o sistema concede a configuração manual dos parâmetros de processamento. As configurações inseridas pelo

usuário, bem como um relatório informativo das condições de processo selecionadas são enviados e armazenados no banco de dados na nuvem e, posteriormente, a fabricação tem início.

Figura 23 – Desenho técnico do sistema de identificação de materiais aplicados à MA, indicado pelo projeto conceitual.

Fonte: Autoria Própria.

Neste ponto é importante salientar que o algoritmo desenvolvido neste trabalho corresponde a uma primeira versão, na qual é possível não só a classificação dos materiais aqui estudados, mas também concede a entrada de novas informações. O intuito é otimizar e incorporar ao sistema novas funcionalidades futuramente, de forma a atingir os objetivos do projeto conceitual aqui expostos. A Figura 35, presente no Apêndice B, apresenta um diagrama de atividades UML do sistema de identificação e controle planejado.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são analisados e discutidos os resultados obtidos para as diferentes etapas de desenvolvimento do projeto, as quais contemplam desde as avaliações estatísticas preliminares do conjunto de dados, até a concepção de aprendizado de máquina aplicado na criação do algoritmo. A princípio são apresentados os resultados correspondente a análise exploratória dos dados; isto é, estudo dos espectros adquiridos e avaliações estatísticas multivariadas (PCA e LDA). Por fim, são exibidos os resultados das etapas de programação que, de modo respectivo, equivalem a engenharia de atributos, treinamento, avaliação e testes do modelo resultante.

4.1 Análise Exploratória

4.1.1 Espectros Adquiridos

A Figura 24 apresenta os espectros NIR suavizados obtidos em triplicata das amostras dos filamentos de PLA, ABS e PETG, registrados na faixa de 1000 a 1700 nm.

Figura 24 – Espectros NIR adquiridos: (A) PLA; (B) ABS; e (C) PETG.

Fonte: Autoria Própria.

Em primeira análise, observa-se a nítida variação das linhas de base dos espectros. Estudos relatam que tais variações são provocadas pela não uniformidade das amostras, diferenças de granulometria, alterações na pigmentação ou nas concentrações de aditivos do material; isto, quando não há nenhuma alteração química em curso (FOLHA, 2014). McLauchlin, Ghita e Gahkani (2014) identificaram essa especificidade ao realizar um estudo relacionado a espectroscopia NIR praticada em amostras do polímero PET, contaminadas por PLA. Os autores constataram que a medida em que se aumentou as concentrações de PLA, houve um aumento da opacidade do polímero fundido. Isto levou a uma alteração de absorção da radiação infravermelha, provocando a alteração na linha de base (MCLAUCHLIN; GHITA; GAHKANI, 2014). No caso particular deste trabalho, tal variação pode ser explicada pela distinção de tonalidade dos filamentos avaliados, os quais foram submetidos a processos de incorporação de um pigmento específico. De acordo com Fang et al. (2013), a refletividade ao NIR de uma partícula de pigmento depende do meio circundante, da sua distribuição no meio, do tamanho da partícula, da concentração de outros aditivos, do comprimento de onda de luz incidente, dentre outros fatores.

Na Figura 25 o resultado da aplicação da segunda derivada no conjunto de dados espectrais, via método Savitzky-Golay é apresentado. A partir deste procedimento foi possível não somente corrigir a variação da linha base dos espectros, mas também minimizar os efeitos do espalhamento de luz ao aumentar a relação sinal-ruído. Adicionalmente, com base nesse tratamento, identifica-se as regiões de comprimento de onda nas quais se localizam as bandas de absorbância características para cada material; isto, graças a capacidade da técnica em reduzir a quantidade de picos sobrepostos. Durante a aplicação do método, foram testadas diversas configurações de tamanho de janela, sendo verificado um valor limite o qual acima há perdas de informações relevantes. Nesse sentido, a melhor suavização dos espectros foi efetuada aplicando-se a janela de 7 pontos.

Conforme se observa, as bandas de absorbância ocorrem em regiões análogas de comprimento de onda, no que se refere a espectros de um mesmo material. Isto comprova que as particularidades espectrais dos polímeros são identificadas independente do fabricante. Os dados resultantes do pré-tratamento serviram como modelo de calibração para aplicação das análises multivariadas, que serão discutidas nas próximas seções deste capítulo. Para isso, os espectros foram submetidos ao pré-processamento por SG, projetados em um modelo multivariado de PCA e classificados estatisticamente pela LDA, gerando resultados essenciais para a avaliação de distinção entre as classes de amostras (PLA, ABS e PETG).

Figura 25 – Espectros de filamentos poliméricos pré-tratados por Savitzky-Golay na análise exploratória.

Fonte: Autoria Própria.

A Figura 26 expõe os espectros vibracionais típicos de PLA, ABS e PETG, juntamente com suas principais bandas de absorção identificadas na região no infravermelho próximo. A atribuição de bandas, quando auxiliada por consultas em literatura específica, permite não somente comprovar as peculiaridades da identidade de cada material analisado, mas também avaliar o comportamento das ligações dos grupamentos químicos pertencentes ao material. No que se refere a presente pesquisa, o intuito dessa análise foi extrair informações representativas da razão de cada pico de absorvância identificados nos espectros, assim como comparar esses resultados ao que se é relatado cientificamente. Por isso, toda a atribuição desenvolvida neste trabalho foi embasada em referências técnicas relacionadas a espectroscopia de infravermelho próxima (NIR).

Em geral, as bandas de absorção localizadas na região do NIR (800 nm a 2500 nm) para polímeros contemplam sobretons e combinações relacionadas a trechos hidrogênicos das ligações C-H, N-H e O-H (BURNS; CIURCZAK, 2008). No caso do PLA, observa-se bandas associadas às vibrações na região do segundo sobretom de estiramento de C-H (1100 a 1200 nm), especificamente nos comprimentos de onda próximos a 1132 e 1166 nm. Na sequência, localizam-se as bandas atribuídas as vibrações de estiramento assimétrico e simétricos, especialmente de grupos metil (CH_3), presentes no primeiro sobretom de combinação C-H (1300 a 1500 nm). De acordo com Burns e Ciurczak (2008), as bandas de combinação surgem da soma e diferenças de vibrações fundamentais de alongamento e

flexão, as quais dependem da simetria molecular. Ainda nos espectros do PLA, verifica-se um ombro referente ao primeiro sobretom de O-H (1432 nm) e bandas na região referente ao primeiro sobretom de vibrações de estiramento de C-H (1676 nm) (ISHIKAWA et al., 2013; AMIRABADI; RODRIGUE; DUCHESNE, 2018).

Nos espectros do ABS observa-se duas bandas representativas na faixa de 1139 e 1196 nm, que estão inseridas no segundo sobretom de estiramento do grupo C-H aromático e metil, respectivamente. Em seguida, tem-se um pico de absorbância proeminente na região de comprimento de onda próxima a 1406 nm, referente ao primeiro sobretom de combinação CH₂ e C-H, além de um ombro e um pico na faixa do primeiro sobretom de C-H (1600 a 1700 nm) (BURNS; CIURCZAK, 2008; WORKMAN, 2012). Segundo Burns e Ciurczak (2008), essa sequência de bandas de absorção são típicas de polímeros derivados de estireno. De modo similar, os espectros vibracionais de PETG também apresentam duas bandas de absorção na região do segundo sobretom de estiramento de C-H (1100 e 1200 nm), sobretudo com picos em comprimentos de onda próximo a 1121 e 1180 nm, relativos ao grupo C-H aromático. Além dessas, assim como nos espectros de ABS, são observadas bandas na região do primeiro sobretom de combinação C-H (1378 nm) e primeiro sobretom de estiramento do grupo C-H (1652 nm). Como exposto na seção 2.1.3.3, sendo o PETG uma versão modificada do PET, este apresenta um elevado teor de hidroxilas em análise de espectroscopia próxima. De acordo com Burns e Ciurczak (2008), a técnica NIR tem sido bastante empregada em avaliações do PET, visando principalmente quantificar a presença de ácidos e hidroxilas em várias etapas de processos de fabricação.

Figura 26 – Bandas de absorção no infravermelho próximo de PLA, ABS e PETG.

Fonte: Autoria Própria.

4.1.2 Análise de Componentes Principais (PCA)

A Figura 27 apresenta o gráfico *score* da PCA realizada em 114 espectros adquiridos de 19 amostras de filamentos poliméricos de PLA, ABS e PETG, os quais não foram previamente tratados pelo método de suavização de Savitzky-Golay (SG). Os resultados obtidos são fundamentais para qualificar o grau de importância da aplicação do método SG para a averiguação da variância do conjunto de dados espectrais. Inicialmente, verifica-se que a soma das duas primeiras componentes principais (PCs) explicam cerca de 97% da variação dos dados. As variâncias explicadas por cada componente principal formam um critério fundamental para a escolha dos planos de avaliação da PCA. [Valderrama et al. \(2015\)](#) ressalta que PCs que explicam pouca variância, no nível de ruído dos dados, não podem ser interpretados de maneira confiável. Em relação a esta primeira análise, isto é verificado ao observar a contribuição percentual de cada componente principal, visto que a PC-2 é responsável por apenas 9% da explicação dos dados. Ainda, o gráfico *score* revela que a ausência do processo de pré-tratamento dos dados gerou uma distribuição altamente não linear das amostras, não havendo a formação de agrupamentos homogêneos dos espectros de mesmo material. Esses resultados comprovam a importância da inclusão do processo de tratamento e suavização prévia dos espectros no *roadmap* do algoritmo de classificação.

Figura 27 – Gráfico *score* da PCA realizada no conjunto de dados sem pré-tratamento.

Fonte: Autoria Própria.

A Figura 28, por sua vez, exibe o gráfico *score* da projeção da PCA para os mesmos números de espectros adquiridos, também relativos aos filamentos de PLA, ABS e PETG,

mas que foram previamente tratados pelo método de SG. Nesta análise, a soma das duas primeiras PCs explicam 93% da variação dos dados, onde o PC-1 é responsável por 49% da explicação da variância e o PC-2 por 44%. Tais percentuais correspondem a valores satisfatórios para verificação de variância das amostras. Na avaliação do PC-1, observa-se a formação de um grupo distribuído de amostras de PLA situadas nos quadrantes positivos do eixo (I e IV), enquanto há a formação de grupos de ABS e PETG na região dos valores negativos (II e III). A distinção entre as amostras desses últimos polímeros é nítida ao se analisar a PC-2, em que nota-se agrupamentos de PETG localizados no quadrante positivo do eixo (II) e ABS no quadrante negativo (III).

Figura 28 – Gráfico *score* da PCA realizada no conjunto de dados com pré-tratamento.

Fonte: Autoria Própria.

A primeira importante verificação consiste em avaliar o nível de semelhança entre as amostras, visto que em análises PCA os espectros de elevada correlação tendem a se agruparem em uma mesma região do gráfico *score*. Aqui, constata-se a evidente aproximação entre espectros de um mesmo material, ao passo que se observa claramente o distanciamento de espectros de materiais distintos. Contudo, no quadrante II, nota-se a presença de um agrupamento de amostras de PLA e ABS, que representam os espectros que não absorvem a radiação na região de comprimento de onda estudado; isto é, esses espectros não apresentam bandas de absorção visíveis na faixa entre 1000 a 1700 nm. Conforme mostrado na Figura 29, tais resultados ocorrem em amostras de PLA e ABS das cores cinza e preto, provenientes dos fabricantes Cliever® e 3D Lab®. Uma interpretação para tal resultado é que, possivelmente, os níveis de pigmentação, corante e/ou outros aditivos influenciaram

diretamente na absorção no infravermelho próximo, de modo que as informações espectrais dos polímeros tenham sido encobertas pelas informações dessas composições. A exceção está na amostra de PLA cinza da Cliever®, que apresentou espectros no padrão do próprio material.

Figura 29 – Espectros NIR de PLA e ABS com baixo sinal de absorbância.

Fonte: Autoria Própria.

As curvas presentes no gráfico *loading* da Figura 30 representam as contribuições com que cada eixo original exerce na composição dos novos eixos da PCA, desenvolvida para o conjunto de dados espectrais previamente tratados por SG. Tais curvas fornecem informações complementares ao gráfico *score*, permitindo efetivamente compreender o processo de reconhecimento de padrão estabelecido por essa análise multivariada (SILVA, 2001; FERREIRA, 2014). As faixas de comprimento de onda em que se verificam os picos de *loading* indicam as regiões mais relevantes para a formação de cada eixo principal (PC-1 e PC-2). Conforme se observa, as bandas de comprimento de onda descritoras para a formação da PC-1 foram aquelas próximas a 1139 nm (banda de absorbância representativa do ABS), a 1166 nm (banda de absorbância representativa do PLA) e a 1180 nm (banda de absorbância representativa do PETG). Com relação a curva *loading* da PC-2, nota-se um aspecto semelhante ao visto para a PC-1, sobretudo revelando regiões de comprimento de onda próximas a 1116 nm (bandas de absorbância representativas do PETG), a 1136 nm (banda de absorbância representativa do ABS) e a 1136 nm (banda de absorbância representativa do PLA), como as mais significativas para a formação deste eixo principal. Ademais, observa-se que as bandas de absorção das faixas de 1300 a 1500 nm e 1600 a 1700 nm, existentes nos espectros dos três materiais, também foram significativas para

a inspeção de padrão entre as amostras, tanto para PC-1 quanto para a PC-2. Esses resultados confirmam a existência de informações espectrais intrínsecas aos materiais, as quais são fundamentais para a distinção entre as classes.

Figura 30 – Gráfico *loading* e as bandas de absorbância contribuintes para a criação da PC-1 e PC-2.

Fonte: Autoria Própria.

4.1.3 Análise Discriminante Linear (LDA)

A Tabela 5 mostra a matriz confusão resultante da LDA gerada para a classificação estatística dos dados do conjunto de calibração, onde as células verdes e vermelhas indicam a quantidade de predições corretas e incorretas, respectivamente. O conjunto de calibração é composto por 80 amostras medidas em 228 valores de comprimento de onda, contendo 70% dos dados totais, os quais foram selecionados pelo algoritmo Kennard-Stone. Segundo se observa, o modelo criado realizou o treinamento com acurácia de 95%, verificada por apenas quatro especificações imprecisas relativas a classificação de ABS como sendo PLA. Essas especificações correspondem aos espectros das amostras de ABS de coloração cinza; isto é, amostras que não apresentaram informações de absorbância significativas (Figura 29). A partir do modelo de classificação LDA desenvolvido, promoveu-se predições testes mediante uso dos dados contidos no conjunto de validação, do qual é composto por 34 amostras medidas em 228 valores de comprimento de onda. O conjunto de validação foi construído com 30% da quantidade de dados não selecionados anteriormente pelo algoritmo Kennard-Stone. A acurácia de classificações testes foi de 79,63%, acarretada

por oito predições incorretas, também referentes as amostras de ABS cinza categorizadas como sendo PLA. As métricas de precisão, *recall* e o decorrente *macro-f1* da validação do classificador resultaram em 59,62%, 76,73% e 0,67, respectivamente.

Tabela 5 – Matriz confusão resultante da classificação do modelo de calibração.

		Previsto		
Real		PLA	ABS	PETG
	PLA	17	0	0
	ABS	4	8	0
	PETG	0	0	23

Fonte: Autoria Própria.

Os resultados comprovam o elevado desempenho de classificação da LDA para dados espectrais, tendo em vista o alto percentual de acurácia de predição alcançado no treinamento e validação do modelo. Exemplificando, as amostras de PLA de coloração preta, apresentaram poucas informações espectrais de acordo com a Figura 30, porém foram categorizados corretamente em sua totalidade. Todavia, o modelo foi incapaz de realizar a predições para as amostras de ABS de cor cinza, independentemente do fabricante. Ao se aplicar a LDA com as mesmas configurações empregadas anteriormente, entretanto com a ausência das amostras com sinal reduzido de absorbância, houve um aumento significativo no desempenho de reconhecimento do classificador. De fato, a acurácia de predição, tanto do modelo de calibração, quanto de validação do mesmo, atingiram 100% de acertos; isto é, todas as outras métricas calculadas atingiram seu valor máximo. Tais resultados suscitaram a necessidade da inserção de um nó de decisão no início do programa, que fosse capaz de discriminar a entrada da maior parte dos espectros sem informações de absorbância.

A análise exploratória permitiu ensaiar previamente todos os parâmetros e configurações indispensáveis para a construção do classificador desenvolvido por este trabalho. Com base nos resultados observados, criou-se um *roadmap* de implementação do algoritmo, conforme descrito pela Figura 22.

4.2 Algoritmo

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos na aplicação das técnicas de AM para a implementação do algoritmo projetado na análise exploratória, tendo como saídas esperadas a classificação dos espectros de filamentos poliméricos em PLA, ABS, PETG ou o direcionamento para a operação manual do sistema.

A Figura 32 apresenta os resultados da filtragem digital por SG por algoritmo do MATLAB®, configurado com os mesmos parâmetros definidos na análise exploratória. Verifica-se que os resultados de suavização e tratamento derivativo dos espectros se aproximam demasiadamente do que foi obtido anteriormente, exceto pela presença de alguns ruídos de sinal nas faixas de 900 e 1700 nm, conforme indicado pelas setas. Os ruídos revelam que a poda (*data pruning*) de sete valores nos intervalos extremos de comprimento de onda, se torna um procedimento indispensável para a manutenção do desempenho de classificação do modelo. O resultado final do tratamento é um conjunto de espectros com a linha base corrigida, bandas de absorbância bem definidas e reduzida sobreposição de picos.

Figura 32 – Espectros dos filamentos poliméricos pré-tratados por Savitzky-Golay via algoritmo MATLAB®.

Fonte: Autoria Própria.

4.2.2 Treinamento

A etapa de engenharia de atributos forneceu uma nova matriz a ser aplicada no treinamento do modelo, composta por 96 amostras de espectros tratados de PLA, ABS e PETG, medidas em 214 valores de comprimento de onda (96x214). Previamente, os dados foram projetados pelo algoritmo PCA do MATLAB®, no qual as duas primeiras componentes explicaram 94,4% da variância; isto é, explicam uma porcentagem muito

próxima ao revelado na análise exploratória. Os resultados mostram que a acurácia do treinamento do modelo, aplicando-se a validação cruzada de $k = 10$, se manteve no patamar máximo de 100% de acertos; ou seja, todas as amostras foram classificadas corretamente para cada uma das três classes. Isto comprova a elevada capacidade de predição no processo de treinamento do classificador projetado.

A performance de acurácia do modelo pode ser melhor compreendida ao se observar o mecanismo de classificação desenvolvido pela LDA, quando auxiliado pelo agrupamento dos *scatters* do gráfico *score* da PCA. A Figura 33 mostra a disposição dos planos de decisão (PLA-ABS, PLA-PETG e ABS-PETG), responsáveis pelas divisões estabelecidas entre os *scatters* de cada classe. Constata-se que as amostras de PLA, ABS e PETG estão agrupadas em regiões limitadas e distintas no espaço tridimensional e, deste modo, entende-se a razão pela qual o classificador obteve êxito em categorizar os agrupamentos durante o processo de treinamento. Segundo [Ferreira \(2014\)](#), a LDA assume que as classes são linearmente separáveis. Portanto, fica comprovado a importância do pré-tratamento dos espectros e a projeção efetiva da PCA, uma vez que é fundamental para a LDA que amostras similares estejam reunidas e distribuídas separadamente dos agrupamentos de outras classes.

Figura 33 – Conjunto de amostras definidas no espaço tridimensional e separadas pelos planos de decisão da LDA.

Fonte: Autoria Própria.

4.2.3 Avaliação e Testes

A avaliação do modelo de classificação ocorreu com base nas informações de dois novos subconjuntos de dados espectrais, descrevendo dois cenários de testes distintos. Esses dados foram criados por técnicas de *data augmentation* e geraram duas matrizes de entrada de tamanho 63x228 (subconjunto A) e 54x228 (subconjunto B). A Figura 34 apresenta os espectros resultantes de cada procedimento de aumento de dados, sendo os espectros da Figura 34-A e da Figura 34-B referentes as amostras selecionadas do subconjunto A e B, respectivamente. Em primeira análise, nota-se a evidente semelhança nas configurações das curvas de espectros da Figura 34-A e os espectros originais, retratados na Figura 24. Em contrapartida, a Figura 34-B revela que a medida em que há o aumento percentual do sinal de absorbância de um material sobre o outro, o espectro perde seu formato padrão. Como pode ser observado, na proporção em que se amplia o percentual de sinal de 5% para 45% de ABS em PLA, aumenta-se o pico de absorbância de regiões específicas do espectro, tais como indicadas pelas setas na região de comprimento de onda de 1136 e 1192 nm. Essas novas características de absorbância são fundamentais para realização de testes do modelo treinado, tendo em vista a possibilidade de mensurar o limite de classificação em condições inéditas.

Figura 34 – Resultado do *data augmentation*: (A) espectros do subconjunto A e (B) espectros do subconjunto B.

Fonte: Autoria Própria.

O modelo de classificação, quando testado por dados do subconjunto A, confirma a estabilidade do classificador já que o resultado da acurácia de predição atingiu o percentual de 100%; isto é, valores máximos de precisão, *recall* e *macro-f1*. Assim, atesta-se a capacidade do modelo em reconhecer padrões de dados espectrais similares aos utilizados

no treinamento, mesmo com a presença de pequenas variações ou ruídos nos espectros. Em contrapartida, um limite de desempenho foi encontrado ao promover testes empregando os dados do subconjunto B, relativos aos espectros obtidos pela mescla percentual da absorbância de materiais distintos. A Tabela 6 apresenta a matriz confusão decorrente dos testes com as amostras do subconjunto B, considerando as classificações corretas dadas ao material de maior porcentagem de sinal de absorbância; novamente, as células verdes indicam a quantidade de predições corretas e as vermelhas as incorretas. Nesse caso, a acurácia de classificação foi de aproximadamente 84%, aferido por 42 identificações corretas e 12 equivocadas. Dentre essas últimas, sete erros de identificação ocorreram com amostras de proporção 55%/45%, quatro com as de 70%/30%, e apenas um erro foi relativo a fração 90%/10%. Tais apurações mostram que conforme se aumenta o sinal de absorbância do espectro de um material no outro, maior é a probabilidade de imprecisão do classificador. Contudo, ao se observar as configurações dos espectros identificados incorretamente, verifica-se que as posições das bandas de absorbância (Figura 34-B) se aproximam demasiadamente em comparação aos espectros padrões das classes previstas (Figura 24), o que explica tais classificações.

Tabela 6 – Matriz confusão resultante dos testes com os dados do subconjunto B.

		Previsto		
		PLA	ABS	PETG
Real	PLA	17	2	2
	ABS	3	16	2
	PETG	1	2	9

Fonte: Autoria Própria.

A Tabela 7 exhibe os resultados dos cálculos das métricas de desempenho, correspondentes aos testes realizados mediante os dados do subconjunto B. Nota-se que a precisão e o *recall* de classificação dos filamentos poliméricos de PLA e ABS se mantiveram em torno do mesmo patamar (80,95% e 80%, respectivamente), enquanto as métricas relativas ao PETG apresentaram um decréscimo em cerca de 11%. A explicação para esses resultados pode estar relacionada ao desequilíbrio existente no conjunto de dados de treinamento, uma vez que há um número maior de exemplos das classes PLA e ABS em comparação ao PETG. Sobre esta questão, [Xie e Qiu \(2007\)](#) desenvolveram um estudo de análise gráfica

e estatística, que mostrou teoricamente que o desequilíbrio de dados produz um efeito negativo em classificadores LDA. Em contraste, [Xue e Titterington \(2008\)](#) reavaliaram essa tese com base em estudos empíricos e de simulação, de forma a concluir que o desequilíbrio dos dados não corresponde no único fator agente da redução de desempenho de classificadores LDA. De todo modo, o percentual de acertos de classificações para amostras com mais proporção de PETG foi satisfatório (75%) e, segundo referências consultadas ([BROWN, 2018](#); [TISCHIO; WEISS, 2019](#)), o valor do *macro-f1* atingido pelo classificador é bastante positivo, principalmente quando se considera as particularidades dos dados do subconjunto B.

Tabela 7 – Métricas de desempenho calculadas para as classes e o classificador.

Métrica	PLA	ABS	PETG	Classificador
Acurácia (%)	84,00	82,32	85,71	84,04
Precisão (%)	80,95	80,00	69,23	76,73
Recall (%)	80,95	80,00	69,23	76,73
<i>f1-score/macro-f1</i>	0,80	0,80	0,69	0,76

Fonte: Autoria Própria.

Os testes efetuados com o subconjunto B visou desafiar o classificador e compreender a predição estabelecida em casos onde as informações dos espectros se distanciam das cedidas em etapa de treinamento. Observa-se que a medida em que se aumenta o percentual das informações de um material sobre o outro, os aspectos dos sinais de absorbância se aproximam ou se distanciam dos exemplos aprendidos. Deste modo, o classificador realiza a predição conforme a comparação de semelhança entre os espectros das classes inseridas e/ou aproximação dos agrupamentos dos *scatters* delimitados pelos planos de decisão descritos na Figura 33. Portanto, torna-se essencial para a eficiência do modelo de classificação desenvolvido, a introdução de um conjunto de treinamento de amostras variadas e bem definidas.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

5.1 Conclusões

O presente trabalho atesta a possibilidade de desenvolvimento de um script de programação apto a identificar previamente a matéria-prima empregada na fabricação aditiva, permitindo acionar o sistema de ajuste automático dos parâmetros de processamento do equipamento. Os resultados comprovaram que o alinhamento entre os elementos da Quimiometria e os fundamentos de aprendizado de máquinas pode ser efetivo para a criação de um classificador de alto desempenho.

O *roadmap* para a implementação do classificador foi construído com base nas análises exploratórias dos dados, as quais concederam uma visão geral da efetividade dos algoritmos adotados, bem como permitiu a definição da linha de decisões do programa. O uso da espectroscopia NIR como medida de identificação se confirmou como sendo particularmente eficaz, tendo em vista a sua capacidade de indicar características próprias e inerentes a cada classe de material. Essas características se tornam ainda mais proeminentes quando ampliadas por processos de filtragem digital e suavização de ruídos, comprovando a importância do emprego de algoritmos derivativos como os de Savitzky-Golay. A análise exploratória também provou a relevância do redimensionamento dos dados desenvolvido pela PCA, no que se refere ao desempenho de classificação de modelos lineares como a LDA. O resultado da acurácia do classificador foi a priori de 95% de acertos, quando o conjunto de dados treinado era também composto por espectros sem informações de absorbância (PLA e ABS de colorações cinza e preto). Isto suscitou a criação de um novo nó de decisão baseado na regressão linear do espectro e cálculo da inclinação da curva, do qual foi determinante para o aumento do desempenho de predição (100% de acurácia).

Desta forma, a estruturação do programa foi organizada por etapas de captura e entrada de dados de espectroscopia, engenharia de atributos, definição do modelo de classificação, avaliação e testes. Os resultados do pré-tratamento de dados via codificação MATLAB® se aproximaram demasiadamente daqueles alcançados na análise exploratória, à exceção de desvios que foram ajustados por *data pruning*. Tais procedimentos foram essenciais para a obtenção de um treinamento com máxima acurácia, quando aplicada a validação cruzada de 10 segmentos. Os testes com novos dados mostraram completo reconhecimento de padrões de espectros similares, assim como uma boa performance para a métricas de espectros com aspectos variados. Cabe ressaltar que esses resultados podem ser otimizados com a introdução de novas espécies de espectros, providos por conjuntos de dados de classes equilibradas.

Com base no que foi apresentado, conclui-se que o classificador proposto equivale a

um recurso excepcionalmente promissor para a otimização de um programa que automatiza os processos de MA habituais. Conforme descrito na revisão, o campo de aplicação da fabricação aditiva vem se ampliando significativamente, tanto no setor produtivo, quanto como ferramenta educacional ou equipamento de uso doméstico. Também, foi relatado o surgimento de dispositivos de sensoramento miniaturizados e a relevância dos parâmetros de processamento para a qualidade da produção por processos aditivos. Por esses motivos, o sistema tem potencial de atender uma demanda crescente por impressoras 3D mais controláveis, independentes e seguras, assim como de uniformizar objetos fabricados com a aplicação de instrumentos modernos de detecção. Por fim, vale destacar que a proposta deste projeto se encontra em fase final de patenteamento, o que confirma o ineditismo do trabalho.

Todos os códigos fontes do MATLAB® e os materiais adicionais relativos ao projeto estão disponíveis para acesso no repositório Github via link: <<https://github.com/Danxcunha/identification-of-polymers-intended-for-additive-manufacturing>>.

5.2 Trabalhos Futuros

Os resultados observados e os conhecimentos adquiridos por revisões bibliográficas geraram uma série de propostas de trabalhos futuros, como segue:

1. Ampliar a gama de materiais e número de amostras aplicadas no treinamento do classificador;
2. Empregar novos modelos de classificação, tendo em vista as informações dadas por [Ferreira \(2014\)](#), a qual cita um limite de cinco classes para o máximo desempenho da LDA;
3. Estudar a relação de pigmentação/corantes e sinal de absorbância em espectros de filamentos poliméricos de colorações escuras;
4. Gerar o link de entrada dos parâmetros de processamento a partir dos resultados de identificação;
5. Testar o sistema integrado proposto *in loco*, executando o classificador mediante auxílio de micro-processadores;
6. Fabricar objetos a partir do sistema de automatização desenvolvido e averiguar o nível da qualidade de processamento;
7. Aplicar um instrumento de pesquisa, abordando indústrias, empresas e usuários de MA, objetivando ter *feedback* da viabilidade comercial do sistema de automatização de processos de fabricação aditiva.

REFERÊNCIAS

- 3D FILA. *Ficha técnica dos filamentos*. [S.l.], 2020. Disponível em: <<https://3dfila.com.br/category/guia-de-solucoes/>>.
- 3D LAB. *Propriedades técnicas dos materiais para impressão 3D*. [S.l.], 2020. Disponível em: <<https://conteudo.3dlab.com.br/f656123f0ce0f11437a8>>.
- ALASSALI, A.; FIORE, S.; KUCHTA, K. Assessment of plastic waste materials degradation through Near Infrared Spectroscopy. **Waste Management**, Elsevier BV, v. 82, p. 71–81, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.wasman.2018.10.010>>.
- ALLEGRETTA, I. et al. Macro-classification of meteorites by portable energy dispersive x-ray fluorescence spectroscopy (pED-XRF), Principal Component Analysis (PCA) and Machine Learning algorithms. **Talanta**, Elsevier BV, v. 212, p. 120785, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.talanta.2020.120785>>.
- ALSSABBAGH, M. et al. Evaluation of 3d printing materials for fabrication of a novel multi-functional 3d thyroid phantom for medical dosimetry and image quality. **Radiation Physics and Chemistry**, Elsevier BV, v. 135, p. 106–112, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.radphyschem.2017.02.009>>.
- AMIRABADI, S.; RODRIGUE, D.; DUCHESNE, C. Characterization of PLA-talc films using NIR chemical imaging and Multivariate Image Analysis techniques. **Polymer Testing**, Elsevier BV, v. 68, p. 61–69, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.polymertesting.2018.03.047>>.
- ANDERSON, M. R.; CAFARELLA, M. Input selection for fast feature engineering. In: **2016 IEEE 32nd International Conference on Data Engineering (ICDE)**. IEEE, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109%2Ficde.2016.7498272>>.
- ARMENTA, J. L. R.; SALAZAR-CRUZ, B. A. **Polymer Rheology**. 1^a. ed. S.l: IntechOpen, 2018. ISBN 978-1789840018.
- ATTARAN, M. The rise of 3-d printing: The advantages of Additive Manufacturing over traditional manufacturing. **Business Horizons**, Elsevier BV, v. 60, p. 677–688, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.bushor.2017.05.011>>.
- AURAS, R. **Poly(lactic acid): Synthesis, structures, properties, processing, and applications**. Hoboken, EUA: Wiley, 2010. ISBN 978-0470293669.
- BARBOSA, T. V. **Fabricação de iscaffolds/i de polímero reforçado para aplicação na bioengenharia tecidual**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606%2Fd.18.2019.tde-14022019-084241>>.
- BATISTA, M. R. S. **A utilização de algoritmos de aprendizado de máquinas em problemas de classificação**. Dissertação (Mestrado) — Universidade de São Paulo, 2019.

- BORADE, S. N.; DESHMUKH, R. R.; RAMU, S. Face recognition using fusion of PCA and LDA: Borda count approach. In: **2016 24th Mediterranean Conference on Control and Automation (MED)**. IEEE, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1109%2Fmed.2016.7536065>.
- BORRA, S.; CIACCIO, A. D. Measuring the prediction error: A comparison of cross-validation, bootstrap and covariance penalty methods. **Computational Statistics & Data Analysis**, Elsevier BV, v. 54, p. 2976–2989, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.csda.2010.03.004>.
- BRAGA, A. de P.; CARVALHO, A. P. de Leon de; LUDERMIR, T. B. **Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicacoes**. Rio de Janeiro, BR: LTC Editora, 2012. ISBN 978-8521615644.
- BREIMAN, L. et al. **Classification and regression trees**. New York, EUA: Chapman & Hall, 1993. ISBN 978-0412048418.
- BRETAS, R. E. S.; D'ÁVILA, M. A. **Reologia de polímeros fundidos**. 2^a. ed. São Carlos, BR: EdUFSCar, 2005. ISBN 978-8576000488.
- BRO, R.; SMILDE, A. K. Principal Component Analysis. **Analytical Methods**, Royal Society of Chemistry (RSC), v. 6, p. 2812–2831, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1039%2Ffc3ay41907j>.
- BROWN, J. B. Classifiers and their metrics quantified. **Molecular Informatics**, Wiley, v. 37, p. 1700127, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/minf.201700127>.
- BRYNJOLFSSON, E.; MITCHELL, T. What can Machine Learning do? workforce implications. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 358, p. 1530–1534, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1126%2Fscience.aap8062>.
- BURNS, D. A.; CIURCZAK, E. W. **Handbook of Near Infrared Analysis**. Boca Raton, EUA: CRC Press, 2008. ISBN 978-0849373930.
- CALIGNANO, F. et al. Overview on Additive Manufacturing technologies. **Proceedings of the IEEE**, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 105, p. 593–612, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1109%2Fjproc.2016.2625098>.
- CALLISTER, W. D.; RETHWISCH, D. G. **Ciência e engenharia de materiais: Uma introdução**. 7^a. ed. Rio de Janeiro, BR: LTC, 2007. ISBN 978-8521615958.
- CANEVAROLO, S. a. **Ciência dos polímeros: um texto básico para tecnólogos e engenheiros**. 2^a. ed. São Carlos, BR: Arliber, 2006. ISBN 978-8588098107.
- CASTRO-AGUIRRE, E. et al. Poly(lactic acid): Mass production, processing, industrial applications, and end of life. **Advanced Drug Delivery Reviews**, Elsevier BV, v. 107, p. 333–366, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.addr.2016.03.010>.
- CAZÓN, A. et al. Pilot study describing the design process of an oil sump for a competition vehicle by combining Additive Manufacturing and carbon fibre layers. **Virtual and Physical Prototyping**, Informa UK Limited, v. 10, p. 149–162, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1080%2F17452759.2015.1076240>.

- CHEN, H. et al. The combined optimization of Savitzky-Golay smoothing and multiplicative scatter correction for FT-NIR PLS models. **ISRN Spectroscopy**, Hindawi Limited, v. 2013, p. 1–9, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1155%2F2013%2F642190>>.
- CHEN, M. et al. **Remote operations of Additive Manufacturing devices**. 2014. US 10350820B2. Disponível em: <<https://patents.google.com/patent/US10350820B2/en>>.
- CHEN, T. et al. Poly(ethylene glycol-co-1,4-cyclohexanedimethanol terephthalate) random copolymers: Effect of copolymer composition and microstructure on the thermal properties and crystallization behavior. **RSC Advances**, Royal Society of Chemistry (RSC), v. 5, p. 60570–60580, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1039%2F5ra09252c>>.
- CHEN, T.; ZHANG, W.; ZHANG, J. Alkali resistance of poly(ethylene terephthalate) (PET) and poly(ethylene glycol-co-1,4-cyclohexanedimethanol terephthalate) (PETG) copolyesters: The role of composition. **Polymer Degradation and Stability**, Elsevier BV, v. 120, p. 232–243, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.polymdegradstab.2015.07.008>>.
- CHEN, Y. et al. Review of multifarious applications of poly(lactic acid). **Polymer-Plastics Technology and Engineering**, Informa UK Limited, v. 55, p. 1057–1075, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080%2F03602559.2015.1132465>>.
- CHING, Y. et al. Applications of thermoplastic-based blends. In: **Recent Developments in Polymer Macro, Micro and Nano Blends**. Elsevier, 2017. p. 111–129. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fb978-0-08-100408-1.00005-4>>.
- CHOCKALINGAM, K.; JAWAHAR, N.; PRAVEEN, J. Enhancement of anisotropic strength of fused deposited ABS parts by genetic algorithm. **Materials and Manufacturing Processes**, Informa UK Limited, v. 31, p. 2001–2010, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080%2F10426914.2015.1127949>>.
- CICALA, G. et al. Polylactide (PLA) filaments a biobased solution for Additive Manufacturing: Correlating rheology and thermomechanical properties with printing quality. **Materials**, MDPI AG, v. 11, p. 1191, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fma11071191>>.
- CORNEJO-BÁEZ, A. A. et al. Chemometrics: A complementary tool to guide the isolation of pharmacologically active natural products. **Drug Discovery Today**, Elsevier BV, v. 25, p. 27–37, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.drudis.2019.09.016>>.
- CORTÉS, V. et al. Monitoring strategies for quality control of agricultural products using visible and Near Infrared spectroscopy: A review. **Trends in Food Science & Technology**, Elsevier BV, v. 85, p. 138–148, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.tifs.2019.01.015>>.
- CUAN-URQUIZO, E. et al. Characterization of the mechanical properties of FFF structures and materials: A review on the experimental, computational and theoretical approaches. **Materials**, MDPI AG, v. 12, p. 895, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fma12060895>>.
- CUMMINGS, M. M. Man versus Machine or Man Machine? **IEEE Intelligent Systems**, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 29, p. 62–69, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109%2Fmis.2014.87>>.

- CUNHA, D. A. L. V. et al. Fabrication and characterization of scaffolds of poly(-caprolactone)/biosilicate® biocomposites prepared by generative manufacturing process. **International Journal of Biomaterials**, Hindawi Limited, v. 2019, p. 1–11, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1155%2F2019%2F2131467>>.
- DHINAKARAN, V. et al. A review on recent advancements in Fused Deposition Modeling. **Materials Today: Proceedings**, Elsevier BV, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.matpr.2019.12.036>>.
- DILBEROGLU, U. M. et al. The role of Additive Manufacturing in the era of Industry 4.0. **Procedia Manufacturing**, Elsevier BV, v. 11, p. 545–554, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.promfg.2017.07.148>>.
- DONG, G.; LIU, H. **Feature engineering for Machine Learning and data analytics**. Boca Raton, EUA: CRC Press/Taylor & Francis Group, 2018. ISBN 978-1138744387.
- DOUGLAS, R. et al. Rapid prediction of total petroleum hydrocarbons concentration in contaminated soil using NIR spectroscopy and regression techniques. **Science of The Total Environment**, Elsevier BV, v. 616-617, p. 147–155, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.scitotenv.2017.10.323>>.
- ELGHIBARI, F.; ELOUAHBI, R.; KHOUKHI, F. E. Data mining for detecting e-learning courses anomalies: An application of decision tree algorithm. **International Journal on Advanced Science, Engineering and Information Technology**, Insight Society, v. 8, p. 980, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.18517%2Fijaseit.8.3.2756>>.
- FACELI, K. et al. **Inteligência Artificial: Uma abordagem de aprendizado de máquinas**. Rio de Janeiro, BR: LTC, 2011. ISBN 978-8521618805.
- FAN, Y.; MA, S.; WU, T. Individual wheat kernels vigor assessment based on NIR spectroscopy coupled with Machine Learning methodologies. **Infrared Physics & Technology**, Elsevier BV, v. 105, p. 103213, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.infrared.2020.103213>>.
- FANG, V. et al. **A review of near infrared reflectance properties of metal oxide nanostructures**. Lower Hutt, NZ: GNS Science, 2013. ISBN 978-1972192849.
- FARA, P. Newton shows the light: A commentary on Newton (1672). **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 373, p. 20140213, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1098%2Frst.2014.0213>>.
- FARAH, S.; ANDERSON, D. G.; LANGER, R. Physical and mechanical properties of PLA, and their functions in widespread applications: A comprehensive review. **Advanced Drug Delivery Reviews**, Elsevier BV, v. 107, p. 367–392, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.addr.2016.06.012>>.
- FARCAS, M. T. et al. Acrylonitrile butadiene styrene (ABS) and polycarbonate (PC) filaments three-dimensional (3-d) printer emissions-induced cell toxicity. **Toxicology Letters**, Elsevier BV, v. 317, p. 1–12, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.toxlet.2019.09.013>>.

- FERDINAND, J. P. Innovation communities and the dilemma of entrepreneurship in the 3d printing field. In: **Entrepreneurship in Innovation Communities**. Springer International Publishing, 2017. p. 83–132. Disponível em: <https://doi.org/10.1007%2F978-3-319-66842-0_5>.
- FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações**. 1^a. ed. Campinas, BR: Editora da Unicamp, 2014. ISBN 978-8526810631.
- FILHO, L. R. A. et al. Estratégia de dupla filtragem utilizando o filtro de Savitzky-Golay em dados espectrais de supernovas. **Revista Brasileira de Computação Aplicada**, UPF Editora, v. 11, p. 86–99, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.5335%2Frbca.v11i2.9179>>.
- FINK, J. K. Acrylonitrile-butadiene-styrene polymers. In: **Handbook of Engineering and Specialty Thermoplastics**. John Wiley & Sons, Inc., 2010. p. 211–267. Disponível em: <<https://10.1002/9780470881712.ch8>>.
- FISHER, R. A. The use of multiple measurements in taxomic problems. **Annals of Eugenics**, Wiley, v. 7, p. 179–188, 1936. Disponível em: <<https://doi.org/10.1111%2Fj.1469-1809.1936.tb02137.x>>.
- FOLHA, T. O. **Uso da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) para a avaliação de parâmetros de qualidade de farinhas de mandioca**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2014.
- FORATO, L. A. et al. A espectroscopia na região do infravermelho e algumas aplicações. Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (Embrapa Instrumentação), 2010. ISSN 1518-7179. Disponível em: <<http://www.infoteca.cnptia.embrapa.br/infoteca/handle/doc/884592>>.
- FORD, S.; DESPEISSE, M. Additive Manufacturing and sustainability: An exploratory study of the advantages and challenges. **Journal of Cleaner Production**, Elsevier BV, v. 137, p. 1573–1587, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.jclepro.2016.04.150>>.
- GAO, W. et al. The status, challenges, and future of Additive Manufacturing in engineering. **Computer-Aided Design**, Elsevier BV, v. 69, p. 65–89, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.cad.2015.04.001>>.
- GARMARUDI, A. B. et al. Origin based classification of crude oils by infrared spectrometry and chemometrics. **Fuel**, Elsevier BV, v. 236, p. 1093–1099, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.fuel.2018.09.013>>.
- GELABERT, P. et al. DLP NIRscan nano: an ultra-mobile DLP-based Near Infrared Bluetooth spectrometer. In: DOUGLASS, M. R.; KING, P. S.; LEE, B. L. (Ed.). **Emerging Digital Micromirror Device Based Systems and Applications VIII**. SPIE, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1117%2F12.2231054>>.
- GOLLAPUDI, S. **Practical Machine Learning : tackle the real-world complexities of modern Machine Learning with innovative and cutting-edge techniques**. Birmingham, ING: Packt Publishing, 2016. ISBN 978-1784399689.

- GRASSI, S.; ALAMPRESE, C. Advances in NIR spectroscopy applied to process analytical technology in food industries. **Current Opinion in Food Science**, Elsevier BV, v. 22, p. 17–21, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.cofs.2017.12.008>>.
- GROZA, J. R.; SHACKELFORD, J. **Materials Processing Handbook**. 1^a. ed. S.l.: CRC Press, 2019. ISBN 978-0367389307.
- GUESSASMA, S.; BELHABIB, S.; NOURI, H. Printability and tensile performance of 3d printed polyethylene terephthalate glycol using Fused Deposition Modelling. **Polymers**, MDPI AG, v. 11, p. 1220, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fpolym11071220>>.
- HAIR, J. **Análise multivariada de dados**. Porto Alegre, BR: Bookman, 2009. ISBN 978-8577804023.
- HASSABIS, D. Artificial Intelligence: Chess match of the century. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 544, p. 413–414, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038%2F544413a>>.
- HASSANIN, H. et al. Controlling the properties of additively manufactured cellular structures using Machine Learning approaches. **Advanced Engineering Materials**, Wiley, v. 22, p. 1901338, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002%2Fadem.201901338>>.
- HAVERKORT, B. R.; ZIMMERMANN, A. Smart Industry: How ICT will change the game! **IEEE Internet Computing**, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 21, p. 8–10, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109%2Fmic.2017.22>>.
- HERAS, E. S. et al. Filament advance detection sensor for Fused Deposition Modelling 3d printers. **Sensors**, MDPI AG, v. 18, p. 1495, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fs18051495>>.
- HU, Y. et al. Newly developed techniques on polycondensation, ring-opening polymerization and polymer modification: Focus on poly(lactic acid). **Materials**, MDPI AG, v. 9, p. 133, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fma9030133>>.
- HUANG, S. H. et al. Additive Manufacturing and its societal impact: A literature review. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer Science and Business Media LLC, v. 67, p. 1191–1203, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs00170-012-4558-5>>.
- HUCK, C. W. The future role of Near Infrared Spectroscopy in polymer and chemical analysis. **NIR news**, SAGE Publications, v. 27, p. 17–23, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1255%2Fnirn.1577>>.
- ISHIKAWA, D. et al. Potential of a newly developed high-speed near infrared (NIR) camera (compovision) in polymer industrial analyses: Monitoring crystallinity and crystal evolution of polylactic acid (PLA) and concentration of PLA in PLA/poly-(r)-3-hydroxybutyrate (PHB) blends. **Applied Spectroscopy**, SAGE Publications, v. 67, p. 1441–1446, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1366%2F13-07103>>.
- JEM, K. J.; TAN, B. The development and challenges of poly(lactic acid) and poly(glycolic acid). **Advanced Industrial and Engineering Polymer Research**, Elsevier BV, p. 60–70, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.aiepr.2020.01.002>>.

- JEREZ-MESA, R. et al. Finite element analysis of the thermal behavior of a RepRap 3d printer liquefier. **Mechatronics**, Elsevier BV, v. 36, p. 119–126, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.mechatronics.2016.04.007>>.
- JIANG, R.; KLEER, R.; PILLER, F. T. Predicting the future of Additive Manufacturing: A delphi study on economic and societal implications of 3d printing for 2030. **Technological Forecasting and Social Change**, Elsevier BV, v. 117, p. 84–97, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.techfore.2017.01.006>>.
- JIANG, Y. et al. Metabolizable semiconducting polymer nanoparticles for second Near Infrared photoacoustic imaging. **Advanced Materials**, Wiley, v. 31, p. 1808166, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002%2Fadma.201808166>>.
- JOHNSON, R. **Applied multivariate statistical analysis**. Upper Saddle River, EUA: Pearson Prentice Hall, 2007. ISBN 978-0131877153.
- JOLLIFFE, I. T.; CADIMA, J. Principal Component Analysis: A review and recent developments. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 374, p. 20150202, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1098%2Ffrsta.2015.0202>>.
- KIM, J. S. et al. Development of data-driven in-situ monitoring and diagnosis system of Fused Deposition Modeling (FDM) process based on support vector machine algorithm. **International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology**, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, p. 479–486, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2F978-94-007-5114-4>>.
- KLIPPSTEIN, H. et al. Fused Deposition Modeling for unmanned aerial vehicles (UAVs): A review. **Advanced Engineering Materials**, Wiley, v. 20, p. 1700552, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002%2Fadem.201700552>>.
- KODAMA, H. Automatic method for fabricating a three-dimensional plastic model with photo-hardening polymer. **Review of Scientific Instruments**, AIP Publishing, v. 52, p. 1770–1773, 1981. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063%2F1.1136492>>.
- KRAJUSHKINA, A. et al. Gait analysis based approach for parkinson's disease modeling with decision tree classifiers. In: **2018 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (SMC)**. IEEE, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109%2Fsmc.2018.00630>>.
- KROONENBERG, P. **Applied Multiway Data Analysis**. Hoboken, EUA: Wiley-Interscience, 2008. ISBN 978-0470237991.
- KUMAR, R.; SINGH, R.; AHUJA, I. Investigations of mechanical, thermal and morphological properties of FDM fabricated parts for friction welding applications. **Measurement**, Elsevier BV, v. 120, p. 11–20, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.measurement.2018.02.006>>.
- KUN, K. Reconstruction and development of a 3d printer using FDM technology. **Procedia Engineering**, Elsevier BV, v. 149, p. 203–211, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.proeng.2016.06.657>>.

- LAPLUME, A. O.; PETERSEN, B.; PEARCE, J. M. Global value chains from a 3d printing perspective. **Journal of International Business Studies**, Springer Science and Business Media LLC, v. 47, p. 595–609, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1057%2Fjibs.2015.47>.
- LI, N. et al. Progress in Additive Manufacturing on new materials: A review. **Journal of Materials Science & Technology**, Elsevier BV, v. 35, p. 242–269, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.jmst.2018.09.002>.
- LIGON, S. C. et al. Polymers for 3d printing and customized Additive Manufacturing. **Chemical Reviews**, American Chemical Society (ACS), v. 117, p. 10212–10290, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1021%2Facs.chemrev.7b00074>.
- LOKENS GARD, E. **Plásticos industriais: Teoria e aplicações**. 1ª. ed. São Paulo, BR: Cengage Learning, 2013. ISBN 978-8522111879.
- LOY, J. **Neural network projects with Python : the ultimate guide to using Python to explore the true power of neural networks through six projects**. Birmingham, UK: Packt Publishing, 2019. ISBN 978-1789138900.
- LUXBURG, U. von; SCHÖLKOPF, B. Statistical learning theory: Models, concepts, and results. In: **Handbook of the History of Logic**. Elsevier, 2011. p. 651–706. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fb978-0-444-52936-7.50016-1>.
- MANRICH, S. **Processamento de termoplásticos: rosca única, extrusão e matrizes, injeção e moldes**. 1ª. ed. São Carlos, BR: Artliber, 2005. ISBN 978-8588098305.
- MARK, H. **Chemometrics in spectroscopy**. San Diego, EUA: Elsevier Ltd. Academic Press, 2018. ISBN 978-0128053300.
- MARSLAND, S. **Machine Learning : an algorithmic perspective**. Boca Raton, EUA: CRC Press, 2015. ISBN 978-1466583283.
- MARTIN, R. et al. Machine Learning techniques for daily solar energy prediction and interpolation using numerical weather models. **Concurrency and Computation: Practice and Experience**, Wiley, v. 28, p. 1261–1274, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1002%2Fcppe.3631>.
- MARTINEZ, A.; KAK, A. PCA versus LDA. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 23, p. 228–233, 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1109%2F34.908974>.
- MATEEN, M. et al. Fundus image classification using VGG-19 architecture with PCA and SVD. **Symmetry**, MDPI AG, v. 11, p. 1, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.3390%2Fsym11010001>.
- MCLAUCHLIN, A. R.; GHITA, O.; GAHKANI, A. Quantification of PLA contamination in PET during injection moulding by in-line NIR spectroscopy. **Polymer Testing**, Elsevier BV, v. 38, p. 46–52, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.polymertesting.2014.06.007>.
- MCNAUGHT, A. **Compendium of chemical terminology : IUPAC recommendations**. Oxford, UK: Blackwell Science, 1997. ISBN 978-0865426849.

- MEDEIROS, A. D. de et al. Machine Learning for seed quality classification: An advanced approach using merger data from FT-NIR spectroscopy and x-ray imaging. **Sensors**, MDPI AG, v. 20, p. 4319, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fs20154319>>.
- MENANO, L. et al. Integration of 3d printing in art education: A multidisciplinary approach. **Computers in the Schools**, Informa UK Limited, v. 36, p. 222–236, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080%2F07380569.2019.1643442>>.
- MITCHELL, T. **Machine Learning**. Nova Iorque, EUA: McGraw-Hill, 1997. ISBN 978-0070428072.
- MODROÑO, S. et al. Handheld NIRS sensors for routine compound feed quality control: Real time analysis and field monitoring. **Talanta**, Elsevier BV, v. 162, p. 597–603, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.talanta.2016.10.075>>.
- MOHAMED, O. A.; MASOOD, S. H.; BHOWMIK, J. L. Optimization of Fused Deposition Modeling process parameters: A review of current research and future prospects. **Advances in Manufacturing**, Springer Science and Business Media LLC, v. 3, p. 42–53, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs40436-014-0097-7>>.
- MORAES, C. **Engenharia de automacao industrial**. Rio de Janeiro, BR: LTC, 2007. ISBN 9788521615323.
- NAZARENKO, D. V.; RODIN, I. A.; SHPIGUN, O. A. The use of Machine Learning in the analytical control of the preparations of medicinal plants. **Inorganic Materials**, Pleiades Publishing Ltd, v. 55, p. 1428–1438, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1134%2Fs0020168519140115>>.
- NETTO, O. P. **Um filtro iterativo utilizando árvores de decisão**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606%2Fd.95.2013.tde-10122013-185844>>.
- NGO, T. D. et al. Additive Manufacturing (3d printing): A review of materials, methods, applications and challenges. **Composites Part B: Engineering**, Elsevier BV, v. 143, p. 172–196, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.compositesb.2018.02.012>>.
- NOFAR, M. et al. Poly(lactic acid) blends: Processing, properties and applications. **International Journal of Biological Macromolecules**, Elsevier BV, v. 125, p. 307–360, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.ijbiomac.2018.12.002>>.
- NOFAR, M.; SALEHIYAN, R.; RAY, S. S. Rheology of poly(lactic acid) based systems. **Polymer Reviews**, Informa UK Limited, v. 59, p. 465–509, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080%2F15583724.2019.1572185>>.
- NOVAKOVA-MARCINCINOVA, L.; NOVAK-MARCINCIN, J. Testing of the ABS materials for application in Fused Deposition Modeling technology. **Applied Mechanics and Materials**, Trans Tech Publications, Ltd., v. 309, p. 133–140, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.4028%2Fwww.scientific.net%2Famm.309.133>>.
- OLIVEIRA, R. A. de; SILVA, A. P. B. da. William Herschel, os raios invisíveis e as primeiras ideias sobre radiação infravermelha. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, FapUNIFESP (SciELO), v. 36, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590%2Fs1806-11172014000400022>>.

OLIVERA, S. et al. Plating on Acrylonitrile–Butadiene–Styrene (ABS) plastic: A review. **Journal of Materials Science**, Springer Science and Business Media LLC, v. 51, p. 3657–3674, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs10853-015-9668-7>>.

ORTEGA, Z. et al. Theoretical–experimental evaluation of different biomaterials for parts obtaining by Fused Deposition Modeling. **Measurement**, Elsevier BV, v. 89, p. 137–144, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.measurement.2016.03.061>>.

PANTOJA, P. A. et al. Application of near infrared spectroscopy to the characterization of petroleum. In: **Analytical Characterization Methods for Crude Oil and Related Products**. John Wiley & Sons Ltd, 2017. p. 221–243. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002%2F9781119286325.ch8>>.

PARSEKIAN, P. H. L. et al. Failure monitoring and recovery system during manufacturing process. **IEEE Latin America Transactions**, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 18, p. 407–413, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109%2Ftla.2020.9085297>>.

PASQUINI, C. Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, practical aspects and analytical applications. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, FapUNIFESP (SciELO), v. 14, p. 198–219, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590%2Fs0103-50532003000200006>>.

PASQUINI, C. Near Infrared Dpectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – a review. **Analytica Chimica Acta**, Elsevier BV, v. 1026, p. 8–36, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.aca.2018.04.004>>.

PAVIA, D. et al. **Introdução à Espectroscopia**. São Paulo, BR: Cengage Learning, 2015. ISBN 978-8522123384.

PEARCE, J. M. et al. 3-d printing of open source appropriate technologies for self-directed sustainable development. **Journal of Sustainable Development**, Canadian Center of Science and Education, v. 3, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.5539%2Fjsd.v3n4p17>>.

PEETERS, J. R. et al. Forecasting waste compositions: A case study on plastic waste of electronic display housings. **Waste Management**, Elsevier BV, v. 46, p. 28–39, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.wasman.2015.09.019>>.

PEREIRA, T.; KENNEDY, J. V.; POTGIETER, J. A comparison of Traditional Manufacturing versus Additive Manufacturing, the best method for the job. **Procedia Manufacturing**, Elsevier BV, v. 30, p. 11–18, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.promfg.2019.02.003>>.

PETERSON, A. M. Review of Acrylonitrile–Butadiene–Styrene in Fused Filament Fabrication: A plastics engineering focused perspective. **Additive Manufacturing**, Elsevier BV, v. 27, p. 363–371, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.addma.2019.03.030>>.

PEZZEI, C. K. et al. Application of benchtop and portable Near infrared spectrometers for predicting the optimum harvest time of *Verbena officinalis*. **Talanta**, Elsevier BV, v. 169, p. 70–76, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.talanta.2017.03.067>>.

- PILA, A. D. **Seleção de atributos relevantes para aprendizado de máquina utilizando a abordagem de Rough Sets**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606%2Fd.55.2001.tde-13022002-153921>>.
- POPESCU, D. et al. FDM process parameters influence over the mechanical properties of polymer specimens: A review. **Polymer Testing**, Elsevier BV, v. 69, p. 157–166, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.polymertesting.2018.05.020>>.
- PRADA, J. G. et al. Direct digital manufacturing of an accelerator pedal for a Formula Student racing car. **Rapid Prototyping Journal**, Emerald, v. 22, p. 311–321, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1108%2Frpj-05-2014-0065>>.
- QUINLAN, J. R. Induction of decision trees. **Machine Learning**, Springer Science and Business Media LLC, v. 1, p. 81–106, 1986. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fbf00116251>>.
- RAHMAN, M. A.; RASHID, M. A.; AHMAD, M. Selecting the optimal conditions of Savitzky–Golay filter for fNIRS signal. **Biocybernetics and Biomedical Engineering**, Elsevier BV, v. 39, p. 624–637, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.bbe.2019.06.004>>.
- ROSSI, R. G. **Análise de Componentes Principais em Data Warehouses**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606%2Fd.45.2018.tde-07012018-182730>>.
- SAKUDO, A. Near Infrared Spectroscopy for medical applications: Current status, and future perspectives. **Clinica Chimica Acta**, Elsevier BV, v. 455, p. 181–188, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.cca.2016.02.009>>.
- SANCHEZ, L. C. et al. Rheological approach for an Additive Manufacturing printer based on material extrusion. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer Science and Business Media LLC, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs00170-019-04376-9>>.
- SANTANA, L. et al. Estudo comparativo entre PETG e PLA para impressão 3d através de caracterização térmica, química e mecânica. **Matéria (Rio de Janeiro)**, FapUNIFESP (SciELO), v. 23, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590%2Fs1517-707620180004.0601>>.
- SANTOS, M. C. dos. **Explorando técnicas para modelagem de dados agregados de óbitos provenientes de acidentes por automóvel**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606%2Fd.18.2016.tde-22012016-160021>>.
- SARKAR, D. Continuous numeric data: Strategies for working with continuous, numerical data. Towards Data Science), 2018. Disponível em: <<https://towardsdatascience.com/understanding-feature-engineering-part-1-continuous-numeric-data-da4e47099a7b>>.
- SARKAR, D.; BALI, R.; SHARMA, T. Machine Learning basics. In: **Practical Machine Learning with Python**. Apress, 2017. p. 3–65. Disponível em: <https://doi.org/10.1007%2F978-1-4842-3207-1_1>.

- SAVOLAINEN, J.; COLLAN, M. How Additive Manufacturing technology changes business models? **Additive Manufacturing**, Elsevier BV, v. 32, p. 101070, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.addma.2020.101070>>.
- SCHAFER, R. What is a Savitzky-Golay filter? [lecture notes]. **IEEE Signal Processing Magazine**, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 28, p. 111–117, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109%2Fmisp.2011.941097>>.
- SCHEIRS, J. **Compositional and failure analysis of polymers: A practical approach**. Chichester, EUA: Wiley, 2000. ISBN 978-0471625728.
- SCHELLY, C. et al. Open-source 3d printing technologies for education: Bringing Additive Manufacturing to the classroom. **Journal of Visual Languages & Computing**, Elsevier BV, v. 28, p. 226–237, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.jvlc.2015.01.004>>.
- SCHWAB, K. **A Quarta Revolucao Industrial**. São Paulo, BR: Edipro, 2019. ISBN 978-8572839785.
- SERRA, T. et al. 3d printed PLA based scaffolds. **Organogenesis**, Informa UK Limited, v. 9, p. 239–244, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.4161%2Forg.26048>>.
- SEXTON, J. et al. Investigating the identification of atypical sugarcane using NIR analysis of online mill data. **Computers and Electronics in Agriculture**, Elsevier BV, v. 168, p. 105111, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.compag.2019.105111>>.
- SIESLER, H. W. et al. **Near Infrared Spectroscopy: principles, instruments, applications**. Weinheim, DE: Wiley-VCH, 2008. ISBN 978-3527612673.
- SILVA, A. P. D. Efficient variable screening for Multivariate Analysis. **Journal of Multivariate Analysis**, Elsevier BV, v. 76, p. 35–62, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1006%2Fj.jmva.2000.1920>>.
- SING, S. L. et al. Direct selective laser sintering and melting of ceramics: A review. **Rapid Prototyping Journal**, Emerald, v. 23, p. 611–623, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1108%2Frpj-11-2015-0178>>.
- SKOOG, D. A.; HOLLER, J. F.; CROUCH, S. R. **Princípios de Análise Instrumental**. Porto Alegre, BR: Bookman, 2009. ISBN 978-8577804603.
- SOKOLOVA, M.; LAPALME, G. A systematic analysis of performance measures for classification tasks. **Information Processing & Management**, Elsevier BV, v. 45, p. 427–437, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.ipm.2009.03.002>>.
- SORIANO-DISLA, J. M. et al. Evaluation of the performance of portable Visible Infrared instruments for the prediction of soil properties. **Biosystems Engineering**, Elsevier BV, v. 161, p. 24–36, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.biosystemseng.2017.06.017>>.
- SOUSA, L. C. de et al. Desenvolvimento de modelos de calibração NIRS para minimização das análises de madeiras de ieucalyptus/i spp. **Ciência Florestal**, Universidad Federal de Santa Maria, v. 21, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.5902%2F198050983817>>.

- SOUZA, A. M. de; POPPI, R. J. Experimento didático de quimiometria para análise exploratória de óleos vegetais comestíveis por espectroscopia no infravermelho médio e análise de componentes principais: um tutorial, parte i. **Química Nova**, FapUNIFESP (SciELO), v. 35, p. 223–229, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590%2Fs0100-40422012000100039>>.
- SPINA, R. Performance analysis of colored PLA products with a Fused Filament Fabrication process. **Polymers**, MDPI AG, v. 11, p. 1984, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390%2Fpolym11121984>>.
- STANSBURY, J. W.; IDACAVAGE, M. J. 3d printing with polymers: Challenges among expanding options and opportunities. **Dental Materials**, Elsevier BV, v. 32, p. 54–64, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.dental.2015.09.018>>.
- STERN, A. et al. Additive Manufacturing: An education strategy for engineering students. **Additive Manufacturing**, Elsevier BV, v. 27, p. 503–514, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.addma.2019.04.001>>.
- SUN, B. et al. Perspective for equipment automation in process industries. **IFAC-PapersOnLine**, Elsevier BV, v. 50, p. 65–70, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.ifacol.2017.12.012>>.
- TANWAR, S.; RAMANI, T.; TYAGI, S. Dimensionality reduction using PCA and SVD in big data: A comparative case study. In: **Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social Informatics and Telecommunications Engineering**. Springer International Publishing, 2018. p. 116–125. Disponível em: <https://doi.org/10.1007%2F978-3-319-73712-6_12>.
- TARANTILI, P.; MITSAKAKI, A.; PETOUSSI, M. Processing and properties of engineering plastics recycled from waste electrical, and electronic equipment (WEEE). **Polymer Degradation and Stability**, Elsevier BV, v. 95, p. 405–410, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.polymdegradstab.2009.11.029>>.
- THANGAVEL, S.; PONNUSAMY, S.; SRIVASTAVA, A. A review on advancements in applications of Fused Deposition Modelling process. **Rapid Prototyping Journal**, Emerald, v. 26, p. 669–687, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1108%2FRpj-08-2018-0199>>.
- THOMPSON, M. K. et al. Design for Additive Manufacturing: Trends, opportunities, considerations, and constraints. **CIRP Annals**, Elsevier BV, v. 65, p. 737–760, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.cirp.2016.05.004>>.
- TIAN, X. et al. Interface and performance of 3d printed continuous carbon fiber reinforced PLA composites. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, Elsevier BV, v. 88, p. 198–205, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.compositesa.2016.05.032>>.
- TISCHIO, R. M.; WEISS, G. Identifying classification algorithms most suitable for imbalanced data. In: **ICDATA 2019**. IEEE, 2019. Disponível em: <<https://storm.cis.fordham.edu/gweiss/papers/icdata-2019-imbalanced.pdf>>.

- TLEGENOV, Y.; HONG, G. S.; LU, W. F. Nozzle condition monitoring in 3d printing. **Robotics and Computer-Integrated Manufacturing**, Elsevier BV, v. 54, p. 45–55, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.rcim.2018.05.010>>.
- TOFAIL, S. A. et al. Additive Manufacturing: Scientific and technological challenges, market uptake and opportunities. **Materials Today**, Elsevier BV, v. 21, p. 22–37, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.mattod.2017.07.001>>.
- TONG, P. et al. Improvement of NIR model by fractional order Savitzky–Golay derivation (FOSGD) coupled with wavelength selection. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Elsevier BV, v. 143, p. 40–48, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.chemolab.2015.02.017>>.
- TORRADO, A. R. et al. Characterizing the effect of additives to ABS on the mechanical property anisotropy of specimens fabricated by material extrusion 3d printing. **Additive Manufacturing**, Elsevier BV, v. 6, p. 16–29, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.addma.2015.02.001>>.
- TOSELLO, G. et al. Value chain and production cost optimization by integrating Additive Manufacturing in injection molding process chain. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer Science and Business Media LLC, v. 100, p. 783–795, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs00170-018-2762-7>>.
- UP 3D. **Catálogo**. [S.l.], 2020. Disponível em: <<https://www.up3d.com.br/informacoes>>.
- URHAL, P. et al. Robot assisted Additive Manufacturing: A review. **Robotics and Computer-Integrated Manufacturing**, Elsevier BV, v. 59, p. 335–345, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.rcim.2019.05.005>>.
- VAIRIS, A. et al. On the strain rate sensitivity of ABS and ABS Plus Fused Deposition Modeling parts. **Journal of Materials Engineering and Performance**, Springer Science and Business Media LLC, v. 25, p. 3558–3565, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs11665-016-2198-x>>.
- VALDERRAMA, L. et al. Proposal of a didactic experiment to teach Principal Component Analysis. **Química Nova**, GN1 Genesis Network, v. 39, p. 245–249, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.5935%2F0100-4042.20150166>>.
- VALINO, A. D. et al. Advances in 3d printing of thermoplastic polymer composites and nanocomposites. **Progress in Polymer Science**, Elsevier BV, v. 98, p. 101162, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.progpolymsci.2019.101162>>.
- VOLPATO, N. **Manufatura Aditiva: Tecnologias e aplicações da impressão 3D**. 1ª. ed. São Paulo, BR: Edgard Blucher Ltda, 2018. ISBN 978-8521211501.
- VYAVAHARE, S. et al. Fused deposition modelling: A review. **Rapid Prototyping Journal**, Emerald, v. 26, p. 176–201, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1108%2FRpj-04-2019-0106>>.
- WAGNER, T. et al. Development and characterisation of a compact light-addressable potentiometric sensor (LAPS) based on the digital light processing (DLP) technology for flexible chemical imaging. **Sensors and Actuators B: Chemical**, Elsevier BV, v. 170, p. 34–39, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.snb.2010.12.003>>.

- WANG, K.; GUO, P.; LUO, A.-L. A new automated spectral feature extraction method and its application in spectral classification and defective spectra recovery. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, Oxford University Press (OUP), v. 465, p. 4311–4324, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093%2Fmnras%2Fstw2894>>.
- WANG, T. et al. SeeFruits: Design and evaluation of a cloud-based ultra-portable NIRS system for sweet cherry quality detection. **Computers and Electronics in Agriculture**, Elsevier BV, v. 152, p. 302–313, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.compag.2018.07.017>>.
- WIEBECK, H. **Plásticos industriais: Teoria e aplicações**. 1^a. ed. São Paulo, BR: Artliber, 2005. ISBN 978-8588098275.
- WITTBRODT, B.; PEARCE, J. M. The effects of PLA color on material properties of 3-d printed components. **Additive Manufacturing**, Elsevier BV, v. 8, p. 110–116, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.addma.2015.09.006>>.
- WOHLERS, T. **Wohlers report 2019 : 3D printing and Additive Manufacturing state of the industry**. 24^a. ed. Fort Collins, EUA: Wohlers Associates, 2019. ISBN 978-0991333257.
- WONG, K. V.; HERNANDEZ, A. A review of Additive Manufacturing. **ISRN Mechanical Engineering**, Hindawi Limited, v. 2012, p. 1–10, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.5402%2F2012%2F208760>>.
- WONG, S. C. et al. Understanding data augmentation for classification: When to warp? In: **2016 International Conference on Digital Image Computing: Techniques and Applications (DICTA)**. IEEE, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/dicta.2016.7797091>>.
- WORKMAN, J. **Practical guide and spectral atlas for interpretive Near Infrared Spectroscopy**. Boca Raton, EUA: CRC Press, 2012. ISBN 978-1439875254.
- WU, H. et al. Recent developments in polymers and polymer nanocomposites for Additive Manufacturing. **Progress in Materials Science**, Elsevier BV, v. 111, p. 100638, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.pmatsci.2020.100638>>.
- WU, H.; WANG, Y.; YU, Z. In situ monitoring of FDM machine condition via acoustic emission. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, Springer Science and Business Media LLC, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs00170-015-7809-4>>.
- WU, N.; LI, X. Flame retardancy and synergistic flame retardant mechanisms of Acrylonitrile-Butadiene-Styrene composites based on aluminum hypophosphite. **Polymer Degradation and Stability**, Elsevier BV, v. 105, p. 265–276, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.polymdegradstab.2014.04.011>>.
- XIE, J.; QIU, Z. The effect of imbalanced data sets on LDA: A theoretical and empirical analysis. **Pattern Recognition**, Elsevier BV, v. 40, p. 557–562, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.patcog.2006.01.009>>.
- XUE, J.-H.; TITTERINGTON, D. M. Do unbalanced data have a negative effect on LDA? **Pattern Recognition**, Elsevier BV, v. 41, p. 1558–1571, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.patcog.2007.11.008>>.

- YAN, H.; SIESLER, H. W. Identification performance of different types of handheld Near Infrared (NIR) spectrometers for the recycling of polymer commodities. **Applied Spectroscopy**, SAGE Publications, v. 72, p. 1362–1370, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1177%2F0003702818777260>.
- ZALDIVAR, R. et al. Effect of initial filament moisture content on the microstructure and mechanical performance of ULTEM® 9085 3d printed parts. **Additive Manufacturing**, Elsevier BV, v. 24, p. 457–466, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.addma.2018.10.022>.
- ZAREEF, M. et al. An overview on the applications of typical non-linear algorithms coupled with NIR spectroscopy in food analysis. **Food Engineering Reviews**, Springer Science and Business Media LLC, v. 12, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1007%2Fs12393-020-09210-7>.
- ZHANG, H.; CAO, L. A spectral clustering based ensemble pruning approach. **Neurocomputing**, Elsevier BV, v. 139, p. 289–297, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.neucom.2014.02.030>.
- ZHANG, J. et al. Numerical investigation of the influence of process conditions on the temperature variation in Fused Deposition Modeling. **Materials & Design**, Elsevier BV, v. 130, p. 59–68, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.matdes.2017.05.040>.
- ZHENG, A.; CASARI, A. **Feature engineering for Machine Learning: Principles and techniques for data scientists**. Sebastopol, EUA: O'Reilly Media, 2018. ISBN 978-1491953242.
- ZHENG, K.-Y. et al. Pretreating near infrared spectra with fractional order Savitzky–Golay differentiation (FOSGD). **Chinese Chemical Letters**, Elsevier BV, v. 26, p. 293–296, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.cclet.2014.10.023>.
- ZHONG, R. Y. et al. Intelligent Manufacturing in the context of Industry 4.0: A review. **Engineering**, Elsevier BV, v. 3, p. 616–630, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.eng.2017.05.015>.
- ZHOU, W. et al. Applications of Near Infrared Spectroscopy in cotton impurity and fiber quality detection: A review. **Applied Spectroscopy Reviews**, Informa UK Limited, v. 51, p. 318–332, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1080%2F05704928.2015.1131710>.
- ZHU, S. et al. Plastic solid waste identification system based on Near Infrared Spectroscopy in combination with support vector machine. **Advanced Industrial and Engineering Polymer Research**, Elsevier BV, v. 2, p. 77–81, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.aiepr.2019.04.001>.
- ZHUANG, Y. et al. 3d-printing of materials with anisotropic heat distribution using conductive polylactic acid composites. **Materials & Design**, Elsevier BV, v. 126, p. 135–140, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016%2Fj.matdes.2017.04.047>.
- ZIMMERMANN, B.; KOHLER, A. Optimizing Savitzky–Golay parameters for improving spectral resolution and quantification in infrared spectroscopy. **Applied Spectroscopy**, SAGE Publications, v. 67, p. 892–902, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1366%2F12-06723>.

APÊNDICE A – TABELA DE AMOSTRAS

Tabela 8 – Nomenclatura do conjunto de amostras aplicadas no trabalho.

n.º	Amostra	Material	Fabricante	Coloração
1	ABS_3DFila_natural	ABS	3D Fila®	Natural
2	ABS_3DLab_amarelo	ABS	3D Lab®	Amarelo
3	ABS_3DLab_cinza	ABS	3D Lab®	Cinza
4	ABS_3DLab_laranja	ABS	3D Lab®	Laranja
5	ABS_3DLab_roxo	ABS	3D Lab®	Roxo
6	ABS_3DLab_verde	ABS	3D Lab®	Verde
7	ABS_UP3D_cinza	ABS	UP 3D®	Cinza
8	PETG_3DFila_natural	PETG	3D Fila®	Natural
9	PETG_UP3D_verde	PETG	UP 3D®	Verde
10	PLA_3DFila_natural	PLA	3D Fila®	Natural
11	PLA_3DFila_verde	PLA	3D Fila®	Verde
12	PLA_3DLab_amarelo	PLA	3D Lab®	Amarelo
13	PLA_3DLab_cinza	PLA	3D Lab®	Cinza
14	PLA_3DLab_laranja	PLA	3D Lab®	Laranja
15	PLA_3DLab_roxo	PLA	3D Lab®	Roxo
16	PLA_Cliever_azul	PLA	Cliever®	Azul
17	PLA_Cliever_cinza	PLA	Cliever®	Cinza
18	PLA_Cliever_preto	PLA	Cliever®	Preto
19	PLA_UP3D_marrom	PLA	UP 3D®	Marrom

Fonte: Autoria Própria.

Tabela 9 – Conjunto de amostras resultantes do *data augmentation* dos espectros do subconjunto A.

nº	Amostra	Material	Coloração
1	ABS_amarelo_laranja	ABS	Amarelo + Laranja
2	ABS_amarelo_roxo	ABS	Amarelo + Roxo
3	ABS_amarelo_verde	ABS	Amarelo + Verde
4	ABS_laranja_roxo	ABS	Amarelo + Roxo
5	ABS_laranja_verde	ABS	Laranja + Verde
6	ABS_natural_amarelo	ABS	Natural + Amarelo
7	ABS_natural_laranja	ABS	Natural + Laranja
8	ABS_natural_roxo	ABS	Natural + Roxo
9	ABS_natural_verde	ABS	Natural + Verde
10	ABS_roxo_verde_	ABS	Roxo + Verde
11	PETG_natural_verde	PETG	Natural + Verde
12	PLA_amarelo_azul	PLA	Amarelo + Azul
13	PLA_amarelo_cinza	PLA	Amarelo + Cinza
14	PLA_amarelo_laranja	PLA	Amarelo + Laranja
15	PLA_amarelo_marrom	PLA	Amarelo + Marrom
16	PLA_amarelo_roxo	PLA	Amarelo + Roxo
17	PLA_azul_cinza	PLA	Azul + Cinza
18	PLA_azul_marrom	PLA	Azul + Marrom
19	PLA_laranja_azul	PLA	Laranja + Azul
20	PLA_laranja_cinza	PLA	Laranja + Cinza
21	PLA_laranja_marrom	PLA	Laranja + Marrom
22	PLA_laranja_roxo	PLA	Laranja + Roxo
23	PLA_natural_amarelo	PLA	Natural + Amarelo
24	PLA_natural_azul	PLA	Natural + Azul
25	PLA_natural_cinza	PLA	Natural + Cinza
26	PLA_natural_laranja	PLA	Natural + Laranja
27	PLA_natural_marrom	PLA	Natural + Marrom
28	PLA_natural_roxo	PLA	Natural + Roxo
29	PLA_natural_verde	PLA	Natural + Verde
30	PLA_roxo_azul	PLA	Roxo + Azul
31	PLA_roxo_cinza	PLA	Roxo + Cinza
32	PLA_roxo_marrom	PLA	Roxo + Marrom
33	PLA_verde_amarelo	PLA	Verde + Amarelo
34	PLA_verde_azul	PLA	Verde + Azul
35	PLA_verde_cinza	PLA	Verde + Cinza
36	PLA_verde_laranja	PLA	Verde + Laranja
37	PLA_verde_marrom	PLA	Verde + Marrom
38	PLA_verde_roxo	PLA	Verde + Roxo

Fonte: Autoria Própria.

Tabela 10 – Conjunto de amostras resultantes do *data augmentation* por espectros do subconjunto B.

nº	Amostra	Material	Coloração
1	PLA90_ABS10_verde	90% PLA e 10% ABS	Verde
2	PLA70_ABS30_verde	70% PLA e 30% ABS	Verde
3	PLA55_ABS45_verde	55% PLA e 45% ABS	Verde
4	ABS90_PLA10_verde	90% ABS e 10% PLA	Verde
5	ABS70_PLA30_verde	70% ABS e 30% PLA	Verde
6	ABS55_PLA45_verde	55% ABS e 45% PLA	Verde
7	PLA90_ABS10_amarelo	90% PLA e 10% ABS	Amarelo
8	PLA70_ABS30_amarelo	70% PLA e 30% ABS	Amarelo
9	PLA55_ABS45_amarelo	55% PLA e 45% ABS	Amarelo
10	ABS90_PLA10_amarelo	90% ABS e 10% PLA	Amarelo
11	ABS70_PLA30_amarelo	70% ABS e 30% PLA	Amarelo
12	ABS55_PLA45_amarelo	55% ABS e 45% PLA	Amarelo
13	PLA90_ABS10_laranja	90% PLA e 10% ABS	Laranja
14	PLA70_ABS30_laranja	70% PLA e 30% ABS	Laranja
15	PLA55_ABS45_laranja	55% PLA e 45% ABS	Laranja
16	ABS90_PLA10_laranja	90% ABS e 10% PLA	Laranja
17	ABS70_PLA30_laranja	70% ABS e 30% PLA	Laranja
18	ABS55_PLA45_laranja	55% ABS e 45% PLA	Laranja
19	PLA90_ABS10_roxo	90% PLA e 10% ABS	Roxo
20	PLA70_ABS30_roxo	70% PLA e 30% ABS	Roxo
21	PLA55_ABS45_roxo	55% PLA e 45% ABS	Roxo
22	ABS90_PLA10_roxo	90% ABS e 10% PLA	Roxo
23	ABS70_PLA30_roxo	70% ABS e 30% PLA	Roxo
24	ABS55_PLA45_roxo	55% ABS e 45% PLA	Roxo
25	PLA90_ABS10_natural	90% PLA e 10% ABS	Natural
26	PLA70_ABS30_natural	70% PLA e 30% ABS	Natural
27	PLA55_ABS45_natural	55% PLA e 45% ABS	Natural
28	ABS90_PLA10_natural	90% ABS e 10% PLA	Natural
29	ABS70_PLA30_natural	70% ABS e 30% PLA	Natural
30	ABS55_PLA45_natural	55% ABS e 45% PLA	Natural
31	PLA90_PETG10_verde	90% PLA e 10% PETG	Verde
32	PLA70_PETG30_verde	70% PLA e 30% PETG	Verde
33	PLA55_PETG45_verde	55% PLA e 45% PETG	Verde
34	PETG90_PLA10_verde	90% PETG e 10% PLA	Verde
35	PETG70_PLA30_verde	70% PETG e 30% PLA	Verde
36	PETG55_PLA45_verde	55% PETG e 45% PLA	Verde
37	PLA90_PETG10_natural	90% PLA e 10% PETG	Natural
38	PLA70_PETG30_natural	70% PLA e 30% PETG	Natural
39	PLA55_PETG45_natural	55% PLA e 45% PETG	Natural
40	PETG90_PLA10_natural	90% PETG e 10% PLA	Natural
41	PETG70_PLA30_natural	70% PETG e 30% PLA	Natural
42	PETG55_PLA45_natural	55% PETG e 45% PLA	Natural
43	PETG90_ABS10_verde	90% PETG e 10% ABS	Verde
44	PETG70_ABS30_verde	70% PETG e 30% ABS	Verde
45	PETG55_ABS45_verde	55% PETG e 45% ABS	Verde
46	ABS90_PETG10_verde	90% ABS e 10% PETG	Verde
47	ABS70_PETG30_verde	70% ABS e 30% PETG	Verde
48	ABS55_PETG45_verde	55% ABS e 45% PETG	Verde
49	PETG90_ABS10_natural	90% PETG e 10% ABS	Natural
50	PETG70_ABS30_natural	70% PETG e 30% ABS	Natural
51	PETG55_ABS45_natural	55% PETG e 45% ABS	Natural
52	ABS90_PETG10_natural	90% ABS e 10% PETG	Natural
53	ABS70_PETG30_natural	70% ABS e 30% PETG	Natural
54	ABS55_PETG45_natural	55% ABS e 45% PETG	Natural

Fonte: Autoria Própria.

APÊNDICE B – DIAGRAMA UML DE ATIVIDADES

Figura 35 – Diagrama UML de atividades do sistema desenvolvido.

Fonte: Autoria Própria.