RESUMO - MACHINE LEARNING

ANÁLISE FATORIAL E PCA: MODELO UNSUPERVISED MACHINE LEARNING NOS PAR METROS ELETROANALÍTICOS DE FILAMENTOS SINTETIZADOS

Guilherme Sales Da Rocha (gsrocha@peq.coppe.ufrj.br)

Marcel Guimaraes Martins (mmartins@peq.coppe.ufrj.br)

João Victor Nicolini (jvnicolini@ufrrj.br)

Helen Conceição Ferraz (helen@peq.coppe.ufrj.br)

Diversos estudos têm explorado a produção de filamentos condutores mais acessíveis e econômicos para impressão 3D, utilizando a combinação de polímeros com materiais condutores e plastificantes. A fabricação desses novos filamentos proporciona vantagens, como a possibilidade de ajustar a condutividade do material condutor em comparação com os filamentos disponíveis comercialmente. No entanto, a determinação das condições experimentais ideais, especialmente em relação às proporções mássicas dos componentes, pode ser otimizada por meio de técnicas de aprendizado de máquina não supervisionado (Unsupervised Machine Learning), aplicadas a dados das variáveis de saída (corrente de pico anódica – Ipa, corrente de pico catódica – Ipc, potencial de corrente anódica - Epa e potencial de corrente

catódica – Epc) obtidos pelo método eletroanalítico da voltametria cíclica. Essas técnicas permitem identificar as proporções mais adequadas dos materiais condutores de forma não preditiva. O presente estudo tem como objetivo aplicar a Análise Fatorial por Componentes Principais (PCA) e a correlação de Pearson aos dados eletroanalíticos dos filamentos sintetizados, utilizando um planejamento experimental fatorial 3^2 (grafite – GT e óleo e de rícino – OR) para investigar o efeito de diferentes proporções dos materiais na construção do filamento na matriz polimérica. A metodologia empregou o uso do software Spyder 5.5.1 (Anaconda-Navigator) com scripts na linguagem de programação em Python 3.11.7 para realizar a ANOVA, a matriz de correlação de Pearson e gerar o mapa de calor (atributo de peso 1 para todas as variáveis). A análise de PCA foi realizada com base no critério de Kaiser (fatores com autovalores > 1) e na verificação da adequação dos dados por meio do teste de esfericidade de Bartlett, usando o teste qui-quadrado. A ANOVA indicou que Ipa influencia significativamente Ipc, mostrando uma forte relação entre as correntes de pico. Da mesma forma, Epa tem um impacto significativo sobre Epc, demonstrando que os potenciais de pico estão altamente correlacionados. A maior parte das variações em Ipc e Epc é explicada pelas variações em Ipa e Epa, respectivamente. Com a PCA revelou que o primeiro componente (Fator 1) explica 59,84% da variância, enquanto o segundo (Fator 2) explica 20,49%, totalizando 80,03% da variância explicada. As variáveis GT e Ipa têm as maiores cargas positivas no Fator 1, indicando que o aumento no percentual de GT está diretamente relacionado ao aumento de Ipa, evidenciando sua importância no desempenho eletroquímico. OR e Epc também têm cargas positivas no Fator 1, mas com menor influência. No Fator 2, Epa destaca-se com carga positiva significativa, enquanto Epc tem uma carga negativa moderada, sugerindo comportamentos opostos entre os potenciais anódico e catódico. A variável OR tem uma contribuição negativa moderada no Fator 2, mostrando influência secundária em relação a GT e Ipa no desempenho eletroquímico. Os dados confirmam que as amostras com maiores teores de GT e OR apresentaram melhor desempenho eletroquímico. Isso sugere que o ajuste adequado desses componentes é uma estratégia eficaz para otimizar a resposta eletroquímica, mantendo a competitividade em relação aos filamentos comerciais.

Palavras-chave: impressão 3d; filamento; dispositivos eletroquímicos; aprendizado de máquina; modelo não supervisionado; python.