



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA  
MESTRADO ACADÊMICO EM ENGENHARIA MECÂNICA



# Avaliação da rugosidade de filmes de Molibdênio fabricados por RF Sputtering através do uso de Deep Learning

Leonardo Bitu Correia Leandro

João Pessoa-PB

Agosto de 2021

Leonardo Bitu Correia Leandro

Avaliação da rugosidade de filmes de Molibdênio  
fabricados por RF Sputtering através do uso de Deep  
Learning

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal da Paraíba como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

*Linha de pesquisa:*  
Processos de Fabricação

Orientadora

Kelly Cristiane Gomes da Silva

João Pessoa-PB

Agosto de 2021

**Catálogo na publicação**  
**Seção de Catalogação e Classificação**

L437a Leandro, Leonardo Bitu Correia.

Avaliação da rugosidade de filmes de molibdênio fabricados por RF Sputtering através do uso de Deep Learning / Leonardo Bitu Correia Leandro. - João Pessoa, 2021.

102 f. : il.

Orientação: Kelly Cristiane Gomes da Silva.  
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CT.

1. Molibdênio. 2. Sputtering. 3. Deep Learning. I. Silva, Kelly Cristiane Gomes da. II. Título.

UFPB/BC

CDU 546.77(043)




ATA DA DEFESA PÚBLICA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO ALUNO **LEONARDO BITU CORREIA LEANDRO**, DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA.

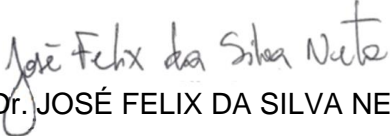
1 Aos trinta e um dias do mês de agosto de dois mil e vinte e um às 09 h 00 min., teve lugar, teve  
2 lugar, na Sala Virtual do Google Meet ([meet.google.com/fec-nkis-rdz](https://meet.google.com/fec-nkis-rdz)) a apresentação da dissertação  
3 “**Avaliação da rugosidade de filmes de Molibdênio fabricados por RF Sputtering através do**  
4 **uso de Deep Learning**” pelo aluno **LEONARDO BITU CORREIA LEANDRO**, com vistas à obtenção  
5 do título de Mestre em Engenharia Mecânica. A Comissão Examinadora foi composta pelos  
6 Professores: Dra. Kelly Cristiane Gomes da Silva – UFPB (Orientadora), Dr. Lucídio dos Anjos  
7 Formiga Cabral – UFPB (Examinador Interno), Dr. José Felix da Silva Neto – UFPB (Examinador  
8 Externo) e Dr. Bruno Alessandro Silva Guedes de Lima – UFPB (Examinador Externo), tendo sido  
9 presidida, por indicação dos seus membros, pela Profa. Dra. Kelly Cristiane Gomes da Silva.  
10 Instalada a Banca Examinadora, a Senhora Presidente passou à palavra ao aluno para apresentar a  
11 defesa do seu trabalho de dissertação e este iniciou a apresentação declarando perante a Banca  
12 Examinadora e o público presente que o trabalho que irá apresentar é original e de sua autoria. A  
13 exposição oral iniciou às 09 h 05 min., sendo concluída às 09 h 40 min, tendo sido iniciada, logo a  
14 seguir, a arguição pelos examinadores, finalizando às 10 h 25 min. Em seguida, o Senhor Presidente  
15 convidou a Banca Examinadora a reunir-se reservadamente para deliberação. Concluída a Reunião,  
16 a Senhora Presidente convocou o aluno e demais presentes para proclamar o resultado, tendo sido  
17 atribuído, por unanimidade, ao mestrando o conceito **APROVADO** nos termos do Regulamento Geral  
18 dos Cursos e Programas de Pós-Graduação *Stricto Sensu* da Universidade Federal da Paraíba  
19 (Resolução nº 34/2014-CONSEPE) e do Regulamento do Programa de Pós-Graduação em  
20 Engenharia Mecânica do Centro de Tecnologia da Universidade Federal da Paraíba (Resolução nº  
21 13/2019-CONSEPE). Ao final da sessão, após os agradecimentos por parte do aluno, o Senhor  
22 Presidente, por recomendação dos membros da Banca, estabeleceu um prazo máximo de 60 dias  
23 para o mestrando providenciar as correções recomendadas, ficando a emissão do diploma do título  
24 de Mestre condicionada a essas retificações que serão verificadas pela orientadora. Às 10 h 40 min.,  
25 a Senhora Presidente encerrou os trabalhos, determinando a leitura para fins de aprovação e a  
26 lavratura da presente ata que vai assinada por todos os membros da Comissão Examinadora.

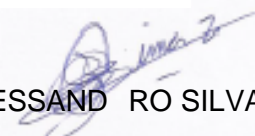
27  
28

João Pessoa, 31 de agosto de 2021.

29 Orientador:   
Profa. Dra. KELLY CRISTIANE GOMES DA SILVA

30 Examinador Interno:   
Prof. Dr. LUCÍDIO DOS ANJOS FORMIGA CABRAL

31 Examinador Externo:   
Prof. Dr. JOSÉ FELIX DA SILVA NETO

32 Examinador Externo:   
Prof. Dr. BRUNO ALESSAND RO SILVA GUEDES DE LIMA

Dissertação de Mestrado sob o título *"Avaliação da rugosidade de filmes de Molibdênio fabricados por RF Sputtering através do uso de Deep Learning"*

Leonardo Bitu Correia Leandro  
Dissertação Aprovada em 31 de agosto de 2021

---

Dra. Kelly Cristiane Gomes da Silva  
Orientadora  
PPGEM – Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
Mecânica.  
UFPB – Universidade Federal da Paraíba

---

Dr. Lucídio Dos Anjos Formiga Cabral  
Examinador Interno  
DCOC – Departamento de computação científica  
UFPB – Universidade Federal da Paraíba

---

Dr. Bruno Alessandro Silva Guedes De Lima  
Examinador Externo  
DEME - CT - Departamento de Engenharia Mecânica  
UFPB – Universidade Federal da Paraíba

---

Dr. José Félix da Silva Neto  
Examinador Externo  
CEAR – Centro de Energias Alternativas e Renováveis  
UFPB – Universidade Federal da Paraíba

João Pessoa-PB, Agosto de 2021.

Dedico esse trabalho à minha namorada Emília Dantas  
e aos meus pais Luiz Correia e Cláudia Bitu.

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha família que sempre me incentivou e propiciou a oportunidade de estar apresentando esse trabalho, especialmente meu pai e minha mãe, Luiz Correia e Cláudia Bitu.

A Emília Dantas Maia e sua família, que estiveram comigo nos últimos sete anos dando suporte para que eu continuasse na minha vida acadêmica.

Agradeço à minha orientadora Kelly Cristiane Gomes da Silva por toda paciência e ajuda que me propiciou desde o início do mestrado.

A José Félix da Silva Neto que é diretamente responsável por todas as minhas conquistas acadêmicas, e sem ele eu não teria concluído esse trabalho.

Aos colegas da pós-graduação e da vida que estiveram comigo e me ajudaram nos últimos dois anos, em especial Antônio Karlos Araújo Valença e Lincoln de Queiroz.

A todos os professores e servidores do programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica.

*O conhecimento científico pertence à humanidade*

Alexandra Elbakyan



# Avaliação da rugosidade de filmes de Molibdênio fabricados por RF Sputtering através do uso de Deep Learning

## RESUMO

Um dos principais responsáveis pelo avanço de muitas tecnologias produzidas a partir do início do século 20 foram os filmes finos. De forma direta ou indireta esses se tornaram essenciais para a vida humana pois estão presentes nas mais diversas aplicações na indústria da óptica, eletrônica, medicina, energia e muitas outras. Para que essas aplicações fossem desenvolvidas foi necessário antes a fabricação. Isto posto, esse trabalho se propõe a avaliar uma RNA para o desenvolvimento de um modelo de Regressão para otimizar a fabricação de Filmes Finos de Mo por RF Magnetron Sputtering a partir da rugosidade superficial. Foram então selecionados três parâmetros de fabricação para otimizar: tratamento superficial (limpeza com Hexano, Eletropolimento), tempo de deposição (5, 10, 20 e 30 minutos) e potência (40W e 60W). Variando esses parâmetros foram desenvolvidas 12 amostras, e a partir de um perfilômetro foi calculada a Rugosidade Média ( $R_a$ ) e o perfil morfológico de cada filme. Esses resultados foram então aplicados à RNA onde um modelo de Regressão foi desenvolvido. Observou-se que o tipo de tratamento superficial foi o parâmetro mais influente sobre a rugosidade, onde o eletropolimento reduziu em aproximadamente 83,3% quando comparado à limpeza com Hexano. Em seguida, a redução da potência provocou uma redução no valor de  $R_a$ . Se tratando do tempo de deposição, para o Eletropolimento, o aumento do tempo provocou redução na rugosidade, por outro lado, o aumento do tempo para substratos com limpeza com Hexano provocou um aumento na rugosidade. Finalmente, foi feita a avaliação do modelo de regressão pelo valor de  $R^2$  que apresentou um alto valor de 98,76%, e com isso foram criadas curvas de otimização. Portanto, a RNA se mostrou como uma excelente ferramenta para otimizar o processo de fabricação de filmes de Mo por RF Magnetron Sputtering.

**Palavras-chave:** Sputtering, Redes Neurais, Regressão, Otimização.

# Roughness evaluation of Molybdenum films manufactured by RF Sputtering using DeepLearning

## ABSTRACT

One of the main factors responsible for the advancement of many technologies produced since the beginning of the 20th century were thin films. Directly or indirectly, these have become essential for human life as they are present in the most diverse applications in the optics, electronics, medicine, energy and many other industries. For these applications to be developed it was necessary to manufacture them beforehand. That said, this work proposes to evaluate an ANN for the development of a Regression model to optimize the fabrication of Thin Mo Films by RF Magnetron Sputtering from surface roughness. Three manufacturing parameters were then selected to optimize: surface treatment (cleaning with Hexane, Electropolishing), deposition time (5, 10, 20 and 30 minutes) and power (40W and 60W). By varying these parameters, 12 samples were developed, and from a profilometer the roughness (Ra) and the morphological profile of each film were calculated. These results were then applied to ANN where a Regression model was developed. It was observed that the type of surface treatment was the most influential parameter in RA, where electropolishing reduced by approximately 83.3% when compared to cleaning with Hexane. Then, the power reduction caused a reduction in the value of Ra. Regarding the deposition time, for Electropolishing, the increase in time caused a reduction in roughness, on the other hand, the increase in time for substrates cleaned with Hexane caused an increase in roughness. Finally, the regression model was evaluated by the value of  $R^2$ , which presented a high value of 98.76%, and with this optimization curves were created. Therefore, RNA proved to be an excellent tool to optimize the process of manufacturing Mo films by RF Magnetron Sputtering.

***Keywords:*** Sputtering, Neural Network, Regression, Optimization.

# Lista de figuras

|    |  |       |
|----|--|-------|
| 1  | (A) Fotografia externa da Pirâmide de Djoser, (B) Fotografia interna da tumba do faraó Tutancâmon. Fonte: <a href="http://arqueologiaegipcia.com.br/tag/piramides/page/2/">arqueologiaegipcia.com.br/tag/piramides/page/2/</a> . . . . . | p. 24 |
| 2  | Representação do experimento de Sputtering criado por William Robert Grove. Fonte: Greene (2014) . . . . .   | p. 26 |
| 3  | Fotografia de um equipamento de <i>Sputtering</i> . Fonte: Próprio autor . . . . .   | p. 32 |
| 4  | Esquema construtivo de um DC Sputtering. Modificado de Simon (SIMON, 2018) . . . . .   | p. 34 |
| 5  | Padrões de distribuição de ejeção das partículas do alvo ejetadas. Modificado de Simon, 2018 (SIMON, 2018). . . . .  | p. 37 |
| 6  | Representação esquematizada de um (A) magnetron plano e um (B) magnetron cilíndrico. Modificado de (GUDMUNDSSON, 2020) . . . . .   | p. 38 |
| 7  | Gráfico de dispersão de duas variáveis $(x,y)$ em um conjunto de dados (A) com correlação e (B) sem correlação. Fonte: próprio autor . . . . .   | p. 43 |
| 8  | Representação gráfica de um neurônio biológico. Fonte: <a href="http://conhecimentocientifico.r7.com/wp-content">conhecimentocientifico.r7.com/wp-content</a> . . . . .  | p. 53 |
| 9  | Representação gráfica de um neurônio Artificial. Fonte: Aggarwal, 2018. . . . .  | p. 53 |
| 10 | Esquema explicativo de um Neurônio Artificial completo (A), e da rede (B). Fonte: (HAYKIN, 2001; AGGARWAL, 2018) . . . . .   | p. 54 |
| 11 | Representação gráfica da função degrau. Fonte: Próprio autor . . . . .   | p. 56 |
| 12 | Representação gráfica da função de ativação identidade. Fonte: Próprio autor . . . . .   | p. 57 |
| 13 | Representação gráfica da função de ativação Sigmoide. Fonte: Próprio autor . . . . .   | p. 57 |
| 14 | Representação gráfica da função Tanh. Fonte: Próprio autor. . . . .  | p. 58 |

|    |  |       |
|----|--|-------|
| 15 | Representação gráfica da função ReLu. Fonte: Próprio autor. . . . .  | p. 59 |
| 16 | Representação gráfica da função Softplus. Fonte: Próprio autor . . . . .   | p. 60 |
| 17 | Representação de modelos com <i>underfitting</i> , <i>overfitting</i> e <i>ótimo</i> . Fonte: Próprio autor . . . . .                                  | p. 62 |
| 18 | Perfil morfológico das amostras H1 e H4. Fonte: Próprio autor . . . . .  | p. 73 |
| 19 | Perfil morfológico das amostras E1 a E4. Fonte: Próprio autor . . . . .  | p. 74 |
| 20 | Estimativa de tendência central da rugosidade de acordo com o tratamento superficial . . . . .   | p. 75 |
| 21 | Gráfico de dispersão entre os parâmetros de deposição e a Rugosidade. Fonte: Próprio autor. . . . .  | p. 76 |
| 22 | Efeito da potência na Rugosidade para filmes depositados por 5 e 10 minutos com substratos tratados com Hexano. Fonte: Próprio autor. . .              | p. 77 |
| 23 | Efeito da potência na Rugosidade para filmes depositados por 5 e 10 minutos com substratos tratados com Eletropolimento. Fonte: Próprio autor. . . . . | p. 78 |
| 24 | Efeito do tempo na Rugosidade para filmes depositados em 60W para substratos tratados com Eletropolimento e Hexano. Fonte: Próprio autor. p.           | 79    |
| 25 | Heatmap da correlação entre os parâmetros de fabricação e a rugosidade. Fonte: Próprio autor. . . . .  | p. 79 |
| 26 | Erro quadrático médio para o conjunto de Treino e o conjunto de Teste. Fonte: Próprio autor. . . . .   | p. 81 |
| 27 | Comparação entre Ra medido experimentalmente e Ra predito pela RNA para o conjunto Teste. Fonte: Próprio autor. . . . .                                | p. 82 |
| 28 | Superfície de otimização da Rugosidade para substratos tratados com Hexano. Fonte próprio autor. . . . .   | p. 83 |
| 29 | Superfície de otimização da Rugosidade para substratos tratados com eletropolidos. Fonte próprio autor. . . . .  | p. 84 |

# Lista de tabelas

|    |   |       |
|----|---|-------|
| 1  | Recentes aplicações de Filmes Finos e seus respectivos campos de conhecimento . . . . .           | p. 15 |
| 2  | Principais processos de fabricação de filmes finos . . . . .                                      | p. 17 |
| 3  | Principais variações nos equipamentos de sputtering. . . . .                                      | p. 18 |
| 4  | Organização dos principais processos de deposição assistidos por vácuo. . . . .                   | p. 29 |
| 5  | Interpretação do coeficiente de correlação de Pearson. . . . .                                    | p. 44 |
| 6  | Campo de aplicações da IA. . . . .  | p. 51 |
| 7  | Composição da Solução Eletrolítica usada para o Eletropolimento. . . . .                          | p. 65 |
| 8  | Nomenclatura dada aos Filmes Finos de Mo produzidos. . . . .                                      | p. 68 |
| 9  | Parâmetros de construção dos Filmes Finos de Mo com as colunas Htratamento e Etratamento. . . . . | p. 71 |
| 10 | Parâmetros de construção dos Filmes Finos de Mo com normalização. . . . .                         | p. 72 |
| 11 | Rugosidade média de cada amostra. . . . .   | p. 74 |
| 12 | Rugosidade média e parâmetros de fabricação de cada amostra. . . . .                              | p. 76 |
| 13 | Rugosidade média normalizada de cada amostra. . . . .   | p. 80 |

# Sumário

|          |   |       |
|----------|---|-------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>   | p. 14 |
| 1.1      | Objetivos   | p. 20 |
| 1.1.1    | Objetivo Geral  | p. 20 |
| 1.1.2    | Objetivos Específicos   | p. 20 |
| 1.2      | Organização da dissertação  | p. 21 |
| <b>2</b> | <b>Filmes Finos e Sputtering</b>  | p. 23 |
| 2.1      | Introdução  | p. 23 |
| 2.2      | Traçando a história dos métodos de fabricação de Filmes Finos: 6000 A.C. até hoje | p. 23 |
| 2.3      | Como um filme fino é fabricado?   | p. 28 |
| 2.3.1    | Organização dos Processos de Fabricação   | p. 28 |
| 2.3.2    | Processos de Fabricação   | p. 29 |
| 2.3.2.1  | Processos de Condução e Difusão   | p. 29 |
| 2.3.2.2  | Processos Químicos  | p. 30 |
| 2.3.2.3  | Processos de Umedecimento   | p. 30 |
| 2.3.2.4  | Processos de Pulverização   | p. 30 |
| 2.4      | Sputtering  | p. 31 |
| 2.4.1    | Princípios do Sputtering  | p. 31 |
| 2.4.2    | Sistemas de deposição de Sputtering   | p. 33 |
| 2.4.3    | DC Sputtering   | p. 34 |
| 2.4.4    | RF Sputtering   | p. 35 |

|          |   |       |
|----------|---|-------|
| 2.4.5    | Magnetron Sputtering . . . . .                        | p. 36 |
| 2.4.6    | Sputtering Reativo . . . . .                          | p. 39 |
| <b>3</b> | <b>Regressão e Inteligência Artificial</b>            | p. 40 |
| 3.1      | Introdução . . . . .                                  | p. 40 |
| 3.2      | Estatística para regressão . . . . .                  | p. 40 |
| 3.2.1    | Métricas estatísticas . . . . .                       | p. 41 |
| 3.2.1.1  | Métricas de Variabilidade . . . . .                   | p. 42 |
| 3.2.1.2  | Correlação . . . . .                                  | p. 43 |
| 3.3      | Regressão linear simples . . . . .                    | p. 44 |
| 3.3.1    | Erro e Previsão . . . . .                             | p. 45 |
| 3.3.2    | Confiabilidade e validação de uma Regressão . . . . . | p. 46 |
| 3.3.2.1  | Coefficiente de Determinação $R^2$ . . . . .          | p. 46 |
| 3.3.2.2  | Validação . . . . .                                   | p. 47 |
| 3.4      | Inteligência artificial . . . . .                     | p. 48 |
| 3.5      | Aprendizado Profundo . . . . .                        | p. 52 |
| 3.5.1    | Função de Ativação . . . . .                          | p. 55 |
| 3.5.1.1  | Degrau . . . . .                                      | p. 56 |
| 3.5.1.2  | Identidade . . . . .                                  | p. 56 |
| 3.5.1.3  | Sigmoide . . . . .                                    | p. 57 |
| 3.5.1.4  | Tanh . . . . .  | p. 58 |
| 3.5.1.5  | ReLU . . . . .  | p. 59 |
| 3.5.1.6  | Softplus . . . . .                                    | p. 60 |
| 3.6      | Backpropagation . . . . .                             | p. 60 |
| 3.7      | Vantagens das RNAs . . . . .                          | p. 62 |
| <b>4</b> | <b>Metodologia</b>                                    | p. 64 |

|          |  |       |
|----------|--|-------|
| 4.1      | Introdução . . . . .                                   | p. 64 |
| 4.2      | Fabricação e Caracterização dos Filmes . . . . .       | p. 64 |
| 4.2.1    | Preparação do substrato . . . . .                      | p. 64 |
| 4.2.1.1  | Limpeza com Hexano . . . . .                           | p. 65 |
| 4.2.1.2  | Eletropolimento . . . . .                              | p. 65 |
| 4.2.2    | Matéria prima . . . . .                                | p. 66 |
| 4.2.3    | Sputtering . . . . .                                   | p. 66 |
| 4.2.3.1  | Parâmetros de fabricação . . . . .                     | p. 67 |
| 4.2.3.2  | Procedimentos para fabricação . . . . .                | p. 68 |
| 4.2.4    | Perfilometria óptica . . . . .                         | p. 69 |
| 4.3      | Rede Neural . . . . .                                  | p. 69 |
| 4.3.1    | Desenvolvimento do Algoritmo . . . . .                 | p. 69 |
| 4.3.2    | Estrutura da RNA . . . . .                             | p. 70 |
| <b>5</b> | <b>Resultados e Discussões</b>                         | p. 73 |
| 5.1      | Caracterização Morfológica dos Revestimentos . . . . . | p. 73 |
| 5.2      | RNA e Regressão . . . . .                              | p. 80 |
| <b>6</b> | <b>Conclusões</b>                                      | p. 85 |
| 6.1      | Rugosidade dos Filmes . . . . .                        | p. 85 |
| 6.2      | Regressão e RNA . . . . .                              | p. 85 |
| 6.3      | Limitações . . . . .                                   | p. 86 |
| 6.4      | Trabalhos futuros . . . . .                            | p. 86 |
|          | <b>Referências</b>                                     | p. 94 |



# 1 Introdução

A partir do início do século 21 muitas tecnologias produzidas começaram a visar a miniaturização de componentes eletrônicos, onde aparelhos telefônicos e computadores pessoais se tornaram cada vez mais portáteis. Esse avanço foi principalmente originado pelo estudo e o desenvolvimento de novas tecnologias de filmes finos, dessa forma, se tornaram um aspecto essencial para a vida humana. Porém não é apenas para a eletrônica que os Filmes Finos são aplicados, os antigos egípcios já purificavam o minério de ouro fundido e prensavam o ouro líquido em pedras para criar finas camadas decorativas de com espessuras de aproximadamente  $3000\text{\AA}$  (GREENE, 2017)

Com o passar do tempo os filmes finos se restringiram às camadas decorativas, porém em 1912 Pohl e Pringsheim publicaram o famoso trabalho sobre a produção de espelhos usando um processo de vaporização de metais como Ag e Al a partir de um recipiente de MgO em alto vácuo, sendo considerado a primeira aplicação em revestimentos ópticos dos filmes finos (GREENE, 2014).

Desde então os filmes finos foram gradativamente sendo estudados para diversas aplicações na indústria, indo desde revestimentos decorativos até os processadores mais avançados. A Tabela 1 mostra as diversas aplicações dos Filmes finos na indústria.

Tabela 1: Recentes aplicações de Filmes Finos e seus respectivos campos de conhecimento

| <b>Campo</b>                                      | <b>Aplicação</b>   |
|---|--|
| Óptica  | Sensores<br>Espelhos   |
| Eletrônica  | Processadores<br>Micro/Nano componentes eletrônicos                                    |
| Decoração   | Pinturas<br>Revestimentos metálicos<br>Joias   |
| Medicina  | Implantes Médicos  |
| Armazenamento de Dados                            | Discos de armazenamento óptico (CDs, DVDs, Blu-rays)<br>Unidade de Estado Sólido (SSD) |
| Revestimentos Resistentes                         | Revestimentos anticorrosivos<br>Revestimentos antiabrasivos                            |
| Sistemas de Geração e<br>Armazenamento de Energia | Células a Combustível<br>Painéis fotovoltaicos<br>Baterias                             |

Fonte <https://www.tf.uni-kiel.de.html> (2021)

Estes filmes possuem dimensões pequenas que variam entre micrômetros e nanômetros na espessura e revestem outros materiais sólidos permitindo novas características superficiais. Condutividade eletrônica, reflexão e absorção da luz, dureza, resistência à abrasão e corrosão são algumas das propriedades que os filmes finos podem melhorar quando usados corretamente (MACLEOD, 2017).

Constantemente chamados de revestimentos, os filmes finos estão presentes em novas tecnologias por dois motivos: uso materiais caros e a necessidade de miniaturização. Tais filmes reduzem consideravelmente o custo de produção de alguns equipamentos, pois ao invés de usar uma grande quantidade de um determinado material caro, apenas uma pequena quantidade pode ser usada para gerar um efeito consideravelmente satisfatório. O outro motivo diz respeito aos equipamentos cada vez menores que tem sido necessários para o desenvolvimento de tecnologias como a microeletrônica e a fotovoltaica.

Pesquisadores em todo o mundo tem estudado os filmes finos nas mais diversas aplicações (XIE et al., 2020; ANCHAN et al., 2020; LIU; WANG, 2020; BRAGA et al., 2020; SILVA; NETO, 2017), mostrando que o assunto de filmes finos é muito relevante para a comunidade

científica.

Xie et al (2020) estudaram o crescimento de um filme de BiOCl sobre um substrato de Bi para aplicações em fotocatalisadores. Realizaram diversos testes na morfologia, estrutura, propriedades ópticas e no Band-gap do filme por meio de testes de XRD, SEM, TEM e DRS, a atividade e estabilidade fotocatalítica do filme foi testado por RhB. Foi observado que o filme mostrou uma ótima atividade fotocatalítica e uma excelente estabilidade química juntamente com várias aplicações na indústria.

As pesquisas de Archan et al (2020) mostraram aplicações para um biosensor feito a partir de um filme fino de óxido de zinco (ZnO). Foi observado que esses filmes se mostraram excelentes para a detecção da concentração de vitamina B6 no organismo, principalmente por apresentarem ótimas características ópticas (elevada transparência) e estabilidade química tendo várias aplicações na indústria médica.

Liu e Wang (2020) desenvolveram filmes finos epitaxiais de metal e oxido flexíveis de Ge e GeO<sub>2</sub> promissores para diversas aplicações eletrônicas como sensores flexíveis, detectores flexíveis, osciladores flexíveis e displays flexíveis promissores para aplicações de dispositivos wearable (vestíveis).

Braga et al (2020) fizeram testes de reatividade química em filmes de óxido de alumínio (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) para estudar a capacidade destes de resistirem à corrosão. Os filmes foram depositados sobre substratos de diferentes tipos de aço e colocado por um grande período em uma solução salina controlada. Ao fim do teste notaram que os revestimentos mostram uma grande estabilidade química protegendo o aço do ataque corrosivo.

Na sua tese de Doutorado, Silva Neto (2017) revestiu uma série de substratos com filmes finos produzidos por co-sputtering capazes de mudar as características ópticas com o intuito de elevar a eficiência de coletores solares. Foram feitos revestimentos com múltiplas camadas de Cr e SiO<sub>2</sub> que aumentaram a absorvidade da radiação solar incidente e reduziram a emissividade.

Observa-se então que além de existirem diversas aplicações que os filmes finos podem ter na indústria, muitas outras já estão sendo estudadas em todo o mundo. Isto mostra a importância dos filmes finos no dia a dia do ser humano. Assim como as aplicações, outro âmbito estudado são os processos de fabricação, onde existem algumas dezenas de diferentes processos cada um com sua aplicação e particularidade.

Filmes finos podem ser produzidos por processos tanto físicos quanto químicos, sendo classificados quanto ao mecanismo de formação: Deposição atomística, Deposição par-

ticulada, Deposição macroscópica e Modificação superficial (MARTIN, 2010). Cada uma dessas técnicas possuem vantagens e desvantagens que ditam qual será escolhida para a fabricação de determinado tipo e aplicação de revestimento. A Tabela 2 mostra quais são as técnicas usadas para a fabricação de filmes finos.

Tabela 2: Principais processos de fabricação de filmes finos

| <b>Deposição Atomística</b>   | <b>Deposição particulada</b>                    | <b>Deposição macroscópica</b>                   | <b>Modificação superficial</b>                     |
|---|---|---|--|
| <i>Ambiente eletrolítico</i>  | <i>Spray térmico</i>                            | <i>Processos por via úmida</i>                  | <i>Conversão química</i>                           |
| -Eletrodeposição<br>-Deposição Eletroestática                               | -Pulverização à plasma<br>-Pulverização à chama | -Pintura<br>-Dip Coating                        | -Oxidação anódica<br>-Nitretação<br>-Sais fundidos |
| <i>Sob Vácuo</i>  | <i>Revestimentos por fusão</i>                  | <i>Pulverização eletroestática</i>              |  |
| -Evaporação<br>-Epitaxia por feixe molecular<br>-Feixe de íons              | -Deposição eletroforética<br>-Filmes esmaltados | -Spin Coating                                   |  |
| <i>Sob Plasma</i>   |   | <i>Cladding</i>                                 |  |
| -Pulverização Catódica (sputtering)<br>-Metalização<br>-Evaporação plásmica |   | -Revestimento por explosão<br>-Colagem por rolo |  |
| <i>Ambiente químico</i>   |   | <i>Sobreposição de camadas</i>                  |  |
| -Deposição química de vapor<br>-Pirólise<br>-Epitaxia líquida               |   | -Revestimento de Solda                          |  |

Fonte: (BUNSHAH; MATTOX, 1980)

Algumas das vantagens que alguns processos de fabricação tem sobre os outros vão desde a maior uniformidade superficial, controle de parâmetros para a fabricação e a capacidade de criar filmes em múltiplas camadas consecutivas e com elevados graus de pureza. Um dos processos que mais se destaca nesses pontos é o Sputtering (SIMON, 2018). Fazendo parte dos Processos de deposição atomística, o sputtering ou pulverização catódica, consiste no bombardeamento de partículas iônicas sobre um alvo de determinado material, onde os átomos desse alvo serão ejetados e posteriormente depositados sobre um substrato o revestindo (GUDMUNDSSON, 2020).

O processo de Sputtering deve ocorrer dentro de uma câmara fechada com algum gás, inerte ou não, a baixa pressão. Sua inicialização ocorre com a aplicação de uma diferença de potencial entre o alvo e o substrato que será revestido, assim as moléculas do gás se transformam em íons e são atraídas em direção ao alvo (SIMON, 2018). Alguns equipamentos de sputtering fazem o uso do chamado magnetron, que ajuda a direcionar as partículas ejetadas pelo alvo em direção ao substrato. Existem vários tipos de Sputtering, estes se diferenciam no tipo de fonte empregada, no tipo de gás usado e se o magnetron é ou não usado. A Tabela 3 mostra as variações nos equipamentos de sputtering.

Tabela 3: Principais variações nos equipamentos de sputtering.

| <b>Fonte de alimentação</b> | <b>Magnetron</b>     | <b>Gás</b>  |
|-----------------------------|----------------------|-------------|
| DC (Corrente direta)        | Magnetron Plano      | Gás inerte  |
| RF (Frequência de Radio)    | Magnetron Cilíndrico | Gás Reativo |
| MF (Mid Frequency)          |                      |             |
| DC pulsado                  |                      |             |
| HIPIMS                      |                      |             |

Fonte: Próprio autor.

Muitas vezes os equipamentos de sputtering permitem alterar consideravelmente os parâmetros de entrada como potência da fonte, temperatura do substrato ou da câmara, pressão interna, tempo de deposição, velocidade de rotação do substrato, dentre outros (WASA; KITABATAKE., 2004). Cada parâmetro de entrada influencia no resultado final do filme produzido.

Apesar de possuir muitas vantagens, o sputtering apresenta uma série de desvantagens: grande consumo de gás, elevado custo energético para a fabricação dos filmes e dificuldade em se conhecer a taxa de deposição das partículas no substrato (WASA; KITABATAKE.,

2004). Essas três desvantagens estão ligadas ao tempo de deposição que pode levar horas para a produção de um filme de escala micrométrica (KOZELSKAYA et al., 2020). Sendo assim, seria importante para todo laboratório de pesquisa contendo um equipamento de sputtering, que houvesse algum modo de prever certas propriedades morfológicas a fim de reduzir os custos energéticos e o consumo de gás apenas com os parâmetros de entrada.

Uma das maneiras de resolver essa problemática é efetuando uma série de experimentos variando os padrões de entrada a fim de obter um padrão que seja possível simular as propriedades mecânicas, considerando o menor erro possível. Existem várias formas possíveis para encontrar esse padrão, sendo a regressão uma das mais aplicadas (BERK, 2016).

Segundo Montgomery et al. (2012), a regressão é um instrumento estatístico que permite relacionar uma ou mais variáveis a outras. Desse modo, ao aplicá-la para a fabricação de filmes finos por sputtering, é possível estabelecer uma relação entre os parâmetros de entrada e os de saída, e assim, ajudar laboratórios a economizar grande quantidade de energia e tempo na produção de filmes finos por sputtering.

Existem um série de métodos (computacionais ou não) que podem mostrar a curva de regressão de uma série de dados com inúmeras variáveis. Alguns desses métodos podem resolver situações simples sem o auxílio da computação. No entanto, quando existem centenas ou milhares de dados, ou variáveis não lineares fica inviável resolver a regressão por meio que não seja computacional (VIEIRA; PINAYA; MECHELLI, 2020). Atualmente os métodos de regressão mais utilizados são os ligados à inteligência artificial (IA).

Os principais exemplos de IA usados para regressão computacional são: K-NN (*k-nearest neighbors*), redes neurais artificiais, SVM (*support vector machine*), floresta aleatória etc (THEODORIDIS, 2015). Alguns autores (KO et al., 2009; ABEGUNDE; AKINLABI; OLADIJO, 2020; KHUMTONG; SAKULKALAVEK; SAKDANUPHAB, 2017) utilizaram algumas dessas técnicas de regressão para encontrar padrões nas características de fabricação de filmes finos por sputtering.

Ko et al (2009) modelaram e otimizaram a taxa de crescimento de filmes de óxido de zinco (ZnO), fabricados por *Pulsed Laser deposition* (PLD), usando redes neurais e algoritmo genético. Foram feitos 17 experimentos variando a temperatura e pressão da câmara durante a deposição. Observaram que a análise estatística dos resultados pode explicar as características e o mecanismos para o crescimento do filme.

Abegunde et al (2020) desenvolveram uma relação empírica por meio de regressão por

mínimos quadrados para otimizar a rugosidade de filmes de TiC fabricados a partir RF magnetron sputtering. Foi analisado a potência do sputtering, a temperatura da câmara e o tempo de deposição. A análise de otimização revelou que a potência de RF foi a que mais contribuiu para o comportamento da rugosidade da superfície do filme fino TiC com uma taxa de contribuição de 87,97%.

Kuntong et al (2017) usaram da regressão para desenvolver um modelo empírico que otimizasse o pré-aquecimento e o fluxo de Ar no interior da câmara a vácuo de um RF magnetron sputtering para a fabricação filmes de  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ . Pelos cálculos, notaram que a condição esperada para obter a maior eficiência era a maior vazão do gás Ar e a menor temperatura de pré-aquecimento.

Fica entendido então, pela vasta literatura, que é possível usar métodos de regressão para se obter modelos empíricos e semi-empíricos com o intuito de otimizar a fabricação de filmes finos por sputtering. Dessa forma, torna-se possível a elaboração de modelos matemáticos que possam ajudar operadores de magnetron sputtering à otimizar as propriedades ópticas de filmes finos dependendo do material alvo e das condições de entrada.

## 1.1 Objetivos

Para a elaboração da pesquisa científica e, por consequência, alcance do objetivo geral do trabalho são necessários uma série de objetivos específicos. Ao realizar cada um, a progressão do trabalho avança.

### 1.1.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem como objetivo principal a otimização pro meio da Rugosidade média a produção de filmes finos de Molibdênio por RF Magnetron Sputtering.

### 1.1.2 Objetivos Específicos

Uma série de objetivos específicos são necessários para o alcance do objetivo geral, são eles:

- Produzir uma série de filmes finos de Molibdênio com diferentes características de fabricação (tratamento superficial, potência e tempo de deposição).

- A partir dos filmes finos produzidos, usar o método da perfilometria para avaliação da Rugosidade média.
- Aplicar os dados obtidos no ponto anterior em uma Rede Neural Artificial para gerar uma curva de regressão e por consequência otimizar o processo de fabricação.

## 1.2 Organização da dissertação

Este trabalho será organizado em uma série de tópicos e subtópicos. Onde contará com uma introdução ao tema no capítulo I, a fundamentação mais detalhada e completa da teoria nos capítulos II e III, o desenvolvimento da metodologia usada para chegar ao resultados esperados no capítulo IV, a exposição e análise dos resultados obtidos no capítulo V, as conclusões finais obtidas pela análise dos resultados no capítulo VI, e por fim as referências usadas para o desenvolvimento deste trabalho.

Cada capítulo compreenderá os seguintes temas:

- O primeiro capítulo (INTRODUÇÃO) introduziu o conceito de filmes finos, mostrando a história e aplicações na indústria atual. Mostrou um rápido conceito e a importância dos processos de fabricação de filmes finos dando ênfase no *Sputtering*, assim como regressão e seus métodos. Detalhou os objetivos gerais e específicos deste trabalho.
- O seguinte capítulo (FILMES FINOS E SPUTTERING) servirá como a fundamentação teórica para o materiais que foram desenvolvidos. Mostrará o conceito de Filmes Finos e todo o processo histórico que desencadeou na enorme importância de hoje. Também mostrará os processos que envolvem a fabricação de Filmes Finos focando posteriormente no *Sputtering*.
- O próximo capítulo (REGRESSÃO E IA) servirá como a fundamentação teórica para os processos de otimização. Mostrará o conceito de Regressão e Inteligencia Artificial tendo foco nas redes neurais artificiais. Posteriormente, será explicado como a regressão pode ser usado na otimização.
- O quarto capítulo deste trabalho (METODOLOGIA) diz respeito ao detalhamento da metodologia que será usada. Primeiramente, será mostrado como o estudo sobre os temas foram feitos, posteriormente será detalhado como as amostras de filmes finos foram fabricados, e finalmente o desenvolvimento do algoritmo de regressão.



- O quinto capítulo V (RESULTADOS E DISCUSSÕES) apresentará os resultados obtidos da regressão e otimização da fabricação de filmes finos por RF Sputtering, bem como os revestimentos que foram utilizados na análise.
- O sexto e último capítulo (CONCLUSÕES) elencará as conclusões alcançadas pela análise da regressão dos filmes finos produzidos por RF Sputtering.

## 2 Filmes Finos e Sputtering

### 2.1 Introdução

De maneira breve, uma fina camada de material com espessura entre nanômetros e micrômetros, que reveste e modifica as características superficiais de outro material é conhecido como Filme Fino. É possível afirmar que os filmes finos foram capazes de revolucionar o desenvolvimento tecnológico a partir da segunda metade do século 20. Inúmeros equipamentos e processos nas mais diversas áreas de aplicação tornam os filmes finos como um dos mais importantes avanços tecnológicos da humanidade. Dessa forma, é importante conhecer como os filmes finos chegaram à esse patamar a partir do seu histórico.

### 2.2 Traçando a história dos métodos de fabricação de Filmes Finos: 6000 A.C. até hoje

A história dos filmes finos está diretamente atrelada à história da metalurgia. É conhecido que o primeiro metal completamente dominado pelo homem foi o Cobre, datam de 6000 a.c. algumas ferramentas e armas encontradas feitas com a fundição e refinamento dos óxidos de malaquita ( $\text{Cu}_2(\text{CO}_3)(\text{OH})_2$ ) e azurita ( $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ ) (LAUGHLIN; HONO, 2015). No entanto outra hipótese indica que na verdade o ouro foi o primeiro metal a ser dominado pelo homem, pois além de ser mais fácil de encontrar no estado puro, não necessita de tantos processos para manipulação e purificação (GREENE, 2014). Assim, se essa hipótese estiver correta, coloca o ouro como um metal usado pelo homem a mais de 11000 anos (GREENE, 2014).

O ouro não foi inicialmente usado para o desenvolvimento de armas e ferramentas pois é muito mole, no entanto apresenta uma cor brilhante que chamou atenção dos antigos povos, além de ser dificilmente oxidado (GOPHER et al., 1990). Foi apenas no

antigo Egito que o ouro foi usado pela primeira vez como um filme fino com propósito de revestir peças para economizar matéria prima e aumentar a durabilidade (GREENE, 2014)). Artefatos e pequenas estátuas com folhas de ouro (aproximadamente  $3000\text{\AA}$ ) foram encontrados em várias tumbas antigas na região do Egito, os exemplos mais importantes são a pirâmide de Djoser (Sacará, Egito) e a tumba do faraó Tutancâmon (Vale dos Reis, Egito) (ADÈS, 2006). Na Figura 1 observa-se tanto a pirâmide de Djoser quanto tumba do faraó Tutancâmon.



Figura 1: (A) Fotografia externa da Pirâmide de Djoser, (B) Fotografia interna da tumba do faraó Tutancâmon. Fonte: [arqueologiaegipcia.com.br/tag/piramides/page/2/](http://arqueologiaegipcia.com.br/tag/piramides/page/2/)

Os egípcios encontravam o minério de ouro em várias regiões do império, principalmente entre o rio Nilo e o mar vermelho. Para purificar o minério, os egípcios desenvolveram uma técnica baseada em fundir uma mistura de minerais (Alunita ( $\text{KAl}_3(\text{SO}_4)(\text{OH})_6$ ), sal ( $\text{NaCl}$ ) e calcopirita ( $\text{CuFeS}_2$ )) e dissolver a mistura em ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) e ácido clorídrico ( $\text{HCl}$ ) (NOTTON, 1974). O processo de fabricação do filme de ouro era produzido pelo desbaste do minério de ouro purificado em uma pedra arredondada até formar as folhas de ouro (GREENE, 2014). Com as folhas de ouro produzidas, os artesões revestiam os objetos dando a impressão que eram feitos completamente de ouro.

Quando um frasco contendo mercúrio foi encontrado nas tumbas da província de Luxor no Egito, alguns pesquisadores (WEEKS, 1932; HAMMERSCHMIDT, 2011) entenderam que os antigos egípcios eram capazes de usar o processo de mercúrio a frio para criar uma camada intermediária entre um objeto e a folha de ouro melhorando a adesão. Os antigos egípcios usaram principalmente essa técnica até o fim do grande império egípcio.

Avançando um pouco mais no tempo, em 100 A.C. os índios Moche, nas terras altas do norte do Peru, faziam a união entre filmes de ouro e prata em substratos de cobre (GREENE, 2014). A deposição dos filmes era feita por meio de uma reação química, que consistia na dissolução de ouro em uma solução de sulfato de alumínio e potássio ( $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2$ ). Depois de um certo tempo, o material a ser revestido era mergulhado na solução onde se

originava as duas camadas de filmes (WEEKS; LEICHESTER, 1968).

Por mais de 1600 anos, os filmes finos assumiram principalmente as funcionalidades de decoração e proteção, e os materiais mais usados ainda eram ouro e prata. Na cidade de Veneza na Itália, foi desenvolvido uma técnica de fabricação de espelhos pelos artesãos da época categorizando o primeiro uso de um filme fino para fins ópticos (BONNET, 2014). Os artesãos usaram o estanho, um metal com características parecidas com o ouro capaz de ser cortado em folhas, depois recobriam vidros até chegar à reflectividade ideal (HERRERA et al., 2009).

Cerca de três séculos depois, em 1800, o físico italiano Alessandro Volta desenvolveu a pilha voltaica capaz de gerar uma diferença de potencial por uma reação química de oxirredução. Essa invenção abriu as portas para inúmeras outras pesquisas no ramo da eletricidade, uma delas era o processo de eletrodeposição ou galvanização (MARTIN, 2010).

Essa forma de depositar material foi desenvolvido cinco anos após o estudo de Volta pelo químico italiano Luigi Valentino Brugnatelli. Consiste em aplicar uma diferença de potencial entre dois eletrodos, sendo um positivo (cátodo) e um negativo (ânodo), banhados em uma solução química. A deposição ocorre quando os elétrons do ânodo são direcionados para o cátodo, e com isso os íons do ânodo chegam a solução e os íons da solução se depositam no cátodo formando uma fina camada de material (NASIRPOURI, 2017).

A eletrodeposição tornou possível a fabricação de filmes finos de uma maneira mais controlada e com o uso de uma maior gama de materiais (NASIRPOURI, 2017). Por exemplo, até esse momento para revestir um material com ouro era necessário corta-lo em finas camadas, a partir do advento da eletrodeposição isso ficou mais simples. Bastava usar uma porção de ouro banhado em uma solução de Nitrato de ouro III ( $\text{Au}(\text{NO}_3)_3$ ), uma fonte de tensão e o material a ser revestido. Ao iniciar o processo, os elétrons da porção de ouro (ânodo) são direcionados para o material a revestir (cátodo), e assim, íons  $\text{Au}^{3+}$  são atraídos e se depositam no cátodo (OLIVEIRA; PISSETTI; LUCHO, 2016).

Nessa mesma época o advento das tecnologias de vácuo proporcionaram novas técnicas até então inéditas na deposição de filmes finos. Uma delas foi a deposição sputter ou pulverização catódica. Em 1852, William Robert Grove descreveu um novo efeito que ocorreu ao aplicar uma corrente DC em eletrodos de aço e prata dentro de uma câmara a vácuo (GREENE, 2017).

Grove usou dentro da câmara uma mistura de Hidrogênio e ar a baixa pressão, e

posicionou a placa de alumínio a cerca de 0,25 cm de uma agulha de aço. Ao aplicar uma diferença de potencial, a agulha de aço ficou energizada positivamente agindo como cátodo e a placa de alumínio ficou energizada negativamente agindo como ânodo. Ao fim do experimento, Grove notou uma coloração diferente na placa de alumínio e ao analisar, notou que era uma fina camada de óxido de ferro (GREENE, 2017). A partir desse experimento, a tecnologia de pulverização catódica foi cada vez mais estudada e aprimorada com o passar dos anos. Está ilustrado na Figura 2 o esquema criado por Grove.

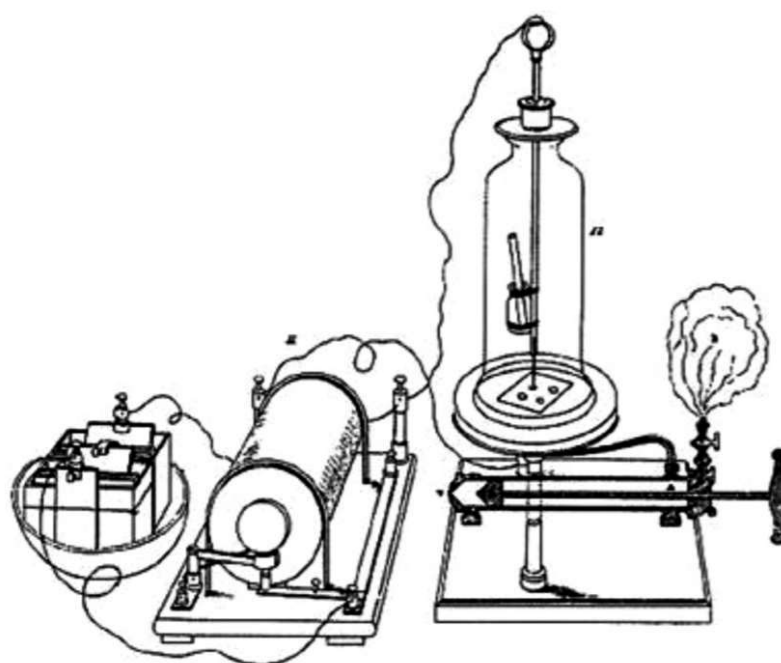


Figura 2: Representação do experimento de Sputtering criado por William Robert Grove. Fonte: Greene (2014)

Por mais que o processo de pulverização catódica tenha tido momentos de interesse comercial e científico na época do experimento de Grove e posteriormente, Martin (2010) escreve em seu livro que apenas recentemente o processo foi entendido com uma maior totalidade. Juntamente com o trabalho de Grove, outras técnicas foram sendo desenvolvidas ao mesmo tempo, sendo o século 20 considerado como o início dos métodos modernos de fabricação de revestimentos.

Um dos primeiros trabalhos sobre um moderno método fabricação de filmes finos foi feito em 1912 por Pohl e Pringsheim. Neste artigo, os dois pesquisadores esclarecem sobre a deposição metálica em vidros para o desenvolvimento de espelhos por um processo que chamaram de destilação a vácuo, este seria o predecessor da evaporação térmica (método

vastamente utilizado até os dias de hoje). Para isso, ambos usaram um recipiente feito de Oxido de Magnésio (MgO) por apresentar alta temperatura de fusão e esquentaram em alto vácuo Ag e Al. Sob essas condições, estes materiais se condensaram e depois evaporaram, assim, cada molécula ia em direção às paredes da câmara (GREENE, 2017). Os dois pesquisadores colocaram no topo um substrato de vidro onde as moléculas de Ag e Al se condensaram formando uma fina camada de material. Dessa forma, um espelho funcional e com pouca necessidade de material foi produzido (PIEGARI; FLORY, 2018). Outros pesquisadores descobriram que esta técnica também poderia ser usada em materiais dielétricos e semicondutores (GREENE, 2014). Dessa forma, um novo ramo de aplicações de filmes finos na indústria surgiu, os dispositivos microeletrônicos.

Além de ajudar no desenvolvimento dos computadores, Greene (2014) cita outros benefícios que os filmes finos trouxeram para a tecnologia:

- **Econômica:** Os filmes finos reduziram a quantidade de materiais caros e/ou raros, por exemplo, os filmes de ouro, platina e paládio.
- **Novas Funcionalidades:** Segundo Greene (2014), a razão superfície-volume dos filmes finos possibilitou o confinamento quântico, importante para o desenvolvimento dos materiais semicondutores.
- **Peso:** Ao substituir partes de equipamentos que utilizariam materiais pesados como titânio por apenas uma fina camada deste, reduzem e muito o peso do equipamento como um todo.
- **Miniaturização:** Assim como a redução de peso, a redução de tamanho foi acentuada pela aplicação de filmes finos. Por exemplo, sensores e eletrônicos podem agora serem cada vez mais compactos levando ao surgimento dos smartphones e computadores modernos.

A partir desse ponto novos métodos de fabricação foram sendo desenvolvidos e antigos métodos foram aperfeiçoados. Com isso, surgiram novas aplicações para filmes finos. Hoje esses componentes estão presentes em dezenas de dispositivos do dia a dia e da tecnologia de ponta. A história dos filmes finos esteve diretamente ligada à evolução dos processos de fabricação

## 2.3 Como um filme fino é fabricado?

Como um filme fino é fabricado? Responder essa pergunta é uma das concepções mais importantes do estudo de revestimentos. Existem diversas técnicas capazes de fabricar filmes, sendo assim, estabelecer uma organização que classifique os processos de fabricação quanto a alguma característica ou parâmetro se torna importante.

### 2.3.1 Organização dos Processos de Fabricação

Os novos métodos de fabricação possibilitaram que os filmes finos fossem feitos para as mais diversas aplicações. Por isso, se torna importante estudar os principais métodos para a fabricação de filmes finos, suas aplicações, vantagens e desvantagens.

São muitas as maneiras de fabricar um filme fino, muitas envolvem processos químicos já outras envolvem processos físicos, algumas produzem filmes menores, mais uniformes e eficientes e outras fabricam filmes maiores, mais rapidamente e com menos custos (MARTIN, 2010).

Dessa forma, levando em conta o grande número de processos de fabricação de filmes finos, alguns autores (QUINTINO, 2014; CHAPMAN; ANDERSON, 1974; BUNSHAH; MATTOX, 1980) desenvolveram, há muitos anos, maneiras diferentes de classificação.

Bunshah e Mattox (1980) classificaram os processos de fabricação quanto a dimensão do material que está sendo depositado. Foi então diferenciado em quatro grupos: deposição atômica, deposição particulada, deposição macroscópica e modificação superficial. Os primeiros tratam de uma escala nanométrica ou micrométrica, já alguns filmes produzidos pela modificação superficial podem ser vistos a olho nu. É considerado uma das classificações mais completas até hoje, pois abrange um grande número de processos. A Tabela 2 no Capítulo 1 resumiu a organização desenvolvida.

O vácuo é parte importante para os processos de fabricação mais complexos de filmes finos. Dessa forma, Quintino (2014) levantou em uma tabela apenas os que necessitam de vácuo. Dividiu em processos físicos e químicos como indica a Tabela 4.

Tabela 4: Organização dos principais processos de deposição assistidos por vácuo.

| Deposição Física de Vapor (PVD) |            |             |                      |            |             | Deposição Química de Vapor (CVD)         |                                   |
|---------------------------------|------------|-------------|----------------------|------------|-------------|--|-----------------------------------|
| Evaporação                      |            |             | Sputtering           |            |             | Crescimento Térmico                      | Polimerização                     |
| Alto Vácuo                      | Gás inerte | Gás reativo | Alto Vácuo           | Gás inerte | Gás reativo |  |                                   |
| Ion Plating                     |            |             | Sputtering Enviesado |            |             | Crescimento Térmico assistido por Plasma | Polimerização Induzido por Plasma |

Fonte: (QUINTINO, 2014)

Outra importante classificação vastamente utilizada é a de Chapman e Anderson (1974) que dividiram os processos de fabricação quanto ao mecanismo físico ou químico, são eles: Processos de Condução e Difusão; Processos Químicos; Processos de Umedecimento; Processos de Pulverização. Para alcançar os objetivos propostos por este trabalho será necessário o conhecimento das diferentes formas de fabricar um filme fino.

## 2.3.2 Processos de Fabricação

Como já citado, Chapman e Anderson (1974) dividiram os processos de fabricação quanto ao mecanismo físico ou químico, e essa organização será usada para a explicação.

### 2.3.2.1 Processos de Condução e Difusão

Processos considerados de Condução e Difusão se referem ao movimento dos átomos ou íons que serão depositados em um meio. Em alguns desses podem ocorrer reações químicas enquanto em outros apenas reações físicas de movimentação molecular. Segundo Chapman e Anderson (1974) os processos que fazem parte dessa classificação são: Deposição Eletroestática, Revestimento eletroforético, Deposição eletrolítica, Anodização e Anodização gasosa, Nitretação de íons, Carbonetação de íons, Oxidação a plasma, Revestimento de difusão, Metalização e Endurecimento por faísca.

Apenas alguns desses processos são efetivamente usados, enquanto outros que estão mais presentes em pequena escala são usados em situações específicas ou não tiveram muita adesão da comunidade científica. Comumente esses processos estão relacionados à reações de Oxidação-Redução.



### 2.3.2.2 Processos Químicos

Diferentemente dos processos de condução e difusão, que usam mais de reações de Oxidação-Redução e movimentação molecular, os processos Químicos estão relacionados a inúmeros outros tipos de reações químicas. Os principais exemplos dos processos químicos são: Revestimento de conversão difusão, Deposição química de vapor, Deposição sem eletrodos e Desproporção.

Entre todos, o mais importante e vastamente utilizado é a Deposição química de vapor ( Chemical Vapor Deposition, ou CVD). Esse processo consiste em uma reação química que ocorre na forma de vapor próximo ao substrato, sendo assim, o resultado dessa reação é depositada sobre o mesmo. Trata-se de um processo muito controlado, onde um ou mais gases entram em uma câmara a vácuo podendo ou não haver catalisadores para auxiliar a reação. Por ter possibilidade de fazer uso de vários tipos de reações químicas, esse processo é capaz de depositar metais, semicondutores, ligas ou compósitos (BEHERA; MALLICK; MOHAPATRA, 2020).

### 2.3.2.3 Processos de Umedecimento

Os processos de umedecimento consistem na aplicação de um material na fase líquida sobre um substrato que será então solidificado, por meio de resfriamento, e se transformará em um revestimento (MARTIN, 2010). Chapman e Anderson (1974) consideraram como os principais processos: Pintura a pincel convencional, Revestimento por imersão e Método Hidrofílico.

Os três métodos são vastamente utilizados atualmente, sendo o Método Hidrofílico capaz de produzir filmes com espessuras variando de ângströms até milímetros (MARTIN, 2010). Ao se tratar de Revestimento por imersão, o filmes produzidos apresentam espessuras com maior ordem de grandeza por limitações físicas no processo (JAIN et al., 2021)

### 2.3.2.4 Processos de Pulverização

Finalmente, os processos de Pulverização estão entre os mais importantes e mais estudados atualmente. Suas vantagens vão desde um maior controle na fabricação do filme até o uso de menos material. Ao agregar os principais processos de pulverização, Chapman e Anderson (1974) dividiram em duas categorias: Macroscópico (quando a partícula pulverizada é formada por um aglomerado de moléculas sendo normalmente maior que 10

$\mu\text{m}$ ) e Microscópico (quando as partículas são predominantemente moléculas únicas ou átomos).

- Macroscópico: Pulverização com ar e sem ar, Pulverização por chamas, Revestimento por Detonação, Pulverização por plasma de arco, Pulverização por arco elétrico, Pulverização Elétrica Harmônica e Evaporação a vácuo.
- Microscópico: Evaporação de descarga plasmática, Feixe molecular epitaxial, Evaporação reativa ativada (ARE), Evaporação reativa ativada tendenciosa (BARE), Sputtering, Deposição por feixe de íons, Ion Plating, Polimerização plasmática.

Entre todos esses processos de fabricação um dos que mais se destaca é o sputtering. Também conhecido como pulverização catódica, o sputtering está presente em mais 300 mil artigos no indexador Science Direct até maio de 2021. Além do mais, o sputtering consegue trabalhar com uma vasta gama de materiais (metais, ligas, cerâmicos, etc) (SILVA; NETO, 2017). Sendo assim, o Sputtering se trata de uma das maneiras mais importantes de se fabricar um filme fino.

## 2.4 Sputtering

Sputtering tem se mostrado como uma das técnicas mais inovadoras e pesquisadas dos últimos anos, onde milhares de artigos são criados em diversas revistas científicas. Filmes desenvolvidos por sputtering estão sendo usados em aplicações ópticas e eletrônicas (SIMON, 2018). O sputtering possui vantagens em relação à outros processos, uma delas diz respeito a uma maior regência na fabricação do filme pois os parâmetros podem ser facilmente controlados (SIMON, 2018).

Existem também variações do modelo original que podem alterar a fonte de alimentação, o gás usado na câmara e a aplicação do Magnetron (MARTIN, 2010). Assim sendo, estudar o mecanismos físicos que regem a fabricação de filmes por Sputtering, bem como suas variações se torna importante.

### 2.4.1 Princípios do Sputtering

De maneira simplificada, o processos de sputtering é definido como a ejeção de partículas de um alvo sólido através do bombardeamento de partículas energéticas (GUDMUNDSSON; LUNDIN, 2020). Como já citado, esse efeito foi primeiro observado por William Robert

Grove em 1852 ao aplicar aplicar uma corrente DC em eletrodos de aço e prata dentro de uma câmara a vácuo.

Os equipamentos de sputtering em sua maioria possuem a câmara onde o processo irá ocorrer, fonte de alimentação, bomba de vácuo, ímã permanente, alvo, substrato, válvula de entrada de gás (MARTIN, 2010). A Figura 3 a seguir representa um uma fotografia de um equipamento de Sputtering.



Figura 3: Fotografia de um equipamento de *Sputtering*. Fonte: Próprio autor

Uma das formas mais fácil de bombardear um alvo com partículas energéticas é através de um feixe de íons. Sendo assim, é necessário a formação de plasma dentro de uma câmara hermeticamente fechada e com vácuo parcial. Podem ser usados gases reativos ou inertes para a formação do plasma, sendo o uso de gases inertes tipo mais comum. Quando não é desejável que ocorra reação no processo os principais gases usados são os nobres, sendo o Argônio (Ar) o mais utilizado, já o Hélio (He), Neônio (Ne), Criptônio (Kr) e Xenônio (Xe) aparecem com menor frequência nas aplicações em sputtering (MUTZKE; ECKSTEIN, 2008; SAGARA et al., 2020).

Antes de aplicar o gás a ser transformado em plasma na câmara, é necessário retirar boa parte da atmosfera presente. Este processo é feito por meio de uma bomba de vácuo capaz de gerar um vácuo parcial na faixa de  $10^{-3}$  a  $10^{-9}$  mbar (MATTOX, 2018). Os tipos

de bombas que podem operar nessa faixa de pressão são: Bomba turbomolecular; Bomba por difusão; Bomba de íons pulverizados; Bombas criogênicas; Bomba mecânica a seco (HOFFMAN et al., 1998). A escolha de cada tipo dependerá da operação, gás selecionado e materiais de trabalho.

Uma vez a câmara com vácuo parcial, o gás a ser ionizado é então injetado para o interior da mesma com baixa pressão. O próximo passo para produzir e manter o plasma durante todo o processo é aplicar um campo elétrico e ionizar o gás, ou seja, aplicar energia suficiente para que os elétrons sejam ejetados dos átomos (SILVA; NETO, 2017). Dessa forma, o interior da câmara estará preenchida por íons, elétron e átomos não ionizados, essa mistura recebe o nome de plasma e é considerada como o quarto estado físico da matéria (BEHERA; MALLICK; MOHAPATRA, 2020).

Por decorrência do campo elétrico dentro da câmara, íons carregados negativamente ou positivamente podem ser gerados. Dependendo do gás usado, pressão e alvo, quando o campo elétrico atingir um valor acima da tensão de ruptura alguns elétrons serão ejetados, formando assim, íons carregados positivamente (MATTOX, 2010). Devido à pequena massa em relação aos íons, os elétrons ejetados são acelerados em direção ao ânodo carregado positivamente. Esse efeito produz uma camada isolante (sem elétrons livres) entre o cátodo e o plasma onde a tensão tende a cair bruscamente (SIMON, 2018). Segundo Bitterncourt (2004), quando elétrons livres colidem com os átomos e são subsequentemente presos em uma barreira de potencial íons carregados com cargas negativa são gerados.

Uma vez que os íons carregados positivamente ou negativamente são formados, o campo elétrico no interior da câmara acelera os íons em direção ao alvo. A energia cinética acumulada durante a aceleração é quase que totalmente transferida aos átomos do alvo fazendo com que se desprendam da superfície e sejam ejetados (SIMON, 2018). Esse processo muda para cada equipamento de sputtering pois já existem várias aplicações de diferentes componentes.

## 2.4.2 Sistemas de deposição de Sputtering

Os equipamentos de sputtering podem ser encontrados em diferentes formatos e com diferentes componentes, no entanto, o que mais altera as funcionalidades e aplicações é a fonte de alimentação e o tipo de gás usado no interior da câmara. Os principais variantes dos equipamentos são: DC Sputtering, RF Sputtering, Magnetron Sputtering e Sputtering por gás reativo (MARTIN, 2010).

Cada sistema de sputtering citado está presente em diferentes aplicações no desenvolvimento de filmes finos. Além do mais, cada um apresenta vantagens e desvantagens em relação à outros. Sendo assim, conhecer todos os tipos de sputtering pode ajudar um pesquisador a fabricar um revestimento da melhor maneira possível.

### 2.4.3 DC Sputtering

Mais simples que os demais, o DC sputtering usa uma fonte de alimentação DC (*Direct Current*) produzindo um plasma também do tipo DC, sendo essa a primeira fonte de alimentação usada em um processo de sputtering (GUDMUNDSSON; LUNDIN, 2020). Mesmo sendo tão simples o DC sputtering ainda é bastante usado atualmente. Esse equipamento é muito usado no desenvolvimento de microchips pela indústria de semicondutores, no revestimento de superfícies não-refletivas e no revestimento em ouro de joias e relógios (MARTIN, 2010).

O motivo do DC sputtering ainda ser tão usado são suas vantagens em relação aos demais tipos. Primeiramente, essa fonte é mais barata e mais fácil de controlar pois não é necessário componentes eletrônicos complexos como osciladores. Depois, os outros tipos de sputtering também são capazes de depositar metais, no entanto, o DC sputtering é a opção mais barata (tanto no uso de materiais quanto de energia) (MARTIN, 2010).

A construção do DC sputtering usa da câmara a vácuo, do gás ionizável da fonte de alimentação DC e os dois eletrodos. O cátodo está ligado ao polo negativo da fonte e é onde fica o material alvo, já o ânodo está ligado ao polo positivo e é onde fica o substrato onde o filme será depositado (SIMON, 2018). Na Figura 4 está esquematizado a construção do DC sputtering.

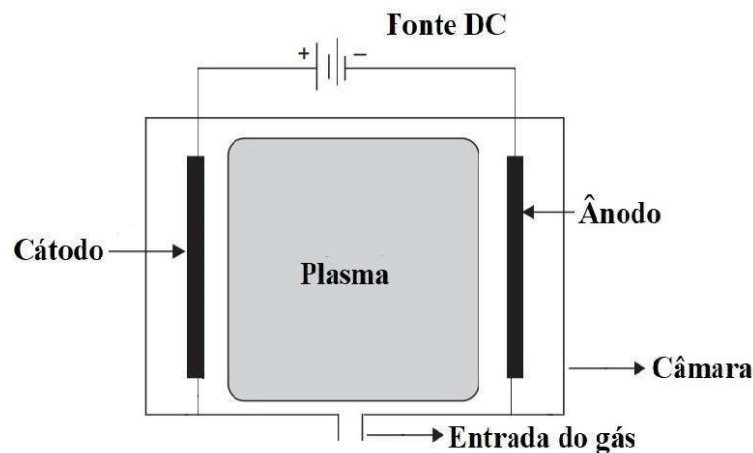


Figura 4: Esquema construtivo de um DC Sputtering. Modificado de Simon (SIMON, 2018)

Devido à natureza física da fonte DC, o plasma tende a se concentrar mais nos eletrodos podendo gerar alguns problemas. Por mais que o DC sputtering seja um boa opção para desenvolver filmes a partir de uma vasta gama de metais, o mesmo não se aplica a isolantes dielétricos, sendo esse um dos problemas gerados pela concentração do plasma. Isso ocorre porque esses materiais assumem uma carga ao longo do tempo que resultam em uma contaminação do material alvo com uma carga podendo chegar à estagnação do processo (MARTIN, 2010). Com o intuito de resolver tal problemática foi desenvolvido a fonte de alimentação RF.

#### 2.4.4 RF Sputtering

Como já citado, o DC sputtering é uma boa opção para depositar metais, no entanto, o efeito de contaminação impossibilita o uso para aplicações com materiais dielétricos, por exemplo, óxidos de alumínio, óxido de silício e óxidos de cromo. Uma maneira de evitar esse efeito seria inverter, a uma alta frequência, as polaridades da fonte de alimentação criando um ciclo positivo e um negativo (MARTIN, 2010).

Durante o ciclo negativo o alvo recebe potencial negativo fazendo com que os íons com cargas positivas sejam atraídos para o cátodo e os elétrons atraídos para o ânodo, essa etapa tem o funcionamento igual ao DC sputtering. Já durante o ciclo positivo, os íons se desprendem do cátodo (agora com carga positiva) e são atraídos em direção ao ânodo (MARTIN, 2010). Dessa forma o processo de sputtering continua funcionando mesmo que os íons tendem a se prender no material alvo.

Segundo Simon (SIMON, 2018), os ciclos devem acontecer rápido o suficiente para os íons não se chocarem com o substrato, para isso foi desenvolvido a fonte RF (*Radio Frequency*) que é capaz de mudar a polaridade a uma alta frequência. Normalmente é usado frequência de radio para comutar a polaridade da fonte; valores no intervalo de 13,56 a 27,12 MHz são os mais encontrados em equipamentos com fontes RF (WASA; KITABATAKE., 2004). Por mais que a operação em frequência de rádio ocorram mais rápidas que os íons possam seguir, os elétrons se movem mais rapidamente por terem menores massas ocasionando em um movimento da nuvem de elétrons de um eletrodo para o outro. Com a aproximação da nuvem eletrônica de um eletrodo o outro fica concentrado de íons positivos criando uma camada isolante que reduz a tensão semelhante ao DC sputtering, mas que não prejudica o processo (MARTIN, 2010). De maneira semelhante ao DC sputtering, o RF usa dos mesmo componentes alterando apenas a fonte de alimentação.

Além de permitir o uso de alvos de materiais dielétricos o RF sputtering possui outras

vantagens em relação aos demais. Segundo Martin (MARTIN, 2010), o plasma RF tende a se espalhar no interior de toda a câmara, diferentemente do DC sputtering que se concentra na região dos eletrodos. Isso ocorre devido a diferença de massa entre as partículas de gás ionizado e os elétrons permitindo que o plasma seja mantido sem depender do aprisionamento de íons secundários acima do material alvo. Também é dito por ele que o RF plasma pode se manter em pressões mais baixas resultando em menos colisões entre os íons e melhor eficiência na deposição. Ao alternar a fonte a uma alta frequência, o plasma é capaz de se manter a menores pressões devido às variações de energia cinética dos elétrons dentro do plasma.

Apesar de possuir muitas vantagens, o RF sputtering tem muitos custos atrelados à produção de filmes finos que devem ser considerados (MARTIN, 2010). A fonte de alimentação RF requer consideravelmente mais tensão que as fontes DC além de conseguirem menores taxas de deposição (MATTOX, 2010). Sendo assim, um RF sputtering pode usar mais energia para obter a mesma taxa de deposição que um DC sputtering, muitos problemas estão atrelado a isso, sendo eles: O custo de aplicar mais energia, a necessidade de um resfriamento ao sistema (devido ao maior efeito Joule) e circuitos com componentes mais complexos (MARTIN, 2010).

Outrossim, sabendo dos problemas atrelados ao RF sputtering, o mesmo ainda é vantajoso quando se deseja produzir filmes mais finos. Portanto, o RF sputtering tem se mostrado como uma opção muito usada por por possibilitar o trabalho com materiais dielétricos tendo um posicionamento central na indústria de semicondutores.

### 2.4.5 Magnetron Sputtering

Segundo Simon (SIMON, 2018), um problema recorrente com o processo de sputtering estava relacionado à distribuição de ejeção das partículas do alvo que, muitas vezes, iam em direções diferentes ao substrato reduzindo a taxa de deposição. Isso se dá devido a aleatoriedade da efeito de sputtering que torna muito difícil a previsão em um modelo matemático. A distribuição de ejeção é função de vários parâmetros do processo, e sua configuração pode variar bastante como indica a Figura 5.

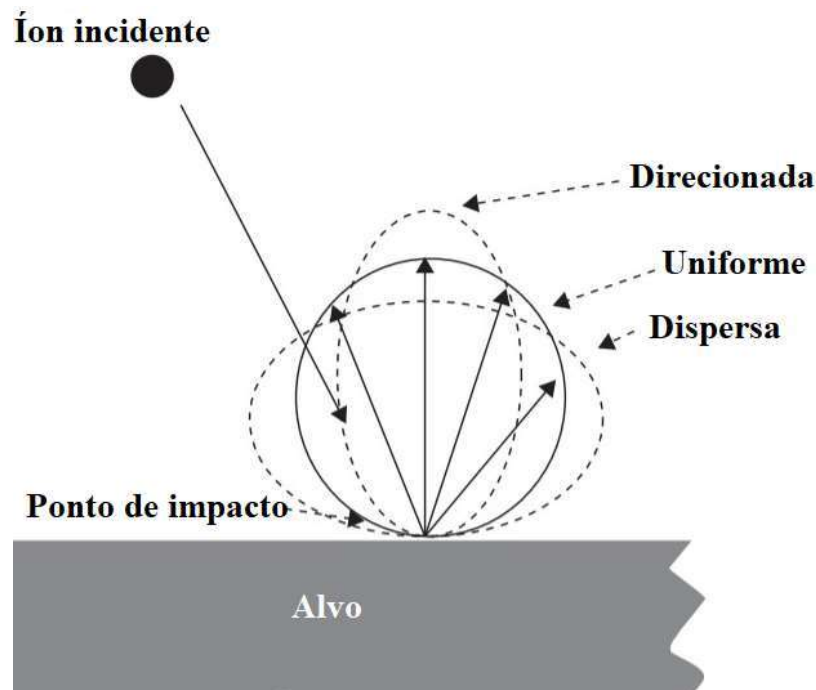


Figura 5: Padrões de distribuição de ejeção das partículas do alvo ejetadas. Modificado de Simon, 2018 (SIMON, 2018).

As distribuições dispersa e uniforme são onde mais partículas do alvo se perdem no interior da câmara. Já a distribuição direcionada tem a tendência em projetar partículas do alvo para uma direção específica.

A fim de resolver a problemática da perda de partículas pela câmara algumas técnicas foram desenvolvidas. A primeira técnica consiste em aproveitar a distribuição direcionada de partículas apontando para o substrato. Isso pode ser feita a partir de uma descentralização entre o alvo e o substrato deixando o alvo mais próximo à borda da câmara enquanto o substrato fica mais centralizado (SEAH et al., 2005). No entanto essa técnica está atrelada ao problema da deposição enviesada de um filme que produz uma "rampa" no substrato. Para resolver o problema da deposição enviesada foi desenvolvido um mecanismo de que constantemente rotaciona o substrato de forma controlada durante o processo (ROBBIE; SIT; BRETT, 1998).

Em 1939 o pesquisador F. M. Penning patenteou uma variação na técnica de deposição de filmes finos por Sputtering ao usar um cilindro com propriedades magnéticas cujo campo produzido era perpendicular ao cátodo e ajudava a direcionar os átomos para o substrato (PENNING, 1936). O experimento inicial de F. M. Penning consistiu em construir um sistema de sputtering que usava eletrodos cilíndricos coaxiais para produzir campo magnético axial no interior da câmara. Ele observou que a adição do campo magnético re-



duziu a pressão e aumentou a taxa de deposição (WASA; KITABATAKE., 2004). No entanto, por mais que aumentasse a taxa de deposição, esse sistema não apresentava condições de ser posto em prática.

Foi apenas no ano de 1971 que uma nova patente feita por P. J. Clark possibilitou o uso prático do magnetron cilíndrico no sistema de sputtering (CLARK, 1971). Nos anos 70 também foi desenvolvido um novo tipo de magnetron que usava um sistema plano de eletrodos a partir dos estudos de Chapin e J. A. Thornton (BRÄUER et al., 2010; THORNTON, 1978). Esse sistema se tornou vastamente utilizado no desenvolvimento de filmes finos (WASA; KITABATAKE., 2004). A figura 6 a seguir esquematiza o magnetron cilíndrico e o plano.

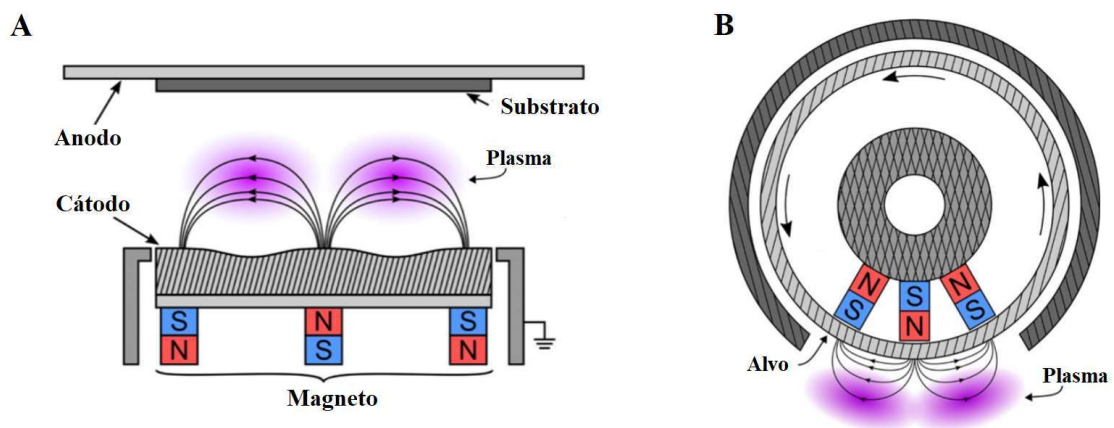


Figura 6: Representação esquematizada de um (A) magnetron plano e um (B) magnetron cilíndrico. Modificado de (GUDMUNDSSON, 2020)

O magnetron trouxe várias vantagens à fabricação de filmes finos por sputtering, são elas (BRÄUER et al., 2010):

- Redução na impedância elétrica do plasma e aumento na corrente iônica.
- Aumento na taxa de deposição.
- Redução na carga térmica para o substrato.
- Pequena melhora na uniformidade do filme produzido.
- Filmes mais compactos e aderentes.
- Aumento na variedade de materiais usados.

## 2.4.6 Sputtering Reativo

Os gases nobres como Ar e Xe são usados no sputtering com o intuito de estabelecer a não ocorrência de reações durante o processo, isso garante que os filmes produzidos sejam formados na sua totalidade pelo material que compõe o alvo. No entanto, outros gases como Oxigênio ( $O_2$ ), Nitrogênio ( $N_2$ ), Hidróxido de enxofre ( $H_2S$ ) são capazes de reagir com o material alvo durante o processo de sputtering, e conseqüentemente, produzir filmes formados por compostos moleculares (MUSIL et al., 2005). Essa variação no processo de sputtering é conhecida como Sputtering Reativo.

Uma das principais vantagens do o sputtering reativo é a possibilidade de fabricar filmes de óxidos metálicos, nitretos, sulfetos, carbonetos dentre outros. Os gases usados não são ionizados dentro da câmara, sendo assim, não se chocam com o alvo. Dessa forma, é bombeado uma mistura de gás reativo com um gás ionizável (MARTIN, 2010).

Como já citado, uma das maneiras de evitar a contaminação do alvo em materiais dielétricos é usar o RF Sputtering. De maneira similar, o Sputtering Reativo também pode ser usado. O material dielétrico é gerado apenas no substrato através de reações químicas que podem ocorrer no plasma, no alvo ou no substrato. Portanto, mesmo sem uma fonte RF o material dielétrico formado não irá contaminar o alvo (MARTIN, 2010). Isso possibilita o uso de uma fonte DC para a fabricação de filmes a partir de materiais dielétricos.

Segundo J. Musil et al. (2005), ao modificar a proporção do gás reativo é possível controlar a estequiometria do filme produzido. No entanto, por mais que isso seja satisfatório para a produção de filmes finos a alta complexidade atrelada ao controle do sputtering reativo é sua maior desvantagem.

Uma vez conhecendo a fundo o processo de sputtering o próximo passo é estudar quais são os principais métodos de otimização e como podem ser aplicados. Sendo assim, o capítulo 3 desse trabalho se propõe a mostrar o que é e como funciona a regressão, bem como as metodologias usadas para tal focando principalmente no uso de redes neurais.

## 3 Regressão e Inteligência Artificial

### 3.1 Introdução

Atualmente, muitas áreas do conhecimento estão produzindo e usando volume de dados cada vez maiores, isso ocorre devido à intensificação no uso de novas tecnologias da informação (LOSHIN, 2013). Muitas vezes isso se torna um problema para profissionais e pesquisadores pois é necessário cada vez mais tempo e poder computacional para analisar e processar os dados.

A regressão é uma técnica que vem para ajudar a trabalhar com grande volume de dados, além de dados com grande não-linearidade. Segundo Montgomery et al. (2012), o termo regressão define um conjunto de técnicas estatísticas usadas para modelar relações entre variáveis, onde os campos de aplicações vão de engenharia, ciências (físicas, químicas e biológicas e sociais), economia etc.

Portanto, o cerne da regressão é a estatística e toda análise feita com os resultados. Dessa forma, conhecer os conceitos básicos da estatística é importante tanto para aplicar a Regressão a um conjunto de dados, quanto para analisar os resultados obtidos. O tópico seguinte fundamentará o conhecimento básico acerca da estatística.

### 3.2 Estatística para regressão

Como já citado, a regressão é construída a partir dos conceitos de estatística. Tais conceitos vão desde o tipo de variável que está sendo usado até a análise da correlação entre duas variáveis.

Dentro de um banco de dados podem existir informações sobre as mais diversas áreas abordando os mais diversos assuntos. Dessa forma é de se esperar que as variáveis também sejam dos mais diversos tipos. As variáveis podem ser classificadas quanto à operabilidade (variáveis quantitativas e qualitativas) e quanto à relação com outras (variáveis indepen-

dependentes e dependentes) (SMITH, 2015).

Quanto à operabilidade, as variáveis qualitativas são inerentes às qualidades ou tipos de uma variável, por exemplo, cor, local, presença, nome etc. Dentre as variáveis qualitativas, ainda é possível distinguir dois tipos: variáveis qualitativas nominais, cujas realizações possíveis não têm ordem, e variáveis qualitativas ordinais, cujos resultados têm uma ordem (BRUCE; BRUCE, 2019). Já as variáveis quantitativas se referem à quantidade de um determinado parâmetro, por exemplo, altura, quantidade, temperatura velocidade etc. De maneira dicotômica, as variáveis quantitativas também se dividem em duas, sendo elas: Variáveis quantitativas discretas, cujos valores possíveis formam um conjunto de números finitos ou contáveis; Variáveis quantitativas contínuas, cujos valores possíveis pertencem a uma faixa de números reais e são produzidos por medição (BRUCE; BRUCE, 2019).

Quanto à dependência, uma variável pode ser: dependente quando uma variável dentro de um volume de dados dependerá do valor de outra variável; independente quando uma variável dentro de um volume de dados não dependerá do valor de outra variável (SMITH, 2015). Ao conhecer os tipos de variáveis é importante estudar as correlações e métricas que um banco de dados possui.

### 3.2.1 Métricas estatísticas

As métricas estatísticas de um banco de dados são importantes para a análise de qualquer conjunto de dados, podendo dar informações acerca de qualquer tipo de variável. A métrica mais básica é a média que, de maneira simples, pode ser definida como o valor único que representa um conjunto de dados (SANTOS, 2018). As principais formas de usar a média são a partir da média aritmética e percentis.

Segundo Santos (2018), o percentil pode ser definido como o valor  $P$  que pelo menos  $P$  por cento dos dados assumem um determinado valor ou menor, e que pelo menos  $100 - P$  por cento assumem esse valor ou maior. Os percentis costumam ser usados em valores específicos para análise dos dados, sendo esses chamados de quartis  $Q$  (SANTOS, 2018). O primeiro quartil ( $Q_{1/4}$ ) representa o 25º percentil de um conjunto de dados; O segundo quartil ( $Q_{1/2}$ ), ou mediana representa 50º percentil de um conjunto de dados; O terceiro quartil ( $Q_{3/4}$ ) representa 75º percentil de um conjunto de dados.

A outra forma de usar a média é pela média aritmética. Considerando um conjunto de dados  $A$  com  $n$  elementos, a média é o valor  $\bar{x}$  resultado da divisão da soma dos números no banco de dados pela quantidade de elementos  $n$  (SANTOS, 2018). A Equação

3.1 representa a média aritmética.

$$\bar{x} = \frac{\sum_i^n x_i}{n} \quad (3.1)$$

### 3.2.1.1 Métricas de Variabilidade

A variabilidade absoluta ( $Var$ ) de um conjunto de dados está relacionada às diferenças entre cada elemento do conjunto ( $x_i$ ) e a média total ( $\bar{x}$ ) (SANTOS, 2018). Também chamado de Desvio, essa métrica indica o quanto os dados estão dispersos à volta do valor central (SMITH; BUSSAB, 2017). A Equação 3.2 representa a variabilidade de uma série de dados.

$$Var = |x_i - \bar{x}| \quad (3.2)$$

Usando a Equação 3.2 e dividindo pela quantidade de termos  $n$  dentro do conjunto de dados tem-se a variabilidade absoluta média ou desvio absoluto médio ( $D_{am}$ ) (SMITH; BUSSAB, 2017). Essa métrica é mostrada na Equação 3.3.

$$D_{am} = \frac{\sum_i^n |x_i - \bar{x}|}{n} \quad (3.3)$$

Por mais que a variabilidade absoluta e o desvio absoluto médio sejam importantes para análise de dados, as métricas mais utilizadas e conhecidas são a variância ( $\sigma^2$ ) e o desvio padrão ( $\sigma$ ) (BRUCE; BRUCE, 2019). De maneira semelhante ao desvio absoluto médio, o desvio padrão indica quanto os dados estão dispersos de um valor central, no entanto, trabalha com diferenças quadráticas ao invés de absolutas. As diferenças quadráticas tem sido preferíveis para análises estatísticas (SANTOS, 2018). O quadrado do desvio padrão é a variância e indica o quão afastado os elementos de um conjunto de dados estão do valor central (BRUCE; BRUCE, 2019). As Equações 3.4 e 3.5 indicam o desvio padrão e a variância respectivamente.

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_i^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}} \quad (3.4)$$

$$\sigma^2 = \frac{\sum_i^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1} \quad (3.5)$$

Todas essas métricas são usada para a análise de apenas uma variável dentro de um conjunto de dados. É importante para a análise estatística conhecer as dependências entre as diferentes variáveis.

### 3.2.1.2 Correlação

A métrica estatística que quantifica a relação entre duas variáveis (qualitativas ou quantitativas) é conhecida como Correlação (SANTOS, 2018). Considerando uma dispersão de valores entre duas variáveis  $x$  e  $y$  é possível observar visualmente quando existe ou não uma correlação entre elas. Dois gráficos de dispersão são mostrados na Figura 7.

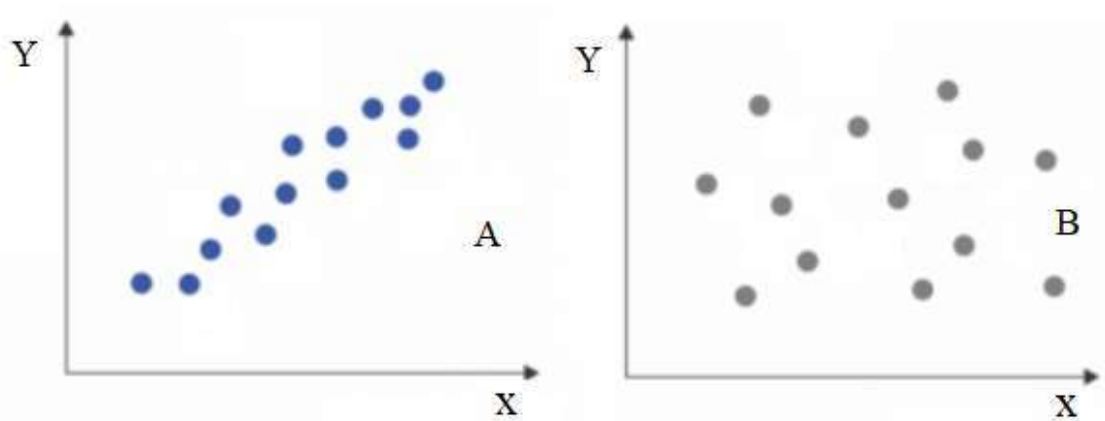


Figura 7: Gráfico de dispersão de duas variáveis  $(x,y)$  em um conjunto de dados (A) com correlação e (B) sem correlação. Fonte: próprio autor

A Figura 7 (A) ilustra uma dispersão de valores que seguem uma correlação de proporcionalidade, já que quanto maior o valor de  $x$ , maior o valor correspondente de  $y$ , isso significa que as variáveis possuem alguma correlação. Por outro lado, a Figura 7 (B) ilustra uma dispersão em que os valores não seguem uma lógica de proporcionalidade, ou seja, as variáveis não possuem correlação.

Existem algumas formas de quantificar a correlação entre variáveis  $x$  e  $y$  (Critérios de Renyi, Tau de Kendall, Rho de Spearman, Informação Mútua, Dependência nas caudas), no entanto, a mais simples e mais usada é o coeficiente de correlação de Pearson representado pela letra  $r$  (SMITH, 2015). O valor de  $r$  pode variar entre 1 e -1, onde 1 significa correlação perfeita positiva e -1 correlação perfeita negativa. Em seu livro, Santos (2018) mostra uma interpretação correta do coeficiente de correlação de Pearson que é mostrada na Tabela 5.

Tabela 5: Interpretação do coeficiente de correlação de Pearson.

| Coeficiente de Correlação | Correlação        |
|---------------------------|-------------------|
| $r = 1$                   | Perfeita positiva |
| $0.8 \leq r < 1$          | Forte positiva    |
| $0.5 \leq r < 0.8$        | Moderada positiva |
| $0.1 \leq r < 0.5$        | Fraca positiva    |
| $0 \leq r < 0.1$          | Ínfima positiva   |
| 0                         | Nula              |
| $-0.1 \leq r < 0$         | Ínfima negativa   |
| $-0.5 \leq r < -0.1$      | Fraca negativa    |
| $-0.8 \leq r < -0.5$      | Moderada negativa |
| $-1 \leq r < -0.8$        | Forte negativa    |
| $r = -1$                  | Perfeita negativa |

Fonte: Santos, 2018.

O cálculo do coeficiente de correlação de Pearson entre duas variáveis  $x$  e  $y$  é função de cada elemento  $i$  do conjunto de dados e da média aritmética das variáveis  $(\bar{x}, \bar{y})$  (SANTOS, 2018). A Equação 3.6 representa o coeficiente de correlação de Pearson.

$$r = \frac{\sum_i^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_i^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_i^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3.6)$$

Uma vez as métricas para análise de dados conhecidas, o próximo passo é entender como uma regressão funciona e como pode ajudar a prever dados futuros. A maneira mais fácil de entender a regressão é a partir da regressão linear simples.

### 3.3 Regressão linear simples

Quando se assume que existe uma relação causal entre duas variáveis, técnicas de regressão podem ser usadas para encontrar o modelo, geralmente uma função matemática, que aproxima o valor no banco de dados tanto quanto possível (YAMAUTI, 2013). Existem várias técnicas usadas para a regressão, sendo a regressão linear simples a menos complexa, dessa forma, estudá-la ajuda no entendimento maior da regressão como um todo.

Considerando  $y_i$  como uma variável dependente e  $x_i$  como uma variável independente, a regressão linear simples pode ser definida como mostrado na Equação 3.7 (MONTGO-

MERY; PECK; VINING, 2012).

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon_i \quad (3.7)$$

Onde  $\beta_0$  e  $\beta_1$  são conhecidos como os **coeficientes de regressão**, e o  $\varepsilon_i$  é o resíduo inerente ao modelo. De maneira similar à função de primeiro grau, o coeficiente  $\beta_1$  corresponde à inclinação da curva da regressão, já o coeficiente  $\beta_0$  não possui sentido prático (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012).

Estimar os valores de  $\beta_0$  e  $\beta_1$  é imprescindível para a modelagem matemática do conjunto de dados. O método mais utilizado para tal é o Método dos Mínimos Quadrados, que minimiza o quadrado do resíduo com o intuito de maximizar o modelo aos dados observados (YAMAUTI, 2013). Aplicando essa metodologia à equação da regressão linear simples tem-se que os valores de  $\beta_0$  e  $\beta_1$  são:

$$\beta_0 = \bar{y}_i - \beta_1 \bar{x} \quad (3.8)$$

$$\beta_1 = \frac{\sum_n^i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_n^i (x_i - \bar{x})} \quad (3.9)$$

### 3.3.1 Erro e Previsão

Tendo calculado os coeficientes de regressão linear, o próximo passo é usar a equação de regressão para estimar os valores da variável independente a partir dos valores da variável dependente (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012). Os valores previstos serão então representados da forma  $\hat{y}$ , onde:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \quad (3.10)$$

A diferença  $(y_i - \hat{y}_i)$  é o resíduo da regressão ( $\varepsilon_i$ ). No entanto, como já citado, é mais usual trabalhar com o quadrado das diferenças. Dessa forma, a soma das diferenças residuais quadráticas ( $SS_{res}$ ) é:

$$SS_{res} = \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.11)$$



Segundo Montgomery et al. (2012), a análise de variância para um modelo de regressão que relaciona a variabilidade quadrática de  $y_i$ ,  $\hat{y}_i$  e a Equação 3.11 produz a Equação 3.12:

$$SS_T = SS_R + SS_{Res} \quad (3.12)$$

Onde:

$$SS_T = \sum_i^n (y_i - \bar{y}_i)^2 \quad (3.13)$$

$$SS_R = \sum_i^n (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2 \quad (3.14)$$

O componente  $SS_T$  na Equação 3.12 é a soma corrigida dos quadrados da variabilidade, que representa a variabilidade total na regressão (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012). Já o componente  $SS_R$  representa a variabilidade dos valores previstos usando  $\beta_0$  e  $\beta_1$ . Com isso, a análise dos erros inerentes à regressão fica concluída, basta agora investigar o quanto a regressão é confiável em prever novos valores.

### 3.3.2 Confiabilidade e validação de uma Regressão

Após concluir a modelagem de uma regressão são necessários dois passos: Avaliar o quanto o modelo se ajusta ao conjunto de dados e validar o modelo com novos dados.

#### 3.3.2.1 Coeficiente de Determinação $R^2$

Outra abordagem para os termos  $SS_T$  e  $SS_R$  é que a primeira representa uma medida da variabilidade total do modelo, independentemente da influência da variável  $x$ , já o segundo representa a variabilidade do valor previsto após considerar a variável  $x$ . A razão entre os termos  $SS_R$  e  $SS_T$  indicará a variação explicada pela variável  $x$ , sendo esta comumente chamada de coeficiente de determinação, como mostra a Equação 3.15 (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012).

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} = 1 - \frac{SS_{Res}}{SS_T} \quad (3.15)$$

O coeficiente de determinação expressa a variância dos dados que é explicada pelo modelo de regressão, dessa forma, quanto maior for o valor de  $R^2$  melhor o modelo se

ajusta ao dados (YAMAUTI, 2013). Visto que  $0 \leq SS_{Res}, SS_R \leq SS_T$  o valor de  $R^2$  varia entre 0 e 1. Muitas vezes o valor de  $R^2$  é expresso em porcentagem, por exemplo, caso seja igual a 0.9 isso significa que o modelo explica 90% dos dados. É de responsabilidade do analista julgar um valor de  $R^2$  necessário para explicar o próprio modelo.

Existem uma série de cuidados com o  $R^2$ , pois adicionar uma grande quantidade de valores ou novas variáveis a um conjunto de dados pode aumentar o  $R^2$  (BERK, 2016). Caso o modelo não seja linear, independentemente do conjunto de dados, sempre haverá um polinômio que se adequará perfeitamente. Assim, é possível que se obtenha um valor de  $R^2$  próximo a 1, mas ao custo de resultados irrealistas, acurácia reduzida e com menor capacidade de fazer previsões (YAMAUTI, 2013). Ajustar o valor do coeficiente de determinação ( $\bar{R}^2$ ) pode reduzir os erros atrelados ao seu uso. Smith (2015) usa a Equação 3.16 para ajustar o valor de  $R^2$ .

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{n-1}{n-(k+1)}(1-R^2) \quad (3.16)$$

Onde o valor  $k+1$  representa o número de variáveis independentes no conjunto de dados. Considerando que a confiabilidade de um modelo de regressão tenha sido satisfatório, o passo seguinte é atestar o modelo para novos valores.

### 3.3.2.2 Validação

A regressão tem sido vastamente utilizada para a prever ou estimar conjuntos de dados, no entanto, antes do modelo ser disponibilizado para o uso é necessário a validação do mesmo (SMITH, 2015). Assim, a **validação do modelo** determina o sucesso no funcionamento do modelo no que foi proposto. Segundo Montgomery (2012), existem algumas técnicas para validação, são elas:

1. Análise dos coeficientes do modelo.
2. Divisão do conjunto de dados.
3. Coleta de novos dados.

Pelo item 1, analisar os coeficientes do modelo calculado de maneira a compará-los com experiências anteriores, teoria física e outros modelos analíticos ou resultados de simulação, pode indicar que o modelo se encontra validado para o uso (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012). Por exemplo, caso um modelo de regressão para previsão de chuvas

mostre resultados semelhantes aos encontrados em complexas simulações computacionais, o mesmo será validado.

O uso de dados para testar o modelo é importante, para isso é necessário possuir uma certa quantidade de dados que não serão usados no cálculo dos coeficientes (também chamado de treino). Uma das formas é dita no item 2, dividir o conjunto de dados usando uma parte para treino e outra para teste é capaz de validar o modelo (BERK, 2016). A proporção entre os dados usados no treino e os usados no teste deve variar de aplicação para aplicação, no entanto, é comumente usado valores entre 30 e 15% para teste (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012).

A maneira em que os dados são divididos também deve ser analisado. É possível fazer a divisão selecionando dados ou usando dados aleatórios. A seleção de dados pode causar viés no modelo de regressão, viés esse que deve ser evitado. O uso de dados aleatórios soluciona o problema com o viés (SMITH, 2015).

Segundo Montgomery (2012), o item 3 é a técnica de validação mais efetiva, pois não é necessário reduzir o volume de dados usados para treino. O mesmo cita que adicionar pelo menos 15 a 20% do conjunto de dados em novos experimentos é o suficiente para validar o modelo.

A partir desse ponto considera-se que o modelo de Regressão Linear Simples está completo, confiável e validado. No entanto, existem muitos outros métodos de regressão, mas que usam as mesmas métricas estatísticas para análise. Com o avanço dos métodos computacionais notou-se que a inteligência artificial poderia ser usada para produzir modelos de regressão (ZHANG; LU, 2021).

### 3.4 Inteligência artificial

Cunhado em 1956, durante uma conferência em Dartmouth University, o termo Inteligência Artificial (IA) tem sido cada vez mais usado no passar dos anos e ficando popular para a pesquisa científica, softwares e o entretenimento (ZHANG; LU, 2021). Em seu livro, Clark (1996) definiu IA como uma ciência especializada que analisa e cria hipóteses, métodos, técnicas e estruturas de aplicação para reconstituir, ampliar ou simular o conhecimento humano.

Com apenas 65 anos a IA é considerada uma ciência nova no campo da tecnologia. Esses 65 anos são divididos em quatro fases: Período de fundação; Primeira era de ouro;

Segunda era de ouro; Terceira era de ouro (ZHANG; LU, 2021). O período de fundação se refere ao já citado momento em que o termo foi cunhado em 1956, e posteriormente foi dado início aos estudos em IA.

A primeira era de ouro foi do Período de fundação até 1982. Durante esse tempo, muitas universidades começaram os estudos em IA já nas mais diversas áreas dos conhecimentos: química, medicina, física, engenharia, econometria, linguagens etc (ZHANG; LU, 2021).

O limite entre a primeira e a segunda era de ouro foi desenvolvimento de um algoritmo funcional de redes neurais em 1982 por John Hopfield. Desde então houve um crescimento significativo nas IAs, onde começaram a ser aplicadas em reconhecimento de fala e de imagens (ZHANG; LU, 2021; MUTHUKRISHNAN et al., 2020).

A terceira era de ouro da IA iniciou em 2006 e vai até os dias de hoje. O que representa essa era é o desenvolvimento de unidades processadoras e dispositivos de armazenamento cada vez melhores, o que permite as IAs trabalhar com volumes ainda maiores de dados (ZHANG; LU, 2021).

Considera-se que a IA é governada por três escolas filosóficas: simbolismo, conexionismo e behaviorismo (ZHANG; LU, 2021).

- Simbolismo

O simbolismo se refere ao processo cognitivo dos seres humanos (inferência e operação de vários símbolos) (ZHANG; LU, 2021). Um dos núcleos da IA está na representação, inferência e aplicação do conhecimento, muitas vezes representados por símbolos. Dentro do simbolismo, a cognição é o processo de processamento de símbolos, função esta que deve ser realizada pelas máquinas na IA (CLARK, 1996).

- Conexionismo

A escola do conexionismo explica a inteligência humana dependente dos métodos de trabalho do cérebro pelo uso da célula fundamental, o neurônio (VIEIRA; PINAYA; MECHELLI, 2020). Sendo assim, o conexionismo aplicado às IAs tenta simular matematicamente o comportamento dos neurônios. Essa metodologia é chamada de Redes Neurais (FU et al., 2018).

- Behaviorismo

O princípio que explica o Behaviorismo é que a inteligência depende de percepção e ação sem necessitar de conhecimento ou raciocínio (ZHANG; LU, 2021). O direciona-

mento do Behaviorismo é simular o comportamento humano em várias circunstâncias. As IAs usam do Behaviorismo nos métodos evolucionais, como por exemplo o algoritmo genético (FU et al., 2018).

Essas três escolas filosóficas regem as aplicações de IAs. No entanto, essa não é a única forma de categorizar as IAs. Atualmente uma IA pode ser classificada quanto a complexidade de duas formas (BINU; RAJAKUMAR, 2021):

- IA forte:

Diz respeito as IA que podem verdadeiramente raciocinar e resolver problemas, sendo capazes de ter as próprias perspectivas e entendimento do mundo. No entanto, esse tipo de IA ainda não foi completamente desenvolvido devido toda sua complexidade.

- IA fraca:

Esse tipo de IA representa as máquinas inteligentes que não podem realmente raciocinar. As IAs desenvolvidas até hoje são do tipo fraca.

A partir dos anos 2000, a IA tem sido presente em muitos campos da tecnologia. Zhang e Lu (2021) reconhecem cinco campos mostrados na Tabela 6.

Tabela 6: Campo de aplicações da IA.

| <b>Campo</b>          | <b>Definição</b>  |
|-----------------------|---|
| Big Data              | É o campo da tecnologia que analisa grandes volumes de dados impossíveis com a metodologia convencional.<br>Big data requer novos modelos de processamento para ter capacidades de tomada de decisão mais fortes.       |
| Processamento de fala | É formalmente conhecido como Processamento de Linguagem Natural (PLN). Esse é o campo da IA que faz o computador "entender" e interpretar voz humana.   |
| Visão computacional   | É o campo da tecnologia que estuda como os computadores podem "ver". Está atrelada à câmeras que captam as informações e o computador transforma em uma linguagem possível de entender.                                 |
| Robótica              | A IA aplicada à robótica pode fazer os robôs terem capacidades cognitivas semelhantes aos humanos, analisando cenários e tomando decisões. Usa métodos da Visão computacional e o Processamento de fala ao mesmo tempo. |

Fonte: Zhang e Lu, 2021

Durante muito tempo almejou-se que o computador fosse capaz de resolver problemas complexos. Para resolver esses tipos de problemas é necessário um aprendizado baseado em exemplos, o que é conhecido como aprendizado de máquina (Machine Learning) (ALBUQUERQUE; VIEIRA, 2019). Nessa metodologia é criado um modelo para aplicar o que foi aprendido com os exemplos, e então usar de um algoritmo que pode realizar três tipos de tarefas (BUDUMA, 2017):

- **Classificação:** São tarefas onde se treina um modelo para prever um número finito de categorias distintas dentro de um conjunto de dados. É comumente relacionado ao reconhecimento de imagens.
- **Regressão:** A regressão é uma modelagem pelo qual é possível entender como uma variável muda em relação a outra variável dentro de um mesmo conjunto de dados.
- **Agrupamento:** É o conjunto de tarefas onde se busca agrupar automaticamente dados sendo em semelhança de uns com os outros.

Dentro do aprendizado de máquinas estão os algoritmos que foram construídos para fazer o computador "aprender". São muitos os métodos usados, como: K-NN (k-nearest neighbors), redes neurais artificiais, SVM (support vector machine), floresta aleatória etc (THEODORIDIS, 2015). As redes neurais são um dos métodos mais usados atualmente, e estabeleceu uma subclassificação no aprendizado de máquina, o Deep Learning (aprendizado profundo).

### 3.5 Aprendizado Profundo

Quando as simulações computacionais começaram a aumentar de complexidade foi desenvolvido o conceito de aprendizado profundo (BUDUMA, 2017). Derivado do aprendizado de máquina, o aprendizado profundo introduz um mapeamento do conjunto de variáveis de entrada em relação a uma ou mais saídas (ALBUQUERQUE; VIEIRA, 2019).

O aprendizado profundo é baseado na escola filosófica do conexionismo, sendo o *perceptron* em múltipla camada o elemento mais básico. O *perceptron* tem a característica de receber informações e enviá-las para outros conectados. Uma outra característica do aprendizado profundo é chamada de engenharia de características automatizadas, o qual não necessita de um observador gerenciando quais características terão relevância para o modelo pois ele mesmo interpreta quais recursos devem ser utilizados (ALBUQUERQUE; VIEIRA, 2019). O conjunto dessas duas características gera o conceito de Redes Neurais Artificiais (RNA)

RNAs são técnicas de aprendizado profundo que usam mecanismos de aprendizado de sistemas biológicos para modelar concepções em conjuntos de dados (AGGARWAL, 2018). Em se tratando dos mecanismos de aprendizado, o mais completo e complexo do reino animal é o do ser humano, onde é constituído por mais de 86 bilhões de células nervosas conhecidas como Neurônios (VIEIRA; PINAYA; MECHELLI, 2020). Foi a partir do funcionamento do neurônio que foi desenvolvido a RNA. A Figura 8 contém uma representação de um neurônio.

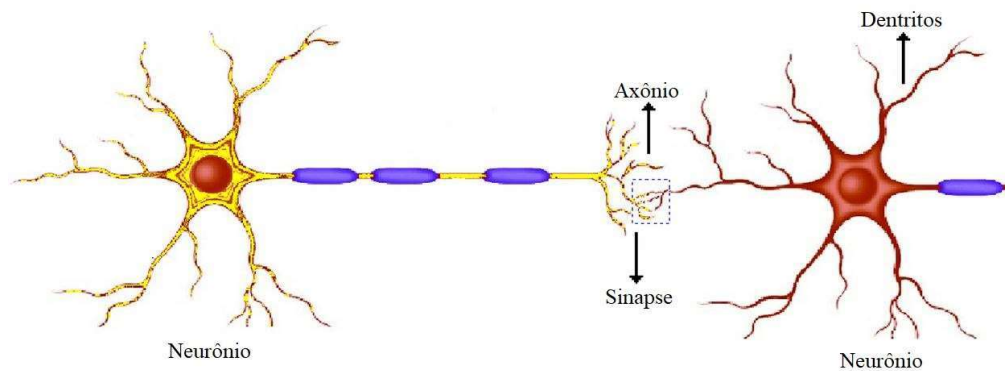


Figura 8: Representação gráfica de um neurônio biológico. Fonte: [conhecimentocientifico.r7.com/wp-content](http://conhecimentocientifico.r7.com/wp-content).

Os neurônios possuem conexões uns aos outros pelos axônios e dendritos para que a informação seja prolongada. Entre os axônios e dendritos existe uma região chamada de sinapse (VIEIRA; PINAYA; MECHELLI, 2020). Todo esse sistema faz com que o seres humanos sejam capazes de reconhecer padrões, falas, imagens e etc (AGGARWAL, 2018).

Em 1943, com a intenção de simular o cérebro humano, foi proposto um modelo neural artificial por Warren McCulloch e Walter Pitts, que continha unidades computacionais simulando os neurônios (BUDUMA, 2017). A construção do conjunto desses neurônios artificiais é muito semelhante aos neurônios biológicos, pois são encontrados os axônios e dendritos cada qual com um peso matemático correspondente  $w_m$ , onde  $m$  é o número de ligações entre neurônios (AGGARWAL, 2018). Os pesos podem assumir valores positivos ou negativos. Na Figura 9 está exposto um esquema de um neurônio artificial.

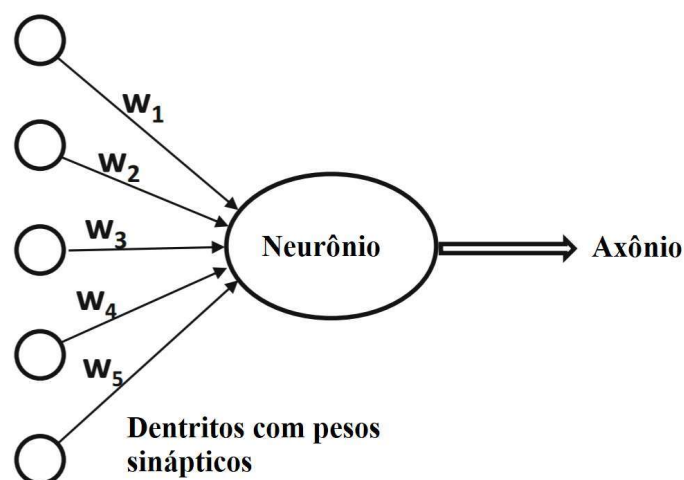


Figura 9: Representação gráfica de um neurônio Artificial. Fonte: Aggarwal, 2018.



Comparando as Figuras 8 e 9 é possível observar muitas semelhanças, isso faz com que o modelo de RNA seja então muito próximo da realidade. A estrutura de ligações de um neurônio artificial em outro também deve ser similar à estrutura de ligação entre neurônios biológicos.

A estrutura da RNA simples é formada por cinco partes (AGGARWAL, 2018): a camada entrada, as camadas escondidas, as ligações, a camada de saída e o bias. A camada de entrada é onde os sinais das variáveis independentes chegam à rede. As ligações são as conexões entre neurônios e também onde estão os pesos e as funções de ativação, e é através das ligações em que cada neurônio de uma camada se conectará com todos os outros da camada seguinte. As camadas ocultas são toda e qualquer camada que estão entre a entrada e a saída. A camada de saída é onde o sinal de resposta será obtido. Por fim, o Bias é um parâmetro de correção da função de ativação, podendo ter valor positivo ou negativo. Está contido na Figura 10 um esquema do Neurônio Artificial com os novos termos e um esquema da estrutura da rede.

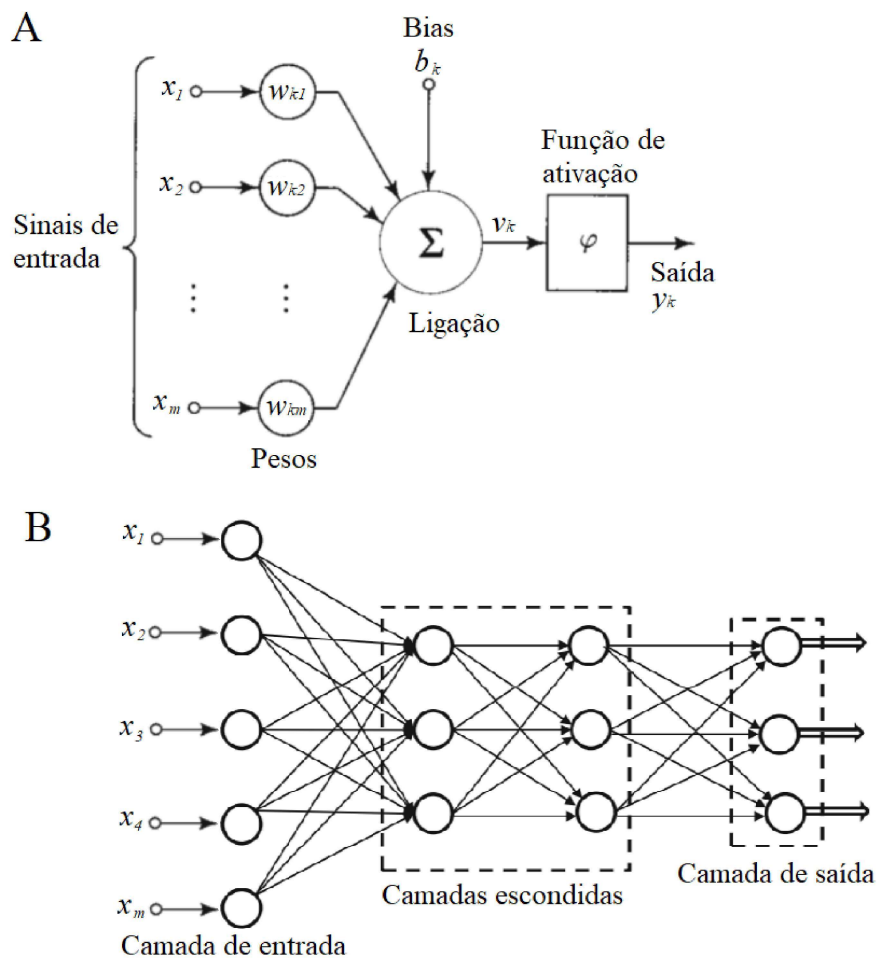


Figura 10: Esquema explicativo de um Neurônio Artificial completo (A), e da rede (B).  
Fonte: (HAYKIN, 2001; AGGARWAL, 2018)

Os termos usados na Figura 10 para representar a estrutura da RNA são os mesmos usados por Haykin (2001). Sendo assim, um sinal de entrada  $x_m$  na entrada  $m$  é multiplicado por um peso  $w_{km}$  e conectada com um neurônio  $k$ . O neurônio servirá como um operador de soma de todos os sinais de entrada multiplicados pelos respectivos pesos mais o bias, o que resultará em  $v_k$ . Finalmente, a função de ativação  $\varphi$  recebe o valor de  $v_k$  resultando no sinal de saída do neurônio  $y_k$ . Esse sinal será então enviado para outro neurônio onde o processo se repetirá até a camada de saída. As equações que descrevem os termos matemáticos de um neurônio  $k$  são:

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj}x_j \quad (3.17)$$

$$v_k = u_k + b_k \quad (3.18)$$

$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (3.19)$$

Entre todas as propriedades encontradas nas equações 3.17 a 3.19 os mais importantes são os pesos e a função de ativação. A maneira mais didática de explicar essas propriedades das RNAs é iniciando pela função de ativação.

### 3.5.1 Função de Ativação

As funções de ativação são importantes propriedades encontradas nas RNAs, sem elas os sinais de saída seriam funções lineares que limitariam a complexidade e o aprendizado de toda a rede (GAD; JARMOUNI, 2021). Dessa forma, as funções de ativação são fundamentais pois permitem às RNAs o aprendizado de modelos não-lineares (BUDUMA, 2017).

As RNAs aceitam várias funções de ativação diferentes, cada uma tem um alcance e curvas de crescimento diferentes. Muitos autores (QIAN et al., 2018; TAN; HU; CHEN, 2020; SCARDAPANE et al., 2019; APICELLA et al., 2021; AGGARWAL, 2018) mostram os principais tipos de funções de ativação usados atualmente nas RNAs, sendo eles: Degrau; Identidade; Sigmoid; Tanh; ReLu; Softplus.

### 3.5.1.1 Degrau

Essa é a função de ativação mais simples pois recebe apenas dois valores, 0 e 1. Na função degrau o valor de  $\varphi(x)$  é 1 quando  $x$  for maior que 0, e 0 quando  $x$  for menor que 0. A Equação 3.20 representa matematicamente a função degrau.

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

A função degrau também é conhecida como *tudo-ou-nada* pois tem a capacidade de ligar ou desligar totalmente um neurônio. Foi usada em um dos estudos pioneiros sobre RNAs por MacCulloch e Pitts em 1943 (HAYKIN, 2001). A desvantagem dessa função é que não aplica não-linearidades ao modelo. A curva dessa função está na Figura 11

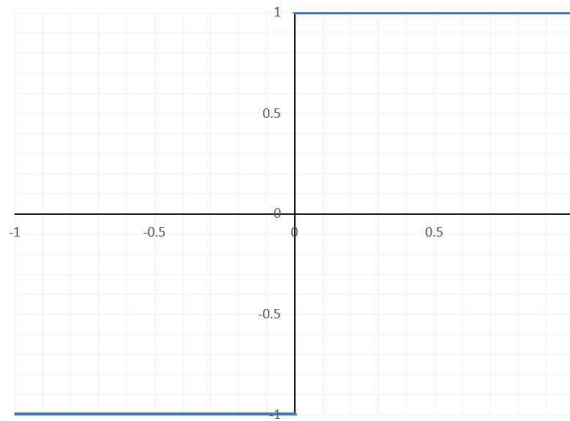


Figura 11: Representação gráfica da função degrau. Fonte: Próprio autor

### 3.5.1.2 Identidade

Assim como a função degrau, a identidade é uma função simples, no entanto, os valores podem variar de  $-\infty$  até  $+\infty$  (TAN; HU; CHEN, 2020). Essa função de ativação recebe o valor de  $x$  para qualquer  $(x)$  usado. A equação 3.21 representa matematicamente a função identidade.

$$\varphi(x) = x \quad (3.21)$$

A função identidade, de maneira semelhante à função degrau, não ativa não-linearidades ao modelo, contudo, ainda possui usos em situações específicas. Segundo Aggarwal (2018), se a variável estudada for um valor real, a função identidade é frequentemente usada na

camada de saída. A representação gráfica da função identidade está na Figura 12.

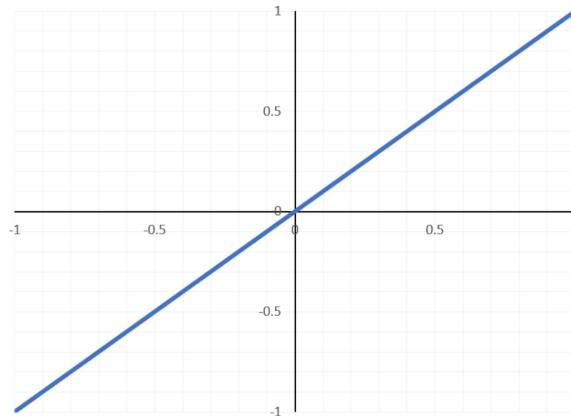


Figura 12: Representação gráfica da função de ativação identidade. Fonte: Próprio autor

### 3.5.1.3 Sigmoide

A função de ativação Sigmoide é a primeira a ativar a não-linearidades no modelo de RNA. Essa função também é conhecida como Logística, tendo muitas outras aplicações além das redes neurais (GAD; JARMOUNI, 2021). A Equação 3.22 descreve a Sigmoide.

$$\varphi(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3.22)$$

Pela Equação 3.22, quando  $x$  tende a  $-\infty$  o valor de  $\varphi(x)$  tende a -1. Já quando  $x$  tende a  $+\infty$  o valor de  $\varphi(x)$  tende a 1. Finalmente, para  $x$  igual a 0,  $\varphi(x)$  é 0.5. Segundo Aggarwal (2018), a função Sigmoide pode ser utilizada para realizar cálculos que devem ser interpretados como probabilidades devido à resposta de (0,1). Isso pode ser melhor visualizado na plotagem da função de ativação mostrado na Figura 13.

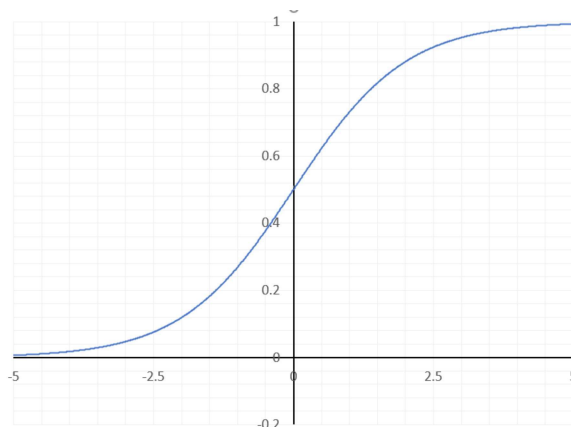


Figura 13: Representação gráfica da função de ativação Sigmoide. Fonte: Próprio autor

### 3.5.1.4 Tanh

A função de ativação Tanh é fundamentalmente a tangente hiperbólica de uma variável  $x$  (APICELLA et al., 2021). A Equação 3.23 descreve a Tanh.

$$\varphi(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (3.23)$$

Um dos principais problemas da função Sigmoide é não contemplar valores negativos de  $\varphi(x)$  para valores de  $x$ . Por outro lado, a função Tanh reproduz valores negativos e positivos com um formato semelhante. Isso ocorre pois as duas funções estão correlacionadas da forma:

$$\tanh(x) = 2\text{Sigmoide}(2x) - 1 \quad (3.24)$$

O gradiente de crescimento da função Tanh é maior e mais centrado que a Sigmoide facilitando o aprendizado da RNA. Dessa forma, a função Tanh é mais preferível do que Sigmoide quando se deseja valores positivos ou negativos (AGGARWAL, 2018). Isso possível de observar na representação gráfica da função Tanh, mostrada na Figura 14.

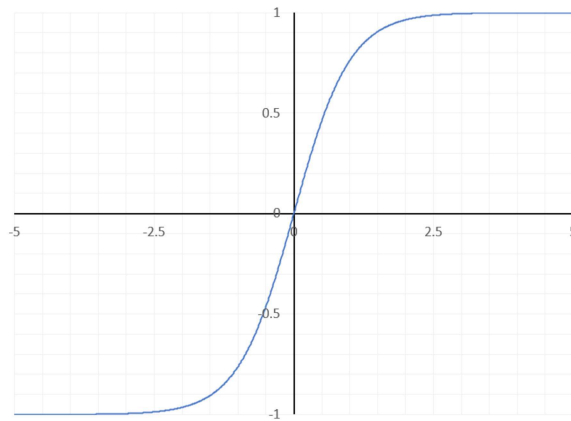


Figura 14: Representação gráfica da função Tanh. Fonte: Próprio autor.

A sigmoide e a função Tanh foram importantes para o desenvolvimento das RNAs pois introduziram a não-linearidades. No entanto, nos últimos anos, algumas funções de ativação linear por partes tornaram-se mais populares (APICELLA et al., 2021; TAN; HU; CHEN, 2020).

### 3.5.1.5 ReLu

A ReLu, também chamada de Unidade linear retificada (REctified Linear Unit), introduz a classe das funções de ativação linear por partes. A ReLu tem substituído as outras funções de ativação nas aplicações de RNAs devido à facilidade no treinamento (AGGARWAL, 2018). Essa função recebe o valor de 0 quando  $x$  for menor que 0 e é igual a  $x$  quando este for maior que 0. A Equação 3.25 descreve a ReLu.

$$\varphi(x) = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

O sistema de Equações 3.25 pode ser representado graficamente da forma da Figura .

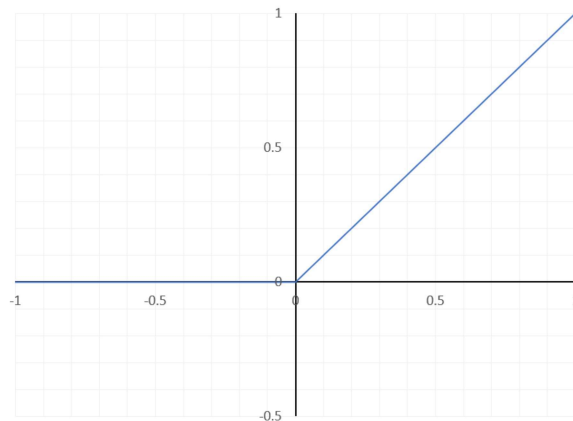


Figura 15: Representação gráfica da função ReLu. Fonte: Próprio autor.

Apicella et al. (2021) cita algumas vantagens da ReLu que estão fazendo com que seja uma das mais usadas atualmente:

- Mesmo sendo uma função de cunho linear, a ReLu ainda consegue manter o modelo com não-linearidades.
- Possibilita efeitos de interações entre as variáveis, ou seja, quando certa variável influencia a previsão de maneira diferente com base no valor de outra.
- Facilita o processamento computacional pois tem a capacidade de "desligar" neurônios específicos e manter outros ativados.

Apicella et al. (2021) também cita um efeito negativo que ocorre com a ReLu conhecida como "morte da ReLu". Esse efeito acontece quando um grande desvio negativo é

aprendido pela rede para fazer com que a saída do neurônio seja sempre zero, independentemente da entrada (TAN; HU; CHEN, 2020). Para resolver esse problema são feitas algumas alterações na estrutura da ReLu gerando novas funções, sendo a mais relevante a Softplus.

### 3.5.1.6 Softplus

A função Softplus é bastante recente, foi apresentada em 2000 por Dugas et al. (2000). Uma das características mais importantes da Softplus é a relação com a Sigmoide, pois a derivada da primeira função é igual à segunda. Isso é mostrado na Equação 3.26.

$$\varphi(x) = \ln(e^x + 1) \quad (3.26)$$

Observa-se que a Softplus funciona como uma versão suavizada da ReLu, garantindo ainda mais os efeitos de não-linearidade. Ainda assim, Apicella et al. (2021) argumenta que a ReLu é ainda melhor em fazer a RNA aprender. A Figura 16 contém uma representação gráfica Softplus.

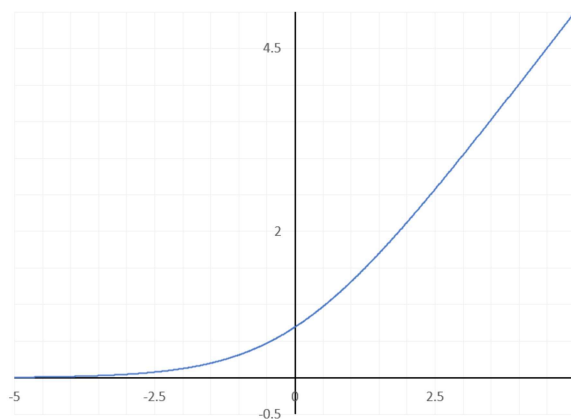


Figura 16: Representação gráfica da função Softplus. Fonte: Próprio autor

Uma vez a função de ativação selecionada, o próximo passo é entender como uma RNA realiza o treinamento para mudar os valores dos pesos e assim aprender com os dados aplicados.

## 3.6 Backpropagation

Em uma RNA o sinal da entrada  $x_m$  se propaga pelos neurônios intermediários para gerar um resultado na camada de saída, sendo esse esquema conhecido como propagação

progressiva (ALBUQUERQUE; VIEIRA, 2019). No entanto, uma vez que os pesos não são incrementados, a RNA não consegue aprender com o conjunto de dados. Com o intuito de atualizar os pesos foi desenvolvido o esquema de retropropagação.

De maneira resumida, o método consiste em remodelar os pesos usando o resultado de cada amostra do conjunto de treino com base em comparar com o sinal de saída, remodelando assim os pesos das camadas anteriores à de saída (ALBUQUERQUE; VIEIRA, 2019). Aggarwal (2018) mostra que a retropropagação se divide em duas etapas:

- **Fase de avanço:** Nessa fase, os pesos são setados inicialmente resultando em um série direta de cálculos entre as camadas resultando no sinal de saída. A diferença entre o sinal de saída calculado e o valor real é chamado de Função de Perda  $L$ . O gradiente da função de perda ( $\nabla L$ ) é então calculado com relação ao pesos em todas as camadas no sentido contrário ao da rede.
- **Fase de retrocesso:** Nesse momento é usado a regra da cadeia do cálculo diferencial para aprender o gradiente da função de perda em relação aos diferentes pesos. Uma vez que essa regra é aplicada, o gradiente é minimizado para encontrar a média dos novos pesos.

Considerando um neurônio  $h_r$  em uma camada escondida com  $k$  neurônios, onde  $0 < r < k, m$ , o peso que liga os neurônios  $h_r$  e  $h_{r+1}$  é  $w_{h_r, h_{r+1}}$ . Aplicando a regra da cadeia do cálculo à derivada função de perda pelo peso  $w_{h_r, h_{r+1}}$  obtém-se (AGGARWAL, 2018):

$$\frac{\partial L}{\partial w_{(h_r, h_{r+1})}} = \frac{\partial L}{\partial o} \cdot \frac{\partial \varphi(v_o)}{\partial v_o} \cdot \left[ \sum_{[h_r, \dots, h_k, o]} \frac{\partial v_o}{\partial v_{h_k}} \prod_{i=r}^{k-1} \frac{\partial v_{h_{i+1}}}{\partial v_{h_i}} \right] \frac{\partial v_{h_r}}{\partial w_{(h_r, h_{r+1})}} \quad (3.27)$$

Onde  $o$  representa a camada de saída. Resolver a Equação diferencial 3.27 computacionalmente não é trabalhoso pois as funções de ativação das RNAs possuem derivadas conhecidas (HAYKIN, 2001). Ao resolver a Equação diferencial 3.27 para cada neurônio da rede obtém-se novos valores de pesos mais atualizados com o conjunto de dados. No entanto, apenas um cálculo dos pesos não é suficiente para a fazer a rede aprender corretamente. Nesse caso é calculada uma nova saída com os pesos atualizados e então o processo é repetido iterativamente por uma quantidade específica de épocas ( $t$ ).

Os modelos de RNAs normalmente usam diferentes algoritmos para resolver a Equação diferencial 3.27. Esses algoritmos são chamados em sua maioria de otimizadores e ajudam



a RNA acelerando a convergência dos pesos, prevenindo saltos em valores extremos e atribuindo valores iniciais para os pesos (HAYKIN, 2001). Os otimizadores mais comuns são: otimizador GD, otimizador de momento, Nesterov, AdaGrad, AdaDelta, RMSProp, Adam, AdaMax, e Nadam (HAYKIN, 2001; GUPTA et al., 2020).

Caso  $t$  seja muito pequeno, ou seja, pouca atualização dos pesos, o modelo não será capaz de representar todos os valores de saída, esse problema é comumente chamado de *underfitting* (GAD; JARMOUNI, 2021). Todavia, caso  $t$  seja muito grande, ou seja, muita atualização dos pesos, o modelo é capaz de representar os valores de saída tão bem que pode se tornar um grande problema. Isso faz com que o modelo se acostume somente aos valores treinados e novos dados aplicados não sejam representado no modelo. Esse problema é conhecido como *overfitting* sendo mais nocivo à RNA que o *underfitting* pois pode maquiar o modelo com bons resultados (GAD; JARMOUNI, 2021).

Dessa forma, o ideal para uma RNA é encontrar um valor *ótimo* de  $t$  para representar bem tanto os dados de treino quanto eventuais novos dados a serem adicionados ao conjunto. Considerando um modelo hipotético, o *underfitting*, *overfitting* e *ótimo* são representados na figura 17.

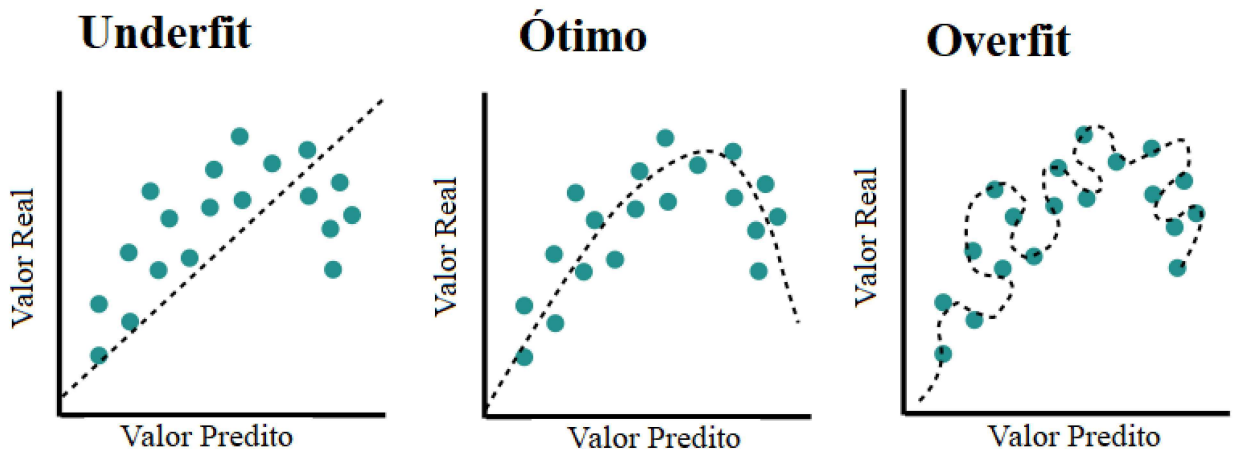


Figura 17: Representação de modelos com *underfitting*, *overfitting* e *ótimo*. Fonte: Próprio autor

### 3.7 Vantagens das RNAs

Existem muitas vantagens ao usar uma RNA na computação como modelos de aprendizado. Haykin (2001) citou as principais propriedades úteis das RNAs:

1. **Não-linearidade:** Sendo uma das propriedades mais importantes das RNAs, a não-

linearidade é distribuída ao longo de toda rede. Isso faz com que as RNAs sejam capazes de resolver problemas com alto grau de não-linearidade na entrada.

2. **Adaptabilidade:** Uma RNA treinada para funcionar em um conjunto de dados específico pode ser facilmente retreinada para lidar com pequenas mudanças nas condições operacionais desse conjunto. Além disso, uma RNA pode ser projetada para atualizar os pesos em tempo real.
3. **Tolerância à falhas:** As RNAs possuem a habilidade de serem tolerantes à falhas. Isso ocorre pois se por algum motivo um ou mais neurônios falhem durante o aprendizado, os demais neurônios modificam seus pesos para se ajustar à nova configuração. Considera-se então que a RNA não é centralizada à apenas um neurônio.
4. **Facilidades de *Hardware*:** As RNAs são capazes de usar tanto a CPU quanto a GPU para processamento dos conjuntos de dados utilizados, pois usam do chamado *processamento paralelo*.

O próximo passo depois de compreender a teoria que envolve a fabricação de filmes por sputtering, assim como a teoria sobre regressão e RNAs, é construir uma metodologia para: experimentalmente fabricar o filmes, analisar a espessura dos filmes fabricados e construir o algoritmo de regressão por RNA.

## 4 Metodologia

### 4.1 Introdução

A metodologia usada nesse trabalho fundamenta-se nos procedimentos utilizados para a otimização da rugosidade no processo de fabricação de filmes de Molibdênio (Mo) por RF Magnetron sputtering através de Redes Neurais Artificiais. Para obter esse método serão realizadas algumas etapas: A fabricação de filmes finos de Mo por deposição catódica; A avaliação da rugosidade dos filmes produzidos através da técnica de perfilometria óptica; A construção de um algoritmo de Redes Neurais para otimização.

Os dois primeiros passos serão realizados com ajuda de equipamentos pertencentes aos laboratórios de Síntese e Caracterização de Filmes Finos (LabFilm) e ao Laboratório integrado de Biomateriais (LABIO), ambos da UFPB. Já o terceiro passo será feito através de computação na nuvem ao usar a plataforma de computação Google Colaboratory™.

### 4.2 Fabricação e Caracterização dos Filmes

A primeira e a segunda etapas desse trabalho constituem a fabricação de filmes finos de Molibdênio produzidos em um equipamento de *RF Magnetron Sputtering* e a caracterização por perfilometria óptica destes filmes.

Assim sendo, para o desenvolvimento completo dos filmes de Molibdênio é necessário uma série de passos: Preparação do substrato; Escolha da matéria prima; Uso do *Sputtering*.

#### 4.2.1 Preparação do substrato

A escolha do substrato onde o filme será depositado é fundamental para algumas características tribológicas como adesão, rugosidade e espessura. Dessa forma, foram uti-

lizados substratos de aço inoxidável AISI 304 com dimensões de 30mm por 30mm. Esse aço apresenta ótimas propriedades de resistência térmica e é resistente à oxidação em temperaturas de até 850 °C, além de ser resistente à corrosão intergranular em temperaturas de até 300 °C. A constituição desse aço, segundo o fabricante é: Aço cromo-níquel, inoxidável austenítico, não-temperável, não-magnético, tipo 18-8.

Foram então selecionados 12 substratos para a fabricação de 12 filmes de Mo. Os substratos foram então submetidos à dois tipos de tratamentos superficiais (limpeza com hexano e eletropolimento).

#### 4.2.1.1 Limpeza com Hexano

Seis substratos de aço foram escolhidos para serem limpos usando uma solução de Hexano. Os substratos foram então colocados em um béquer contendo 300 ml de hexano e deixados por cerca de 15 minutos. A cada 5 minutos o béquer foi agitado para certificar que os substratos estavam propriamente imersos. Depois dos 15 minutos foi retirado o excesso de hexano de cada substrato usando água destilada e então secos com papel absorvedor. Ao final do processo os seis substratos foram então preparados para a deposição dos filmes no RF Magnetron Sputtering.

#### 4.2.1.2 Eletropolimento

O polimento eletrolítico é realizado em 300 mL de solução ácida, e sua proporção de componentes é baseada no trabalho de (LIN; HU, 2008), de acordo com a Tabela 7.

Tabela 7: Composição da Solução Eletrolítica usada para o Eletropolimento.

| Componente  | Volume (mL) |
|---|-------------|
| H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (Ácido Fosfórico)        | 150         |
| H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (Ácido Sulfúrico)        | 75          |
| C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub> (Glicerol) | 75          |

Fonte: Lin e Hu, 2008.

Durante o processo de montagem do circuito, uma malha de aço inoxidável AISI 304 com dimensões de 80mm por 300mm foi colocada em um béquer, estava parcialmente imerso em solução ácida, e conectada ao eletrodo negativo de uma fonte de tensão contínua. Os substratos ficaram totalmente imersos na solução, envolto por uma malha e conectado ao eletrodo positivo da fonte de tensão

De acordo com o método de Gonçalves (2020), para iniciar o processo, foi utilizada uma fonte de tensão de 6 V (Agilent, modelo E3631A) com o intuito de operar um substrato sacrificial para obter uma estabilidade de corrente de aproximadamente 1,35 Amperes. A necessidade de uma corrente estável afeta um melhor acabamento superficial, proporcionando uniformidade no processo. Então, os seis substratos foram eletropolidos por 10 minutos, posteriormente foram enxaguados com água destilada e secados com papel absorvente. Ao final do processo de eletropolimento, os substratos foram então preparados para a deposição dos filmes no RF Magnetron Sputtering.

## 4.2.2 Matéria prima

O Molibdênio é o metal refratário mais comumente usado. É caracterizado por alta ductilidade e baixo coeficiente de expansão em altas temperaturas. Além do mais, o molibdênio pode aumentar a dureza e a resistência das ligas de aço, tornando-as resistentes a ácidos e aumentando sua resistência à corrosão quando reveste uma superfície (WANG et al., 2021b; ZHANG et al., 2021; CHERKASHINA et al., 2019)

Outro importante aspecto do Molibdênio é a alta refletividade na faixa ótica do espectro eletromagnético (UV, luz visível, IV). Essas ótimas propriedades reflexivas do molibdênio tornam possível usá-lo para criar revestimentos espelhados em aplicações aeroespaciais, de energia solar e como revestimento reflexivos (ZHANG et al., 2021).

Todas essas características fazem do molibdênio um dos materiais mais utilizados e competitivo no mercado de tecnologia, sendo amplamente utilizado na indústria de metalurgia, aeroespacial e militar, óptica e de revestimentos etc (ZHANG et al., 2021; CHERKASHINA et al., 2019).

Sendo assim, a concepção de filmes de Molibdênio para a pesquisa em laboratórios é fundamental para o desenvolvimento das tecnologias em que é aplicado. Portanto, o Molibdênio foi selecionado como matéria prima para o desenvolvimento dos filmes finos por RF Magnetron Sputtering.

## 4.2.3 Sputtering

A deposição dos filmes foi realizada com a utilização de um Sistema Sputtering RF Orion 5, fabricado pela empresa AJA International Inc., pertencente ao Laboratório de Síntese e Caracterização de Filmes Finos (LabFilm/CEAR/UFPB).

Para a deposição da camada absorvedora, foi empregado um alvo comercial de molibdênio (Mo) com alto grau de pureza (99,97%). O alvo cilíndrico foi fornecido pela empresa AJA International Inc. medindo 50,8mm de diâmetro e 6,35mm de espessura. Foi também escolhido o Argônio como gás utilizado par o processo de sputtering devido a sua disponibilidade no laboratório e a característica de produzir a melhor eficiência de pulverização catódica (SAGARA et al., 2020).

Deve-se enfatizar que o alvo de Mo passou por um processo de pré-pulverização catódica antes de o filme ser depositado. Ou seja, o alvo é colocado em frente ao substrato sacrificial na câmara, onde o processo de pulverização catódica é realizado por 10 minutos. Considerando que uma camada de óxido será formada na superfície do alvo quando este estiver em contato com a atmosfera, ao utilizar este método, a pré-pulverização visa remover esta camada e evitar a contaminação durante a deposição da amostra.

#### 4.2.3.1 Parâmetros de fabricação

Os parâmetros de deposição são extremamente importantes para a obtenção de filmes com boas propriedades (pressão do gás argônio, distância de trabalho, potência aplicada, tempo de deposição e preparação do substrato), pois afetam diretamente as estruturas dos mesmos. Foram usadas as teorias do design de experimentos para escolher os melhores valores e condições para avaliar a influência dos parâmetros na rugosidade do filme (ANTONY, 2014). Sendo assim, os parâmetros usados neste trabalho estão descritos em detalhes nos pontos a seguir.

- **Pressão do gás argônio ( $mTorr$ ):** A pressão média empregada na confecção dos filmes foi de  $5.0m Torr$ . Esse parâmetro foi mantido constante por ser difícil garantir um valor fixo durante o processo.
- **Distância de trabalho ( $mm$ ):** O Equipamento de sputtering permite variar a distância entre o ponto de posicionamento dos substratos e o alvo. Esse valor foi mantido fixo em 105 mm,
- **Potência aplicada ( $W$ ):** Uma vez que cada tipo de material tem uma energia de ligação específica entre seus átomos, cada composto precisa de um valor específico com potência suficiente para superar essa energia e tente ejetar suas partículas. Então, para o alvo de Mo, será aplicado a potência de 40 e 60 W, assim, já será possível observar o efeito da potência na fabricação do filme.

- **Tempo de deposição (*min*)** Enquanto o parâmetro da potência influencia muito na taxa de deposição, o tempo de deposição está diretamente ligado à rugosidade que o filme atingirá. Portanto os filmes foram construídos em tempos de deposição de 5, 10, 20 e 30 minutos.

Diante do exposto, reunindo todos os parâmetros discutidos (condições de deposição e tratamentos superficiais), foram adotadas nomenclaturas para as amostras com o intuito de ajudar na organização do projeto. A nomenclatura está exposta na Tabela 8

Tabela 8: Nomenclatura dada aos Filmes Finos de Mo produzidos.

| Amostras | Tratamento Superficial | Potência | Tempo de deposição |
|----------|------------------------|----------|--------------------|
| H1       | Hexano                 | 40       | 5                  |
| H2       | Hexano                 | 40       | 10                 |
| H3       | Hexano                 | 60       | 5                  |
| H4       | Hexano                 | 60       | 10                 |
| H5       | Hexano                 | 60       | 20                 |
| H6       | Hexano                 | 60       | 30                 |
| E1       | Eletropolimento        | 40       | 5                  |
| E2       | Eletropolimento        | 40       | 10                 |
| E3       | Eletropolimento        | 60       | 5                  |
| E4       | Eletropolimento        | 60       | 10                 |
| E5       | Eletropolimento        | 60       | 20                 |
| E6       | Eletropolimento        | 60       | 30                 |

Fonte: Próprio Autor.

#### 4.2.3.2 Procedimentos para fabricação

Para a deposição da camada absorvedora, o alvo de Mo e os substratos de aço inoxidável foram posicionados na câmara de vácuo a uma distância de 105 mm entre si. A câmara foi evacuada com auxílio de uma bomba até a pressão de 0.01 mTorr e na sequência iniciou-se a injeção do gás para a formação do plasma. O gás utilizado foi o Argônio 5.0, com fluxo para a câmara de 10 sccm, estabelecendo um novo equilíbrio de pressão a 5,0 mTorr, sendo essa considerada como a pressão aplicada ao longo de todo o processo de deposição.

Em seguida, ocorreu a ativação do plasma por meio do acionamento da fonte de tensão RF ajustando o valor da potência de trabalho desejado para a deposição. Durante todo o

processo, o substrato rotacionou com velocidade constante de 20 rpm.

Para garantir a confiabilidade dos resultados obtidos, foram confeccionadas réplicas e tréplicas para cada condição, totalizando assim, 36 amostras. Foi feito então uma média com os valores de rugosidade para cada conjunto de filmes.

#### 4.2.4 Perfilometria óptica

A perfilometria óptica é um método usado para medir o perfil topográfico de uma superfície, a fim de quantificar sua rugosidade e a espessura do filme. Sendo assim, essa caracterização foi realizada com o intuito de determinar a rugosidade superficial média ( $Ra$ ) dos revestimentos depositados. A perfilometria óptica foi realizada no Laboratório Integrado de Biomateriais (LABIO) do Centro de Ciências da Saúde (CCS/UFPB), empregando um Perfilômetro sem contato modelo CCI MP da Taylor Hobson.

### 4.3 Rede Neural

Uma vez que os filmes finos de Mo foram produzidos e suas características morfológicas avaliadas pela perfilometria óptica, o próximo passo foi desenvolver um algoritmo de RNA. Depois da construção do algoritmo foi então selecionado algumas métricas estatísticas importantes para avaliar a confiabilidade dos resultados.

#### 4.3.1 Desenvolvimento do Algoritmo

O Algoritmo foi escrito na plataforma de computação Google Colaboratory™ que pertence à empresa Google™. Essa plataforma usa de computação na nuvem para realizar as operações, ou seja, o código é compilado no Datacenter mais próximo da Google™ e os resultados são enviados de volta para o usuário.

O Google Colaboratory™ usa como linguagem de computação o Python. Sendo assim, foi necessário a aplicação de diversas bibliotecas extras para ajudar no desenvolvimento do algoritmo:

- **Numpy:** NumPy é um projeto de código aberto que visa habilitar a computação numérica com Python. Foi usado para realizar cálculos matemáticos importantes durante a construção do algoritmo.



- **matplotlib.pyplot**: Matplotlib.pyplot é uma biblioteca abrangente para a criação de visualizações estáticas, animadas e interativas em Python. Foi empregue na construção dos gráficos mais simples para visualizar algumas propriedades estatísticas do conjunto de dados.
- **Pandas**: O pandas é uma biblioteca de análise e manipulação de dados de código aberto rápida, poderosa, flexível e fácil de usar, construído com base na linguagem de programação Python. Foi usada na manipulação dos dados contidos na Tabela 8.
- **Seaborn**: Seaborn é uma biblioteca de visualização de dados e parâmetros estatísticos baseada em matplotlib. Foi usado para fornecer uma interface de alto nível para desenhar gráficos estatísticos atraentes e informativos dos dados contidos na Tabela 8.
- **Keras**: Keras é uma API de aprendizado profundo escrita em Python, executada na plataforma de aprendizado de máquina TensorFlow, que por sua vez é uma plataforma completa de código aberto para machine learning. A biblioteca Keras foi usada para desenvolver a estrutura de aprendizado da RNA.

### 4.3.2 Estrutura da RNA

A RNA foi construída usando o API Keras no framework TensorFlow. Alguns autores (STULP; SIGAUD, 2015; WANG et al., 2021a) indicam que estudos de regressão aplicados às RNAs necessitam de pelo menos uma camada escondida e cerca de 3 vezes o número de dados em neurônios por camada. Sendo assim a rede foi construída com três camadas escondidas, onde as duas primeiras possuem 10 neurônios e a última contém 15. Dessa forma, os problemas que podem ocorrer ao usar uma pequena quantidade de dados são revertidos.

Foi escolhido o Relu como função de ativação para todos os neurônios pela sua capacidade de representar dados com baixa linearidade ou completa não-linearidade. Para a atualização dos pesos da rede, foi escolhido o otimizador Rmsprop pois esse mantém uma média móvel dos gradientes e usa essa média para estimar a variância dos novos pesos.

A fim de evitar problemas com *Overfitting* foram feitos dois procedimentos: A rede foi iterada apenas 25 vezes até que o erro residual fosse suficientemente baixo; Foi usado o *Dropout*, uma técnica de regularização para impedir coadaptações complexas nos dados

do treinamento, dentro da estrutura da rede. O tamanho do lote foi mantido em 3 para levar a uma precisão maior nos testes.

Algumas modificações no conjunto de dados são necessárias antes de aplica-la à RNA. Primeiramente, para que a RNA entenda o tratamento no substrato que está sendo usado foram criados duas colunas (Htratamento e Etratamento). Quando uma amostra passou por um dos tratamentos, ela então recebe o valor de 1 para a camada que representa o tratamento usado e 0 para a outra. Dessa forma, evita que exista alguma relação matemática entre os dois tratamentos. Essas colunas foram adicionadas à Tabela 8 gerando a Tabela 9.

Tabela 9: Parâmetros de construção dos Filmes Finos de Mo com as colunas Htratamento e Etratamento.

| <b>Amostras</b> | <b>Tratamento Superficial</b> | <b>Htratamento</b> | <b>Etratamento</b> | <b>Potência</b> | <b>Tempo de deposição</b> |
|-----------------|-------------------------------|--------------------|--------------------|-----------------|---------------------------|
| <b>H1</b>       | Hexano                        | 1                  | 0                  | 40              | 5                         |
| <b>H2</b>       | Hexano                        | 1                  | 0                  | 40              | 10                        |
| <b>H3</b>       | Hexano                        | 1                  | 0                  | 60              | 5                         |
| <b>H4</b>       | Hexano                        | 1                  | 0                  | 60              | 10                        |
| <b>H5</b>       | Hexano                        | 1                  | 0                  | 60              | 20                        |
| <b>H6</b>       | Hexano                        | 1                  | 0                  | 60              | 30                        |
| <b>E1</b>       | Eletropolimento               | 0                  | 1                  | 40              | 5                         |
| <b>E2</b>       | Eletropolimento               | 0                  | 1                  | 40              | 10                        |
| <b>E3</b>       | Eletropolimento               | 0                  | 1                  | 60              | 5                         |
| <b>E4</b>       | Eletropolimento               | 0                  | 1                  | 60              | 10                        |
| <b>E5</b>       | Eletropolimento               | 0                  | 1                  | 60              | 20                        |
| <b>E6</b>       | Eletropolimento               | 0                  | 1                  | 60              | 30                        |

Fonte: Próprio Autor.

Posteriormente foi feita a normalização dos dados, que consistem em dividir os elementos de cada coluna pelo valor máximo da coluna. Isso faz com que os dados possam ser comparáveis entre si, e que a variância fique estável. Normalizando os dados na Tabela 9 é produzida a Tabela 10.

Tabela 10: Parâmetros de construção dos Filmes Finos de Mo com normalização.

| Amostras  | Tratamento Superficial | Htratamento (norm.) | Etratamento (norm.) | Potência (norm.) | Tempo de deposição (norm.) |
|-----------|------------------------|---------------------|---------------------|------------------|----------------------------|
| <b>H1</b> | Hexano                 | 1                   | 0                   | 0.6667           | 0.1667                     |
| <b>H2</b> | Hexano                 | 1                   | 0                   | 0.6667           | 0.3333                     |
| <b>H3</b> | Hexano                 | 1                   | 0                   | 1                | 0.1667                     |
| <b>H4</b> | Hexano                 | 1                   | 0                   | 1                | 0.3333                     |
| <b>H5</b> | Hexano                 | 1                   | 0                   | 1                | 0.6665                     |
| <b>H6</b> | Hexano                 | 1                   | 0                   | 1                | 1                          |
| <b>E1</b> | Eletropolimento        | 0                   | 1                   | 0.6667           | 0.1667                     |
| <b>E2</b> | Eletropolimento        | 0                   | 1                   | 0.6667           | 0.3333                     |
| <b>E3</b> | Eletropolimento        | 0                   | 1                   | 1                | 0.1667                     |
| <b>E4</b> | Eletropolimento        | 0                   | 1                   | 1                | 0.3333                     |
| <b>E5</b> | Eletropolimento        | 0                   | 1                   | 1                | 0.6667                     |
| <b>E6</b> | Eletropolimento        | 0                   | 1                   | 1                | 1                          |

Fonte: Próprio Autor.

Depois de normalizar o conjunto de dados foi necessário separar em conjunto de treino (responsável por treinar a RNA) e conjunto de teste (conjunto de controle para as métricas estatísticas e confiabilidade da regressão). A proporção escolhida para a separação foi de 70% para o conjunto de treino e 30% para o conjunto de teste. Essa proporção já garante que o treinamento e o teste ocorreram de maneira satisfatória. No entanto o ideal é que esses conjuntos sejam separados de maneira aleatória. Para isso foi utilizado o comando *shuffle* da biblioteca *sklearn.utils*.

Ao atualizar o conjunto de dados, o passo seguinte foi fazer o mesmo com os resultados da análise de perfilometria. Ao final, o conjunto de dados foi aplicado na RNA e foram obtidos resultados para a análise da otimização da rugosidade de filmes.

## 5 Resultados e Discussões

Uma vez que todas as análises foram feitas da maneira descrita na metodologia, o passo seguinte é avaliar os resultados obtidos e discuti-los com o intuito de chegar a uma conclusão. Para tal, este capítulo será dividido em duas partes, onde a primeira compreende os resultados nas análises de morfologia dos filmes construídos e a segunda contém os resultados da avaliação da regressão.

### 5.1 Caracterização Morfológica dos Revestimentos

Com o auxílio do Perfilômetro foi possível avaliar a morfologia da superfície e a rugosidade média ( $R_a$ ) dos revestimentos. Estão contidas nas Figuras 18 e 19, os perfis morfológicos de alguns dos filmes depositados sobre substratos de aço tratado com Hexano e Eletropolimento. Não foi possível obter o perfil morfológico para as amostras H2 e H3.

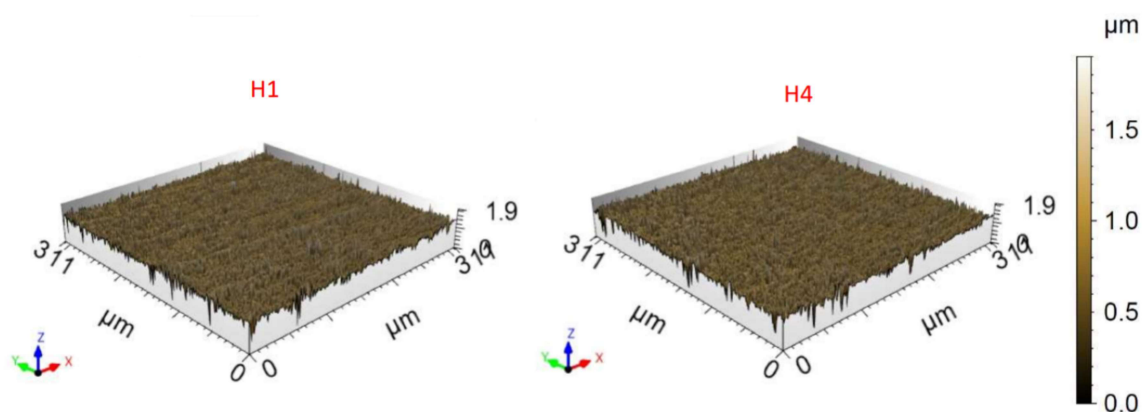


Figura 18: Perfil morfológico das amostras H1 e H4. Fonte: Próprio autor

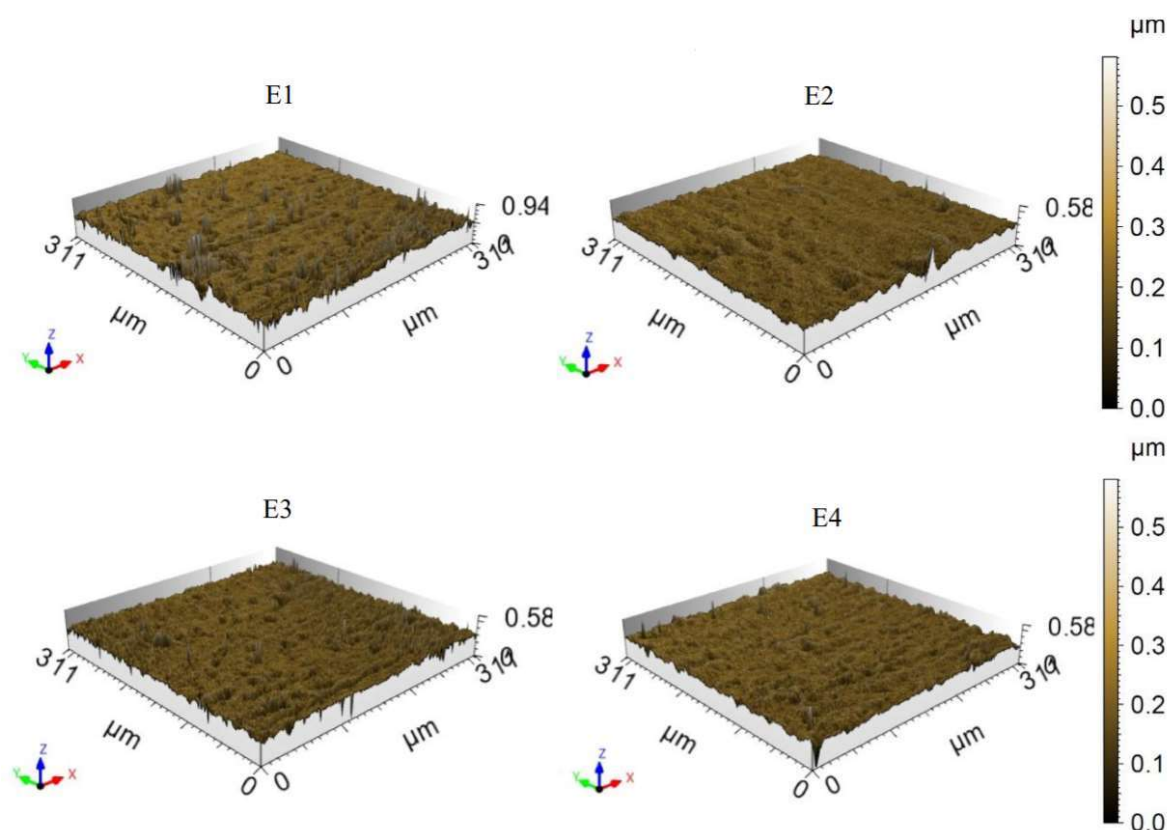


Figura 19: Perfil morfológico das amostras E1 a E4. Fonte: Próprio autor

já para o cálculo de Ra, o equipamento estipulou a rugosidade em oito pontos para cada filme, onde foi feito uma média entre esses valores. Posteriormente foi feito um segundo cálculo de média com a rugosidade dos filmes, suas réplicas e tréplicas. Finalmente obteve-se o valor da Rugosidade média (Ra) para as 12 amostras. Esses valores estão descritos na Tabela 11.

Tabela 11: Rugosidade média de cada amostra.

| Amostras | Ra<br>( $\mu\text{m}$ ) | Amostras | Ra<br>( $\mu\text{m}$ ) |
|----------|-------------------------|----------|-------------------------|
| H1       | 126                     | E1       | 24                      |
| H2       | 115                     | E2       | 18                      |
| H3       | 119                     | E3       | 29                      |
| H4       | 123                     | E4       | 17                      |
| H5       | 131                     | E5       | 27.9                    |
| H6       | 115                     | E6       | 15.3                    |

Fonte: Próprio Autor.

De modo geral, observa-se pela Tabela 11 que as amostras que passaram pelo tratamento de limpeza com Hexano apresentaram maiores valores de Ra quando comparados com as amostras que passaram pelo tratamento de Eletropolimento. Isso indica uma relação do tratamento superficial com a rugosidade média de uma amostra. Esse efeito é melhor visualizado na Figura 20.

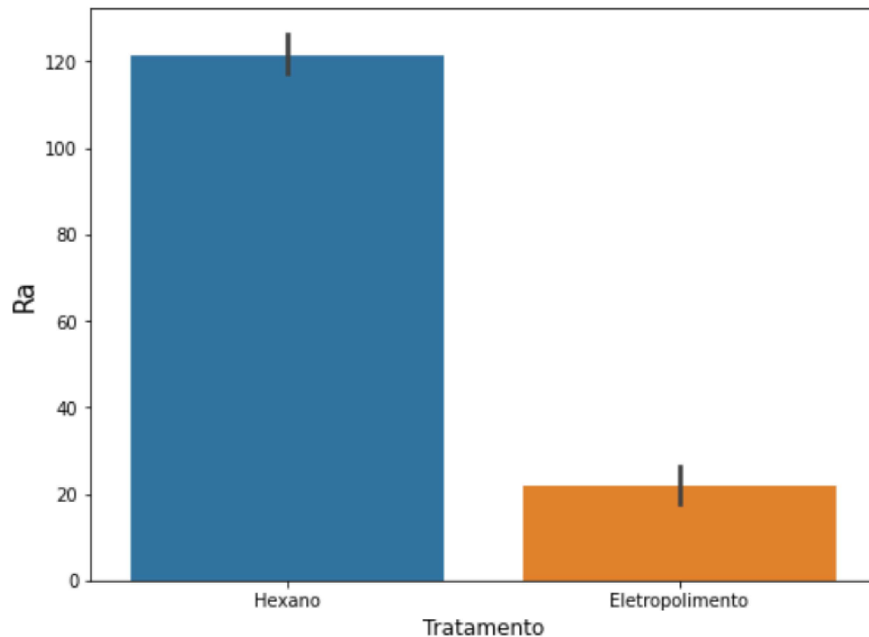


Figura 20: Estimativa de tendência central da rugosidade de acordo com o tratamento superficial

Pela Figura 20 é possível notar graficamente o efeito do tratamento superficial na Rugosidade. Os substratos que passaram pelo tratamento por Hexano apresentaram, em média, um Ra de  $120 \mu\text{m}$  com uma pequena incerteza de aproximadamente  $5 \mu\text{m}$ . Já os substratos que passaram pelo tratamento de Eletropolimento apresentaram uma média de Ra de  $21 \mu\text{m}$  com uma pequena incerteza de aproximadamente  $5 \mu\text{m}$ . Essa diferença ocorreu principalmente pelas características dos tratamentos superficiais. O Hexano funciona como um desengordurante removendo apenas uma camada superficial de sujeira, dessa forma, algumas impurezas se mantiveram no filme produzindo maiores valores de Ra. Por outro lado, o Eletropolimento melhora o acabamento da superfície gerando menos rugosidade no filme produzido e conseqüentemente menores valores de Ra.

Nesse momento é importante analisar o efeito que os outros parâmetros (Potência e Tempo) influenciam nos valores de Ra. Para melhor visualização a Tabela 9 será atualizada com valores de Ra mostrados na Tabela 11 e assim chega-se à Tabela 12.

Tabela 12: Rugosidade média e parâmetros de fabricação de cada amostra.

| Amostras | Htratamento | Etratamento | Potência (W) | Tempo de deposição (min) | Ra ( $\mu\text{m}$ ) |
|----------|-------------|-------------|--------------|--------------------------|----------------------|
| 1        | 1           | 0           | 40           | 5                        | 126                  |
| 2        | 1           | 0           | 40           | 10                       | 115                  |
| 3        | 1           | 0           | 60           | 5                        | 119                  |
| 4        | 1           | 0           | 60           | 10                       | 123                  |
| 5        | 1           | 0           | 60           | 20                       | 131                  |
| 6        | 1           | 0           | 60           | 30                       | 115                  |
| 7        | 0           | 1           | 40           | 5                        | 24                   |
| 8        | 0           | 1           | 40           | 10                       | 18                   |
| 9        | 0           | 1           | 60           | 5                        | 29                   |
| 10       | 0           | 1           | 60           | 10                       | 17                   |
| 11       | 0           | 1           | 60           | 20                       | 27,9                 |
| 12       | 0           | 1           | 60           | 30                       | 15,3                 |

Fonte: Próprio autor.

Com o intuito de relacionar os parâmetros de deposição com os valores de Rugosidade correspondente foi construído um gráfico em três dimensões mostrado na Figura 21.

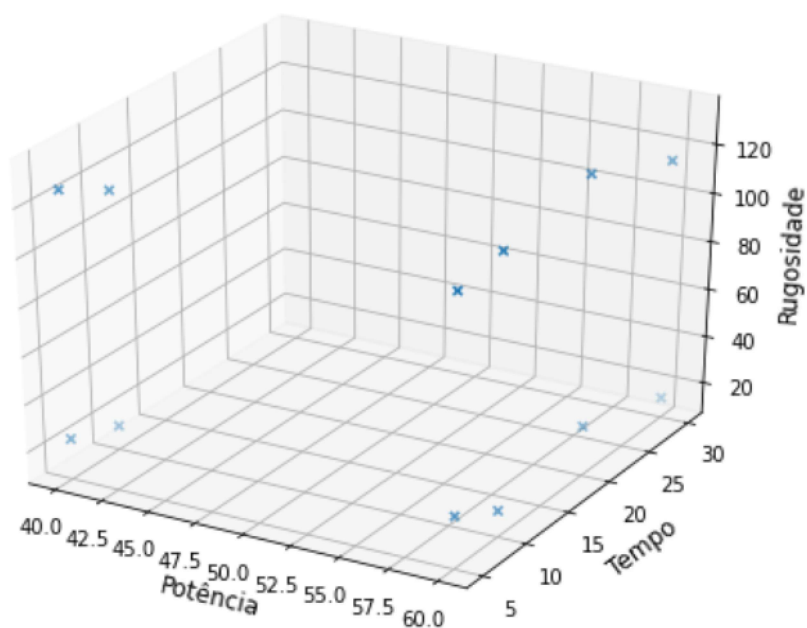


Figura 21: Gráfico de dispersão entre os parâmetros de deposição e a Rugosidade. Fonte: Próprio autor.

Pela Tabela 12 também é possível observar o efeito que o parâmetro da Potência causa em Ra. Fazendo uma comparação entre os pares de amostras (H1,H3) e (H2,H4) observa-se o efeito que o aumento de potência de 40W para 60W causa no valor de Ra para os filmes depositados por 5 e 10 minutos em substratos tratados com Hexano. Esse efeito é descrito na Figura 22.

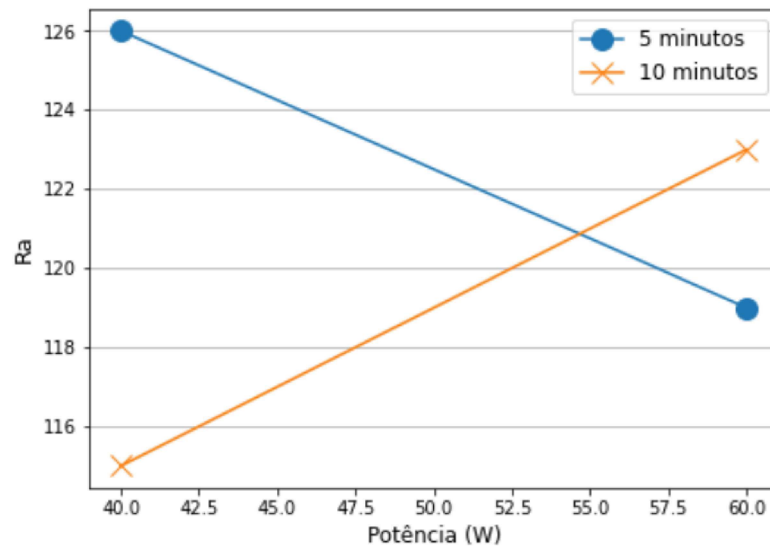


Figura 22: Efeito da potência na Rugosidade para filmes depositados por 5 e 10 minutos com substratos tratados com Hexano. Fonte: Próprio autor.

Pela análise da Figura 22, pôde-se concluir algumas características importantes para os filmes produzidos sobre substrato tratado com Hexano. Primeiro, o aumento da potência para os filmes depositados em 5 minutos provocou uma redução no valor de Ra de  $126\mu\text{m}$  para  $119\mu\text{m}$ . Segundo, o aumento da potência para os filmes depositados em 10 minutos causou um aumento de  $8\mu\text{m}$  no valor de Ra.

De maneira análoga a Figura 23 mostra uma comparação entre os pares de amostras (E1, E3) e (E2, E4). Observa-se então o efeito acarretado pelo aumento de potência de 40W para 60W em Ra para os filmes depositados por 5 e 10 minutos em substratos tratados com Eletropolimento.



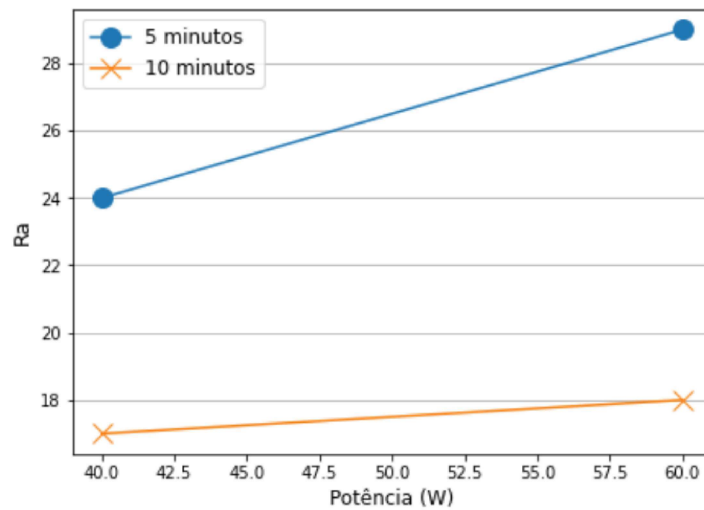


Figura 23: Efeito da potência na Rugosidade para filmes depositados por 5 e 10 minutos com substratos tratados com Eletropolimento. Fonte: Próprio autor.

Pela Figura 23, constata-se que houve um aumento de  $5\mu\text{m}$  no valor de Ra para os filmes depositados em 5 minutos. De maneira semelhante, houve um leve acréscimo de  $1\mu\text{m}$  no valor de Ra para os filmes depositados em 10 minutos. Analisando as Figuras 22 e 23 observa-se que o efeito da potência do equipamento de sputtering na rugosidade é complexo e depende uma série de fatores como o material e pressão da câmara. Sendo assim, outros estudos visando explicar esse mecanismo devem ser feitos no futuro ou por outros autores.

A outra análise importante é o efeito do tempo de deposição na rugosidade. Para tal foram selecionadas as amostras H3, H4, H5 e H6 referentes ao Hexano, e as amostras E3, E4, E5 e E6 referentes ao Eletropolimento. Os valores de Ra foram utilizados para construir a Figura 24.

Observa-se na Figura 24 que para os filmes produzidos em substratos tratados com Hexano houve um aumento no Ra com o aumento no tempo de deposição chegando a  $131\mu\text{m}$  em 20 minutos. Após esse tempo houve uma queda brusca no valor de Ra, sendo  $115\mu\text{m}$  o mínimo da série. Isso provavelmente se dá devido ao maior preenchimento de lacunas durante o processo de deposição dos átomos de Mo.

Para os filmes produzidos em substratos tratados com Eletropolimento, verifica-se que o menor tempo de deposição apresentou o maior valor de Ra para a série,  $29\mu\text{m}$ . Esse valor então decaiu para  $18\mu\text{m}$  em 10 minutos, voltou a aumentar para  $24\mu\text{m}$  em 20 minutos e chegou no valor mínimo de  $17\mu\text{m}$  em 30 minutos.

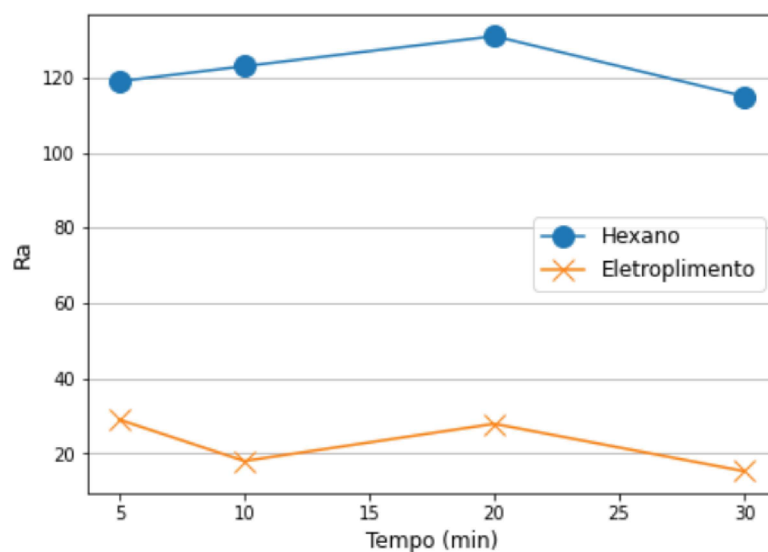


Figura 24: Efeito do tempo na Rugosidade para filmes depositados em 60W para substratos tratados com Eletropolimento e Hexano. Fonte: Próprio autor.

Se tratando do conjunto de dados original, a última análise importante é o estudo de correlação entre os parâmetros de deposição e a rugosidade. Dessa forma, foi construído na Figura 25 um diagrama com a configuração em *Heatmap* para relacionar as correlações calculadas.

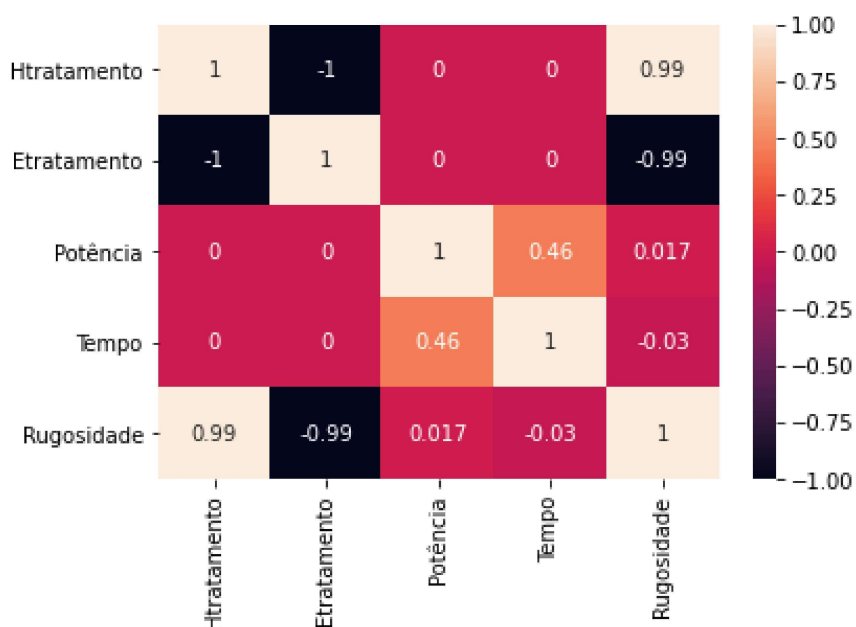


Figura 25: Heatmap da correlação entre os parâmetros de fabricação e a rugosidade. Fonte: Próprio autor.

Analisando a Figura 25 é possível constatar que existe uma grande correlação entre

os tratamentos superficiais no substrato e a rugosidade dos filmes. Para o tratamento com Hexano a correlação é positiva pois faz o valor de Ra aumentar, por outro lado, para o tratamento com Eletropolimento a correlação é negativa pois faz o valor de Ra diminuir. Observa-se também uma baixa correlação entre os parâmetros de deposição, tempo e potência, e a rugosidade, -0.03 e 0.017 respectivamente. Esses valores são justificados pela alta não-linearidade do modelo e podem ser comprovados ao analisar as Figuras 22, 23 e 24. A correlação entre os parâmetros de deposição não apresenta sentido físico ou estatístico, portanto não deve ser levado em consideração.

## 5.2 RNA e Regressão

Como já citado, a RNA necessita que os dados sobre as amostras estejam normalizados. Atualizando a Tabela 10 com valores normalizados de Ra mostrados na Tabela 11 chega-se à Tabela 13.

Tabela 13: Rugosidade média normalizada de cada amostra.

| <b>Amostras</b> | <b>Htratamento</b> | <b>Etratamento</b> | <b>Potência</b> | <b>Tempo de deposição</b> | <b>Rugosidade (Ra)</b> |
|-----------------|--------------------|--------------------|-----------------|---------------------------|------------------------|
| <b>H1</b>       | 1                  | 0                  | 0.6667          | 0.1667                    | <b>0.961832</b>        |
| <b>H2</b>       | 1                  | 0                  | 0.6667          | 0.3333                    | <b>0.877863</b>        |
| <b>H3</b>       | 1                  | 0                  | 1               | 0.1667                    | <b>0.908397</b>        |
| <b>H4</b>       | 1                  | 0                  | 1               | 0.3333                    | <b>0.938931</b>        |
| <b>H5</b>       | 1                  | 0                  | 1               | 0.6665                    | <b>1</b>               |
| <b>H6</b>       | 1                  | 0                  | 1               | 1                         | <b>0.877863</b>        |
| <b>E1</b>       | 0                  | 1                  | 0.6667          | 0.1667                    | <b>0.183206</b>        |
| <b>E2</b>       | 0                  | 1                  | 0.6667          | 0.3333                    | <b>0.129771</b>        |
| <b>E3</b>       | 0                  | 1                  | 1               | 0.1667                    | <b>0.221374</b>        |
| <b>E4</b>       | 0                  | 1                  | 1               | 0.3333                    | <b>0.129771</b>        |
| <b>E5</b>       | 0                  | 1                  | 1               | 0.6667                    | <b>0.212977</b>        |
| <b>E6</b>       | 0                  | 1                  | 1               | 1                         | <b>0.116794</b>        |

Fonte: Próprio Autor.

A divisão do conjunto de dados em conjunto de Treino e Conjunto de Testes foi feita no próprio Google Colaboratory™, onde as amostras H1, H3, H4, H6, E1, E2, E4 e E6 foram escolhidas para treino e as amostras H2, H5, E3 e E5 foram escolhidas para teste.

A rede foi treinada com o conjunto de treino em 25 iterações totalizando 12.377 segundos de processamento. Ao fim da primeira iteração o erro quadrático médio foi de 0.2586 e 0.2864 para os conjuntos de treino e teste respectivamente. Esses valores diminuíram até 0.0078 e 0.0017 ao fim da ultima iteração para os conjuntos de treino e teste respectivamente. O erro quadrático médio para todas as iterações da RNA está contida na Figura 26.

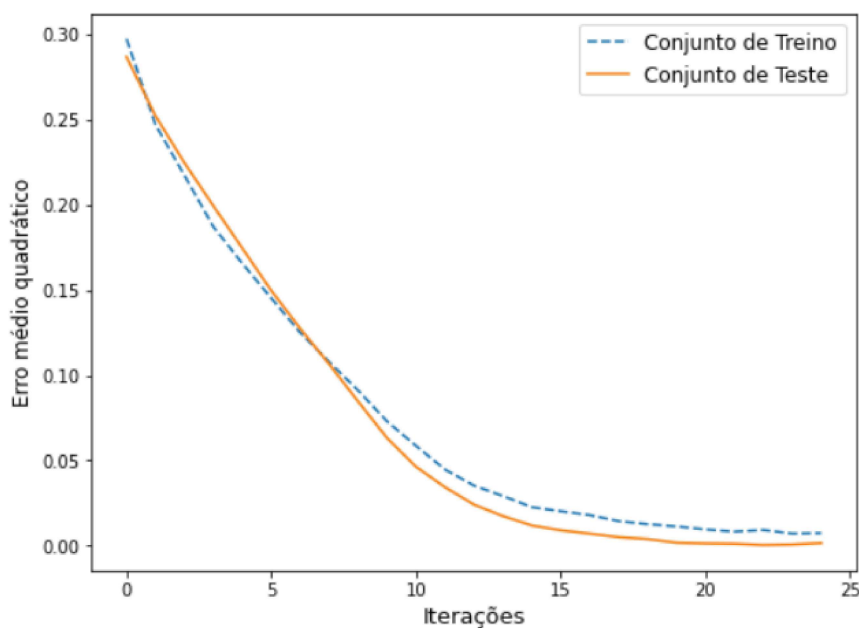


Figura 26: Erro quadrático médio para o conjunto de Treino e o conjunto de Teste. Fonte: Próprio autor.

Percebe-se pela Figura 26 que a diferença entre o erro quadrático médio para o conjunto de Treino e o conjunto de Teste não tende a zero, mas sim a um valor constante de 0.0061. Esse efeito é um dos indicativos de que não houve overfitting.

A fim da ultima iteração todos os pesos foram devidamente calculados e assim o modelo de regressão fica completo. Para a validação desse modelo foi usado o conjunto de testes, onde foi feito uma predição do valor de Ra a partir parâmetros de deposição para cada substrato (H2, H5, E3 e E5). Os resultados foram então plotados em um gráfico o qual relaciona o valor de Ra medido experimentalmente e predito pelo modelo. Esse gráfico está na Figura 27.

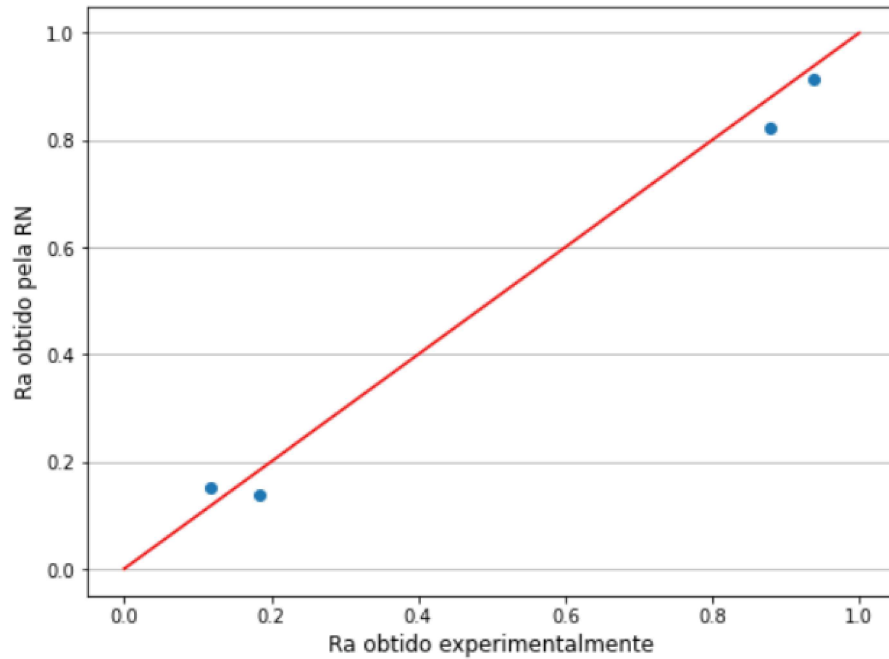


Figura 27: Comparação entre Ra medido experimentalmente e Ra predito pela RNA para o conjunto Teste. Fonte: Próprio autor.

Onde a linha vermelha é uma função linear ( $F(x) = x$ ) que representa o local onde a RNA consegue explicar perfeitamente os resultados experimentais. Observa-se que as quatro amostras usadas para teste estão muito próximas à linha vermelha, sendo assim, o modelo criado por este trabalho está explicando, com pequeno erro, os dados usados para teste.

Usar a métrica  $R^2$ , descrita na Equação 3.15, ajuda a quantificar a confiabilidade do modelo de regressão exposta na Figura 27. Importando a função `r2_score` da API `sklearn` e aplicando no modelo e no conjunto de testes foi encontrado o valor de 0.9876, isto é, **98.76%** do valor das amostras são explicados pelo modelo da RNA. Isso é um indicativo que o modelo pode estar prevendo valores com pequenos erros residuais.

Uma vez que o modelo é confiável, é permitido o seu uso para otimizar o processo de fabricação de filmes finos de Mo através da rugosidade média. Com o intuito de usar sempre a menor quantidade de energia possível na fabricação dos filmes, foi estipulado uma potência máxima de 60 W e um tempo de deposição máximo de 30 minutos. Por outro lado, o mínimo foi preterido para ambos até 0 W e 0 minutos. Sendo assim, a otimização da rugosidade feita para o processo de limpeza com Hexano está mostrado no gráfico de superfície 3-D contido na Figura 28.

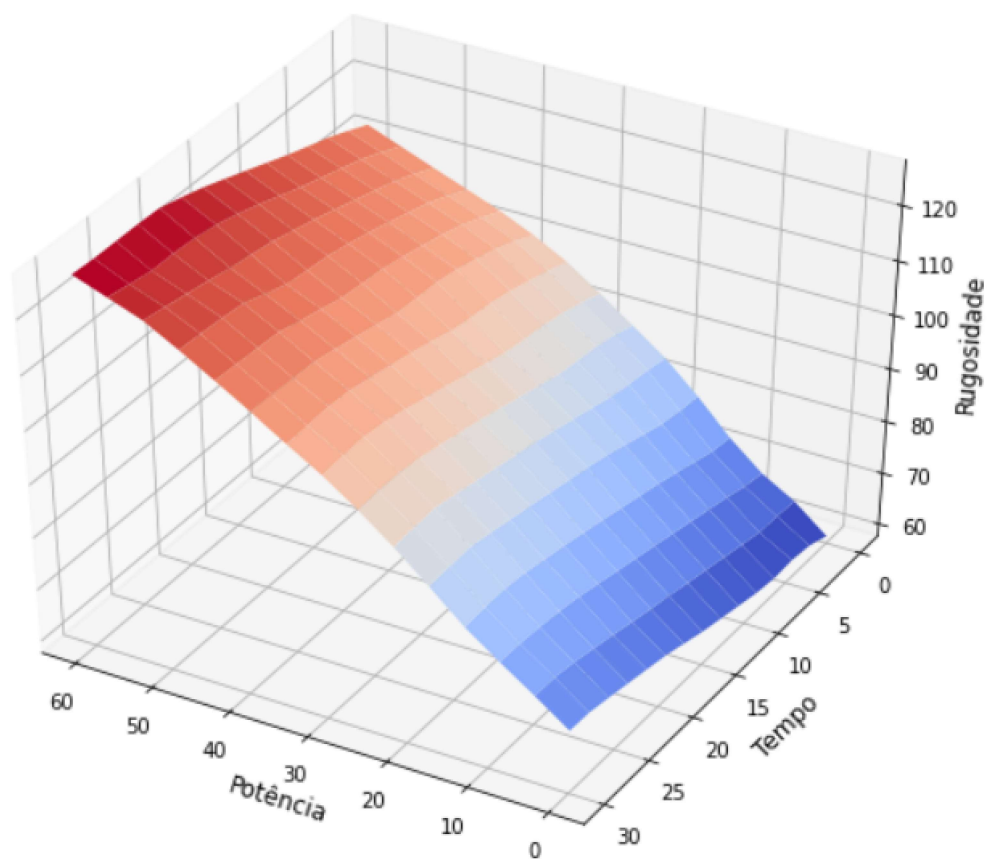


Figura 28: Superfície de otimização da Rugosidade para substratos tratados com Hexano. Fonte próprio autor.

Pela Figura 28 observa-se que a rugosidade é máxima (aproximadamente  $120\mu\text{m}$ ) no intervalo de tempo de 30 a 20 minutos e potência de 60 W. Também é possível notar que a potência faz mais efeito na rugosidade que o tempo de deposição.

De forma análoga, a otimização da rugosidade feita para o processo de Eletropolimento está mostrado no gráfico de superfície 3-D contido na Figura 29.

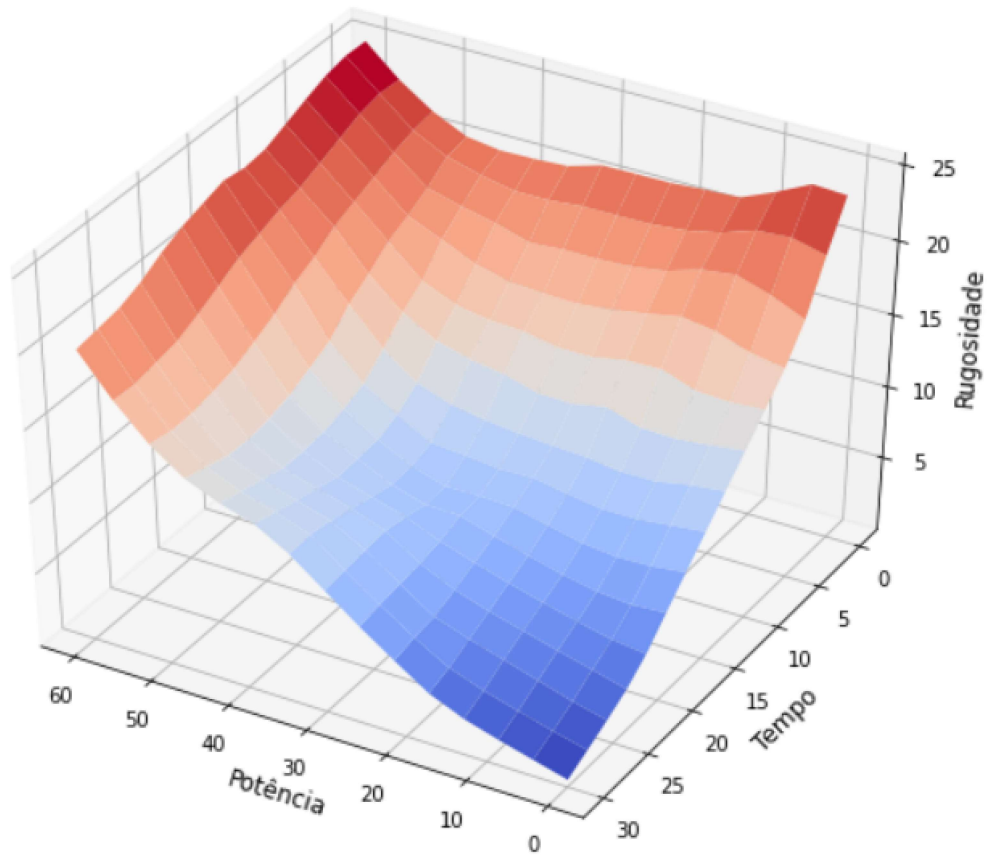


Figura 29: Superfície de otimização da Rugosidade para substratos tratados com eletropolidos. Fonte próprio autor.

Analisando a Figura 29 verifica-se um efeito diferente do mostrado na Figura 28. Primeiramente, existe mais de uma máxima local que pode ser encontrado para um pequeno tempo de deposição com a potência no valor máximo e mínimo (aproximadamente  $24\mu\text{m}$  e  $23$  respectivamente). Depois disso, observa-se que tanto o tempo de deposição quanto a potência têm forte influência na rugosidade.

Em ambas as Figuras 28 e 29 o aumento da potência aumentou a rugosidade. Isso pode ser explicado pelo fato de que quanto maior a potência maior a energia dos íons de Ar, conseqüentemente mais átomos do alvo serão ejetados em uma mesma direção induzindo a formação de picos e vales no filme.

## 6 Conclusões

### 6.1 Rugosidade dos Filmes

Todas as propriedades apresentaram forte influência na rugosidade dos filmes produzidos. O que mais modificou o valor de Ra foi o tipo de tratamento superficial, onde o Eletropolimento conseguiu reduzir em aproximadamente 83.3% a rugosidade quando comparado à limpeza com Hexano. O tempo de deposição e a potência também tiveram influência em menor intensidade, dessa forma, podem ser considerados como ajustes finos para a fabricação.

De maneira mais específica, o aumento da potência aumentou o valor de Ra para ambos os tratamentos. Isso possivelmente ocorreu pois quanto maior a potência, mais átomos do alvo serão ejetados em uma mesma direção induzindo a formação de picos e vales no filme.

Já para o caso do tempo de deposição, o efeito foi diferente para os tratamentos. Para o Eletropolimento, o aumento do tempo provocou redução na rugosidade, por outro lado, o aumento do tempo para substratos com limpeza com Hexano provocou um aumento na rugosidade.

### 6.2 Regressão e RNA

Sobre o algoritmo construído e a plataforma conclui-se que: O modelo de RNA desenvolvido pela API keras se mostrou de fácil construção e aplicação; O Google Colaboratory™ permitiu computação na nuvem e demonstrou ser uma plataforma para resolver o problema de maneira rápida. Finalmente, a linguagem de programação Python se mostrou como uma linguagem de fácil aprendizado e aplicável no campo da engenharia mecânica.

A RNA apresentou pequeno erro médio quadrático durante o treinamento. Ainda sobre a RNA, a menor complexidade da estrutura, o uso de menos iterações, juntamente



com o emprego de Dropout, são fortes indicativos que o modelo não está em overfitting.

O emprego de design de experimentos ajudou a rede aprender mesmo com um pequeno conjunto de dados, pois evitou o uso de valores aleatórios na entrada da RNA permitindo que a mesma aprendesse com mais eficiência.

Devido ao valor de  $R^2$ , a regressão produzida pela RNA se revelou como uma ferramenta bastante aplicável para a otimização de filmes finos de Mo fabricados por RF Magnetron Sputtering.

### 6.3 Limitações

Por mais que os resultados tenham se mostrado satisfatórios, houveram algumas limitação técnicas:

- O número de experimentos impossibilitou a análises de outros parâmetros de fabricação como: pressão da câmara, rotação do substrato, outros materiais para deposição. Além desses, um maior número de experimentos poderia abranger outros tempos de deposição, potências e tratamentos superficiais.
- Devido à pandemia de Covid-19 no ano de 2020 e 2021, não foi possível avaliar outras propriedades dos filmes finos produzidos.

### 6.4 Trabalhos futuros

Pelos motivos descritos, algumas lacunas não foram preenchidas neste trabalho, as quais podem ser estudadas em trabalhos futuros e/ou por outros pesquisadores interessados neste tema:

- Uso de outras técnicas de Machine Learning para formulação da regressão.
- Aplicar outros tipos e estruturas de Redes Neurais a fim de aprimorar o aprendizado.
- Avaliar outros materiais muito usados na fabricação de filmes finos como o Cromo (Cr), Cobre (Cu), Óxido de Cromo ( $Cr_2O_3$ ) e Óxido de Silício ( $SiO_2$ ).
- Avaliar e prever as demais propriedades morfológicas dos filmes produzidos, tais como o espessura e cristalografia.

- Fazer o uso do conceito teórico de eficiência de pulverização catódica na RNA.
- Avaliar e prever as propriedades ópticas dos filmes, bem como as propriedades térmicas, magnéticas e tribológicas.
- Aplicar as RNA à outros processos de fabricação de filmes finos: eletrodeposição, CVD, Deposição por feixe de íons e Ion Plating.

# Anexo

## A - Algoritmo de regressão por Rede Neural

---

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
#Bibliotecas usadas inicialmente para a análise e manipulação dos dados experimentais.

dados = pd.read_csv('sputtering_dados.csv')
dados
#Comando para leitura dos dados.
#O arquivo deve vir em formato .csv.
#Para ler qualquer outro arquivo o nome deve ser alterado aqui.

# # # # # # # # # # # # # # # Análise dos dados # # # # # # # # # # # # # # #

#Efeito da potência na Rugosidade para filmes depositados por 5 e 10 minutos
com substratos tratados com Eletropolimento.
fig = plt.figure(figsize=(7,5))
plt.plot([dados['Potência']][6],dados['Potência']][8],[dados['Rugosidade']][6],
dados['Rugosidade']][8],marker = "o",markersize = 12, label = "5 minutos")
plt.plot([dados['Potência']][7],dados['Potência']][9],[dados['Rugosidade']][7],
dados['Rugosidade']][9],marker = "x",markersize = 12, label = "10 minutos")
plt.xlabel('Potência (W)', fontsize=12)
plt.ylabel('Ra', fontsize=13)
plt.grid(axis='y')
plt.legend( fontsize=12)
plt.show()

```

---

---

---

```
#Efeito da potência na Rugosidade para filmes depositados por 5 e 10 minutos com  
substratos tratados com Hexano
```

```
. fig = plt.figure(figsize=(7,5))  
plt.plot([dados['Potência'][0],dados['Potência'][2]], [dados['Rugosidade'][0],  
dados['Rugosidade'][2]], marker = "o", markersize = 12, label = "5 minutos")  
plt.plot([dados['Potência'][1],dados['Potência'][3]], [dados['Rugosidade'][1],  
dados['Rugosidade'][3]], marker = "x", markersize = 12, label = "10 minutos")  
plt.xlabel('Potência (W)', fontsize=12)  
plt.ylabel('Ra', fontsize=13)  
plt.grid(axis='y')  
plt.legend(fontsize=12)  
plt.show()
```

```
# Avaliação do Tempo no valor de Ra.
```

```
fig = plt.figure(figsize=(7,5))  
plt.plot(dados['Tempo'][2:6], dados['Rugosidade'][2:6], marker = "o", markersize=12, label  
= "Hexano")  
plt.plot(dados['Tempo'][2:6], dados['Rugosidade'][8:12], marker="x", markersize=12, label  
= "Eletroplimento")  
plt.xlabel('Tempo (min)', fontsize=12)  
plt.ylabel('Ra', fontsize=13)  
plt.grid(axis='y')  
plt.legend( fontsize=12)  
plt.show()
```

```
# Parâmetro de saída para cada amostra.
```

```
fig = plt.figure(figsize=(7,5))  
plt.scatter(dados['codigo'][0:6], dados['Rugosidade'][0:6], linewidths=4, label = "Hexano")  
plt.scatter(dados['codigo'][6:12], dados['Rugosidade'][6:12], marker="x", label = "Eletro-  
polimento")  
plt.xlabel('Amostra', fontsize=12)  
plt.ylabel('Ra', fontsize=13)  
plt.grid(axis="y")  
plt.legend( fontsize=12)  
plt.show()
```

---

---

```

#Avaliação das variáveis qualitativas. fig = plt.figure(figsize=(8,6))
sns.barplot(dados['Tratamento'],dados['Rugosidade'])
plt.xlabel('Tratamento',fontsize=12)
plt.ylabel('Ra',fontsize=15)

corr_dados = dados[['Htratamento','Etratamento','Potência', 'Tempo', 'Rugosidade']]
# Esse comando cria um novo banco de dados apenas com as colunas que serão conside-
radas pela RNA.

#O Heatmap mostra didaticamente os efeitos de correlação.
sns.heatmap(corr_dados.corr(),annot=True)

# # # # # # # # # # # # # # Preparação para a Rede # # # # # # # # # # # # # #

from keras.models import Sequential
from keras.layers import Dense
from keras.layers import Dropout
from sklearn.utils import shuffle
# Comandos importados para construção da estrutura da RNA.

corr_dados = shuffle(corr_dados)
# Comando usado para randomizar o banco de dados.
print(corr_dados)

# Aqui deve ser colocado a porcentagem para a divisão do conjunto de dados em Treino
e Teste.
prc = int(input("Quantos % para o teste? "))

# Aqui é feita a divisão em dois novos conjuntos de Treino e Teste.
norm_factor = np.amax(corr_dados,axis = 0)
corr_dados = corr_dados/norm_factor
data_treino = (corr_dados[:((len(corr_dados)*(100-prc)//100))]) #Separa o treino do
teste
data_teste = corr_dados[((len(corr_dados)*(100-prc)//100):]
print(norm_factor)
print(corr_dados)

```

---

---

```

# Aqui é feita a separação dos parâmetros de entrada e saída nos conjuntos de Treino e
Teste .
treinoY = data_treino["Rugosidade"]
treinoX = data_treino.drop(columns= "Rugosidade")
testeY = data_teste["Rugosidade"]
testeX = data_teste.drop(columns= "Rugosidade")

# # # # # # # # # # # Estrutura da RNA # # # # # # # # # # # #

model = Sequential() #Definição do modelo da rede.

model.add(Dense(10, input_dim = 4, activation="relu")) #Definição dos neurônios de
entrada ( input_dim =4), dos neurônios da primeira camada escondida (10) e da função
de ativação.

model.add(Dense(10, activation="relu")) #Definição da próxima camada escondida.
model.add(Dense(15), activation="relu")) #Definição da próxima camada escondida.

model.add(Dropout(1)) #Definição da camada de saída com o Dropout. Caso não seja
necessário, trocar "model.add(Dropout(1))"por "model.add(Dense(1))".

# Aqui é feito a definição dos parâmetros da rede: Métrica avaliada, "loss"e "metrics";
Otimizador, "optimizer", Número de iterações, "epochs"; Tamanho do lote, "batch_size";
Separação para validação, "validation_split".
model.compile(loss = "mean_square_error", optimizer = "rmsprop", me-
trics=['accuracy']) history = model.fit(treinoX.to_numpy(), treinoY.to_numpy(),
validation_split=0.2, epochs=25, batch_size = 3)

#Aqui é plotado a curva do Erro quadrático médio para o conjunto de Treino e Teste.
fig = plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(history.history["loss"], linestyle = '-', label = "Conjunto de Treino")
plt.plot(history.history["val_loss"], label = "Conjunto de Teste")
plt.xlabel("Iterações",fontsize=13)
plt.ylabel("Erro médio quadrático", fontsize=12)
plt.legend(fontsize=12)

# # # # # # # # # # # Confiabilidade da Regressão # # # # # # # # # # # #

# Aqui é construído um gráfico de dispersão onde os dados de Teste reais são
comparados com os dados de Teste calculados pela RNA a partir das entradas.
fig = plt.figure(figsize=(8,6))
teste_predict = model.predict(testeX)
# Aqui é usado o modelo para prever os dados de Teste.
plt.scatter(testeY,teste_predict)
plt.plot([0,1],[0,1], 'r')
# Cria a reta  $f(x) = x$ .
plt.xlabel('Ra obtido experimentalmente',fontsize=12)
plt.ylabel('Ra obtido pela RN',fontsize=12)
plt.grid(axis="y")

```

---

---

```

from sklearn.metrics import r2_score
#Aqui é importado o comando r2_score da biblioteca sklearn.metrics

r2_score(testeY,teste_predict)

# # # # # # # # # # # # Otimização # # # # # # # # # # # #

# Aqui é criado a malha onde o modelo é aplicado .
Xpotmalha = np.linspace(0,1,num=15)
Ytempmalha = np.linspace(0,1,num=15)
Xpotmalha,Ytempmalha = np.meshgrid(Xpotmalha,Ytempmalha)
Zmalha = [ ]
for i in range(15):
    ///aux = [ ]
    ///for j in range(15):
    /////predict_aux = model.predict(np.array([[1,0,Xpotmalha[i][j],Ytempmalha[i][j]]]))
    # Aqui é setado todos os parâmetros de entrada para ser aplicado ao modelo.
    /////aux.append(predict_aux[0][0])
    Zmalha.append(aux)

# Aqui é separado o em uma variável os valores previstos na malha.
var_qualquer = np.array(Zmalha)
var_qualquer = var_qualquer*norm_factor["Rugosidade"]
print(var_qualquer)

from matplotlib import cm
# Aqui é importado o comando cm.

# Aqui é plotado a superfície de otimização.
fig, ax = plt.subplots(subplot_kw="projection": "3d
)
ax.plot_surface(Xpotmalha*norm_factor["Potência"],Ytempmalha*norm_factor
Tempo
,np.array(Zmalha)*norm_factor["Rugosidade"],cmap = cm.coolwarm)
fig.set_figheight(8)
fig.set_figwidth(10)
ax.set_xlabel('Potência', fontsize=12)
ax.set_ylabel('Tempo', fontsize=12)
ax.set_zlabel('Rugosidade', fontsize=12)
ax.view_init(40,120)
plt.show()

```

---

---

```
##### Predição #####
```

```
#Aqui devem ser escolhidos os parâmetros para predição.
```

```
pot_predito = 1  
tempo_predito = 0.333  
Htrat_predito = 0  
Etrat_predito = 1
```

```
#Aqui novas variáveis de saída são criadas a partir dos parâmetros escolhidos para entrada.
```

```
Xnew = np.array([[Htrat_predito,Etrat_predito,pot_predito,tempo_predito]])  
ynew = model.predict(Xnew)  
print("X=%s, Predicted=%s"% (Xnew[0], ynew[0]))
```

---



## 8 REFERÊNCIAS

- ABEGUNDE, O.; AKINLABI, E. ; OLADIJO, P. Developing an empirical relationship for optimizing surface roughness of tic thin film grown by magnetron sputtering using taguchi analysis. **Materials Today: Proceedings**, v. 26, p. 3282–3287, 2020.
- ADÈS, H. **A Traveller’s History of Egypt**. Primeira edição. ed. [S.l.]: Interlink Books, 2006. 1-452 p. ISBN 978-1566566544.
- AGGARWAL, C. C. **Neural Networks and Deep Learning-A Textbook**. [S.l.]: Springer, 2018. 1-512 p. ISBN 978-3-319-94462-3.
- ALBUQUERQUE, D. G. D.; VIEIRA, L. D. Q. **Classificação de Malware Utilizando Análise e Redes Neurais Recorrentes**. [S.l.]: Instituto Militar de Engenharia, Trabalho de conclusão de Curso em Engenharia da Computação, 2019. 1-59 p.
- ANCHAN, B.; HEGDE, S.; DE, S. ; PATIL, A. Metal oxide thin film for chemiresistive biosensing applications. **Materials Today: Proceedings**, v. 27, p. 440–442, 2020.
- ANTONY, J. **Design of Experiments for Engineers and Scientists**. Second Edition. ed. Oxford: Elsevier, 2014. 1-208 p. ISBN 978-0-08-099417-8.
- APICELLA, A.; DONNARUMMA, F.; ISGRÒ, F. ; PREVETE, R. A survey on modern trainable activation functions. **Neural Networks**, v. 138, p. 14–32, 2021.
- BEHERA, A.; MALLICK, P. ; MOHAPATRA, S. **Corrosion Protection at the Nanoscale**. [S.l.]: Elsevier, 2020. 227-243 p. ISBN 978-0-12-819359-4.
- BERK, R. A. **Statistical Learning from a Regression Perspective**. [S.l.]: Springer, 2016. 1-347 p. ISBN 978-3-319-82969-2.
- BINU, D.; RAJAKUMAR, B. **Artificial Intelligence in Data Mining**. [S.l.]: Academic Press, 2021. 1-257 p. ISBN 978-0-12-820601-0.
- BITTENCOURT, J. A. **Fundamentals of Plasma Physics**. [S.l.]: Springer, New York, NY, 2004. 679 p. ISBN 978-1-4757-4030-1.
- BONNET, S. M. **The mirror - A History**. Quinta edição. ed. New York, NY, EUA: Routledge, 2014. 1-320 p.

- BRAGA, A. V. C.; DO LAGO, D. C. B.; PIMENTA, A. R. ; DE SENNA, L. F. The influence of heat treatment of inorganic conversion coatings produced by sol-gel dip coating on the anticorrosive properties of alumina films deposited on steel substrate - part ii: silica/boehmite or boehmite/silica multilayered conversion coatings. **Surface and Coatings Technology**, v. 386, p. 125500, 2020.
- BRUCE, A.; BRUCE, P. **Estatística prática**. Primeira edição. ed. [S.l.]: Alta Books, 2019. 1-392 p. ISBN 978-8550806037.
- BRÄUER, G.; SZYSZKA, B.; VERGÖHL, M. ; BANDORF, R. Magnetron sputtering – milestones of 30 years. **Vacuum**, v. 84, n. 12, p. 1354–1359, 2010.
- BUDUMA, N. **Fundamentals of Deep Learning**. [S.l.]: O’Reilly Media, Inc., 2017. 1-285 p. ISBN 9781491925614.
- BUNSHAH, R. F.; MATTOX, D. M. Applications of metallurgical coatings. **Physics Today**, v. 33, p. 1–50, 1980.
- CHAPMAN, B.; ANDERSON, J. **Science and technology of surface coating**. London: Academic Press, 1974. 1-463 p.
- CHERKASHINA, N.; PAVLENKO, V.; ZAITSEV, S. ; PROKHORENKOV, D. Effect of photon annealing and cryogenic temperature on the microstructure, optical and electrophysical properties of mo thin films. **Surface and Coatings Technology**, v. 380, p. 125088, 2019.
- CLARK, A. **Handbook of Perception and Cognition-Artificial Intelligence**. San Diego: Academic Press, 1996. 1-22 p. ISBN 978-0-12-161964-0.
- CLARK, P. J. Sputtering apparatus. **Google Patents**, v. US3616450A, p. 1–6, 1971. Acesso em: <https://patents.google.com/patent/US3616450A/en>.
- DA SILVA NETO, J. F. **Desenvolvimento de Superfícies Seletivas e para coletores solares com Deposição em Multicamadas de Cr SiO<sub>2</sub>**. [S.l.: s.n.], 2017. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica p.
- DUGAS, C.; BENGIO, Y.; BÉLISLE, F.; NADEAU, C. ; GARCIA, R. Incorporating second-order functional knowledge for better option pricing. **Advances in Neural Information Processing Systems**, v. 13, p. 1–7, 2001.

- FU, Y.; WANG, S.; WANG, C.-X.; HONG, X. ; MCLAUGHLIN, S. Artificial intelligence to manage network traffic of 5g wireless networks. **IEEE Network**, v. 32, n. 6, p. 58–64, 2018.
- GAD, A. F.; JARMOUNI, F. E. **Introduction to Deep Learning and Neural Networks with Python**. [S.l.]: Academic Press, 2021. 1-285 p. ISBN 978-0-323-90933-4.
- GOPHER, A.; TSUK, T.; SHALEV, S. ; GOPHNA, R. Earliest gold artifacts in the levant. **Current Anthropology - CURR ANTHROPOL**, v. 31, p. 436–443, 1990.
- GREENE, J. E. Tracing the 5000-year recorded history of inorganic thin films from 3000 bc to the early 1900s ad. **Applied Physics Reviews**, v. 1, n. 4, p. 041302, 2014.
- GREENE, J. E. Review article: Tracing the recorded history of thin-film sputter deposition: From the 1800s to 2017. **Journal of Vacuum Science Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films**, v. 35, p. 05C204, 2017.
- GUDMUNDSSON, J. T. Physics and technology of magnetron sputtering discharges. **Plasma Sources Science and Technology**, v. 29, n. 01, p. 1130, 2020.
- GUDMUNDSSON, J. T.; LUNDIN, D. **Introduction to magnetron sputtering, High Power Impulse Magnetron Sputtering**. [S.l.]: Elsevier, 2020. 1-48 p. ISBN 978-0-12-812454-3.
- GUPTA, N.; KHOSRAVY, M.; PATEL, N.; GUPTA, S. ; VARSHNEY, G. Evolutionary artificial neural networks: Comparative study on state-of-the-art optimizers. **Springer Tracts in Nature-Inspired Computing Frontier Applications of Nature Inspired Computation**, v. 15, p. 302–318, 2020.
- HAMMERSCHMIDT, C. R. Mercury and carbon dioxide emissions: Uncoupling a toxic relationship. **Environmental Toxicology and Chemistry**, v. 30, n. 12, p. 2640–2646, 2011.
- HAYKIN, S. **Neural Networks and Deep Learning-A Textbook**. [S.l.]: ArtMed, 2001. 1-512 p. ISBN 0-13-273350-1.
- HERRERA, L.; DURAN, A.; FRANQUELO, M.; JUSTO, A. ; PEREZ-RODRIGUEZ, J. Hg/sn amalgam degradation of ancient glass mirrors. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 355, n. 37, p. 1980–1983, 2009.

- HOFFMAN, D. M.; SINGH, B.; THOMAS, J. H. ; THOMAS, J. H. **Handbook of Vacuum Science and Technology**. San Diego: Academic Press, 1998. 3-835 p.
- JAIN, V.; PATEL, S.; PATEL, P.; PATEL, K. ; SHAH, D. Study of molybdenum trioxide thin film deposited using dip coating method. **Materials Today: Proceedings**, v. 42, p. 1700–1703, 2021.
- KHUMTONG, T.; SAKULKALAVEK, A. ; SAKDANUPHAB, R. Empirical modelling and optimization of pre-heat temperature and ar flow rate using response surface methodology for stoichiometric sb<sub>2</sub>te<sub>3</sub> thin films prepared by rf magnetron sputtering. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 715, p. 65–72, 2017.
- KO, Y.-D.; MOON, P.; KIM, C. E.; HAM, M.-H.; MYOUNG, J.-M. ; YUN, I. Modeling and optimization of the growth rate for zno thin films using neural networks and genetic algorithms. **Expert Systems with Applications**, v. 36, n. 2, p. 4061–4066, 2009.
- KOZELSKAYA, A.; KULKOVA, S.; FEDOTKIN, A.; BOLBASOV, E.; ZHUKOV, Y.; STIPNIECE, L.; BAKULIN, A.; USEINOV, A.; SHESTERIKOV, E.; LOCS, J. ; TVERDOKHLEBOV, S. Radio frequency magnetron sputtering of sr- and mg-substituted -tricalcium phosphate: Analysis of the physicochemical properties and deposition rate of coatings. **Applied Surface Science**, v. 509, p. 144763, 2020.
- LAUGHLIN, D. E.; HONO, K. **Physical Metallurgy**. Quinta edição. ed. Oxford: Elsevier, 2015. 1-2899 p. ISBN 978-0-444-53770-6.
- LIN, C.-C.; HU, C.-C. Electropolishing of 304 stainless steel: Surface roughness control using experimental design strategies and a summarized electropolishing model. **Electrochimica Acta**, v. 53, n. 8, p. 3356–3363, 2008.
- LIU, W.; WANG, H. Flexible oxide epitaxial thin films for wearable electronics: Fabrication, physical properties, and applications. **Journal of Materionics**, v. 6, n. 2, p. 385–396, 2020.
- LOSHIN, D. **Big Data Analytics**. Boston: Morgan Kaufmann, 2013. 1-120 p. ISBN 978-0-12-417319-4.
- MACLEOD, H. A. **Thin-Film Optical Filters**. Boca Raton: [s.n.], 2017. 1-696 p. ISBN 9781315270494.

- MARTIN, P. M. **Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings**. Terceira edição. ed. [S.l.]: William Andrew Publishing, 2010. 1-885 p. ISBN 978-0-8155-2031-3.
- MATTOX, D. M. **Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing**. Segunda edição. ed. Boston: William Andrew Publishing, 2010. 157-193 p. ISBN 978-0-8155-2037-5.
- MATTOX, D. M. **The Foundations of Vacuum Coating Technology**. Segunda Edição. ed. [S.l.]: William Andrew Publishing, 2018. 1-361 p.
- MONTGOMERY, D. C.; PECK, E. A. ; VINING, G. G. **Introduction to Linear Regression Analysis**. Hoboken, New Jersey: John Wiley Sons,, 2012. 1-679 p. ISBN 978-0-470-54281-1.
- MUSIL, J.; BAROCH, P.; VLČEK, J.; NAM, K. ; HAN, J. Reactive magnetron sputtering of thin films: present status and trends. **Thin Solid Films**, v. 475, n. 1, p. 208–218, 2005.
- MUTHUKRISHNAN, N.; MALEKI, F.; OVENS, K.; REINHOLD, C.; FORGHANI, B. ; FORGHANI, R. Brief history of artificial intelligence. **Neuroimaging Clinics of North America**, v. 30, n. 4, p. 393–399, 2020.
- MUTZKE, A.; ECKSTEIN, W. Ion fluence dependence of the si sputtering yield by noble gas ion bombardment. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, v. 266, n. 6, p. 872–876, 2008.
- NASIRPOURI, F. **Electrodeposition of Nanostructured Materials**. Primeira Edição. ed. Boston: Springer, 2017. 1-325 p. ISBN 978-3-319-44920-3.
- NOTTON, J. H. F. Ancient egyptian gold refining - a reproduction of early techniques. **Gold Bulletin**, v. 7, p. 50–56, 1974.
- OLIVEIRA, R.; PISSETTI, F. ; LUCHO, M. Fto modified electrodes by direct gold electrodeposition: production, characterization and electrochemical sensor application. **Química Nova**, v. 39, p. 1–6, 2016.
- OROTHY M. HOFFMAN; SINGH, B.; THOMAS, J. H. ; THOMAS, J. H. **Handbook of Vacuum Science and Technology**. San Diego: Academic Press, 1998. 3-835 p.

- PENNING, F. M. Coating by cathode disintegration. **Google Patents**, v. US2146025A, p. 1–6, 1936. Acesso em: <http://www.google.it/patents/US2146025A>.
- PIEGARI, A.; FLORY, F. **Optical Thin Films and Coatings (Second Edition)**. Segunda Edição. ed. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2018. 1-832 p. ISBN 978-0-08-102073-9.
- QIAN, S.; LIU, H.; LIU, C.; WU, S. ; WONG, H. S. Adaptive activation functions in convolutional neural networks. **Neurocomputing**, v. 272, p. 204–212, 2018.
- QUINTINO, L. **Surface Modification by Solid State Processing**. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2014. 1-183 p. ISBN 978-0-85709-468-1.
- ROBBIE, K.; SIT, J. C. ; BRETT, M. J. Advanced techniques for glancing angle deposition. **Journal of Vacuum Science Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena**, v. 16, p. 1115, 1998.
- SAGARA, R.; KAWAMURA, M.; KIBA, T.; ABE, Y. ; KIM, K. H. Characteristics of ag thin films sputter deposited using ar or kr gas under different pressure. **Surface and Coatings Technology**, v. 388, p. 125616, 2020.
- SANTOS, C. **Estatística Descritiva – Manual de auto-aprendizagem**. [S.l.]: Sibalo, 2018. 1-330 p. ISBN 978-972-618-968-8.
- SCARDAPANE, S.; VAN VAERENBERGH, S.; TOTARO, S. ; UNCINI, A. Kf-nets: Kernel-based non-parametric activation functions for neural networks. **Neural Networks**, v. 110, p. 19–32, 2019.
- SEAH, M. P.; CLIFFORD, C. A.; GREEN, F. M. ; GILMORE, I. S. An accurate semi-empirical equation for sputtering yields i: for argon ions. **Surface and Interface Analysis**, v. 37, n. 5, p. 444–458, 2005.
- SIMON, A. H. **Handbook of Thin Film Deposition**. [S.l.]: William Andrew Publishing, 2018. 195-230 p.
- SMITH, G. **Essential Statistics, Regression, and Econometrics**). Segunda edição. ed. Boston: Academic Press, 2015. 1-386 p. ISBN 978-0-12-803459-0.
- SMITH, G.; DE O. BUSSAB, W. **Estatística básica**. Nona edição. ed. [S.l.]: Saraiva uni, 2017. 1-554 p. ISBN 978-85-472-2022-8.

- STULP, F.; SIGAUD, O. Many regression algorithms, one unified model: A review. **Neural Networks**, v. 69, p. 60–79, 2015.
- TAN, Z.; HU, Y. ; CHEN, K. On the investigation of activation functions in gradient neural network for online solving linear matrix equation. **Neurocomputing**, v. 413, p. 185–192, 2020.
- THEODORIDIS, S. **Machine Learning - A Bayesian and Optimization Perspective**. Oxford: Academic Press, 2015. 1-1050 p. ISBN 978-0-12-801522-3.
- THORNTON, J. A. Advanced techniques for glancing angle deposition. **Journal of Vacuum Science and Technology**, v. 15, p. 171, 1978.
- VIEIRA, S.; PINAYA, W. H. L. ; MECHELLI, A. **Machine Learnin - Methods and Applications to Brain Disorders**. [S.l.]: Academic Press, 2020. 1-393 p. ISBN 978-0-12-815739-8.
- WANG, L.; LEE, T. J.; BAVENDIEK, J. ; ECKSTEIN, L. A data-driven approach towards the full anthropometric measurements prediction via generalized regression neural networks. **Applied Soft Computing**, v. 109, p. 107551, 2021.
- WANG, Y.; ZUO, J.; WU, K.; ZHANG, J.; LIU, G. ; SUN, J. Size effect on mechanical properties and deformation mechanisms of highly textured nanocrystalline mo thin films. **Materials Science and Engineering: A**, v. 816, p. 141323, 2021.
- WASA, K.; KITABATAKE., M. **Thin Films Material Technology, Sputtering of Compound Materials**. Norwich, NY, USA: [s.n.], 2004. 1-518 p.
- WEEKS, M. E. The discovery of the elements. ii. elements known to the ancient world. **Journal of Chemical Education.**, v. 2, p. 1–11, 1932.
- WEEKS, M. E.; LEICHESTER, H. M. Discovery of the elements- elements known to the ancients. **Journal of Chemical Education.**, v. 7, p. 29–40, 1968.
- XIE, F.; LI, R.; ZHANG, X.; WANG, Y. ; FAN, C. In situ growth of biocl thin film on bi plate for photocatalytic application. **Materials Letters**, v. 260, p. 126937, 2020.
- YAMAUTI, M. M. **Regressão linear simples nos livros de Estatística para cursos de administração: um estudo didático**. [S.l.]: Pontifícia Universidade Católica de São Paulo, Mestrado em educação matemática, 2013. 1-146 p.

ZHANG, C.; LU, Y. Study on artificial intelligence: The state of the art and future prospects. **Journal of Industrial Information Integration**, v. 23, p. 100224, 2021.

ZHANG, M.; RAO, Z.; KIM, K.-S.; QI, Y.; FANG, L.; SUN, K. ; CHASON, E. Molecular dynamics simulation of stress induced by energetic particle bombardment in mo thin films. **Materialia**, v. 16, p. 101043, 2021.