



# REVISTA MILITAR de CIÊNCIA e TECNOLOGIA

Versão impressa: ISSN 0102-3543

Volume XL - 4º Trimestre de 2023

## ENGENHARIA MILITAR

**Mobilidade,  
Contramobilidade e  
Proteção**

Avaliação de ligas de aço microligado de baixo C e alta resistência mecânica, submetidas ao processo de Têmpera e Partição - Pág 4

Detecção de Novidades em Famílias de Malware - Pág 16

Análise e caracterização de superfícies de titânio em diferentes etapas do processo de silanização - Pág 27

Fabricação de superfícies via manufatura aditiva – deposição por energia direcionada (MA-DED) com pó de aço ferramenta H13 atomizado no Brasil - Pág 38

Identificação e classificação de patologias em rodovias a partir de um sistema integrado com rede neural convolucional - Pág 47

Uma metodologia estatística para redução do desgaste em trilhos ferroviários e sua comparação com o desgaste real - Pág 60





REVISTA MILITAR DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Comandante do Exército:

Gen Ex Tomás Miguel Ribeiro Paiva

Departamento de Ciência e Tecnologia:

Gen Ex Achilles Furlan Neto

Departamento de Educação e Cultura do Exército:

Gen Ex Francisco Carlos Machado Silva

Comandante do Instituto Militar de Engenharia:

Gen Div Juraci Ferreira Galdino

Diretor da BIBLIEx:

Cel Art Marcos Walfrido Ricarte Figueiredo

CORPO REDATORIAL:

Editor-chefe:

Prof. Dr. Fernando Manuel Araújo Moreira

Editor-chefe adjunto:

Prof. Dr. Álvaro José Boareto Mendes

Editores adjuntos:

Prof. Dr. Marcelo de Miranda Reis

Prof. Dr. Paulo Henrique Coelho Maranhão

Editores de área:

Engenharia Civil, Transportes e Ciências Ambientais: Prof. Dr. Filipe Almeida Corrêa do Nascimento • Engenharia Elétrica e áreas afins: Prof. Dr. Antônio Eduardo Carrilho da Cunha • Engenharia Mecânica e áreas afins: Prof. Dr. André Luiz Tenório Rezende • Engenharia Química e áreas afins: Prof. Dr. Julio Zukerman Schpector • Engenharia Cartográfica: Prof. Dr. Wagner Braga Nunes Coelho • Engenharia Nuclear: Prof. Dra. Inaya Correa Barbosa Lima • Ciência e Engenharia de Materiais: Prof. Dr. André Ben-Hur da Silva Figueiredo • Ciência e Engenharia da Computação: Prof. Dr. Paulo Cesar Salgado Vidal • Engenharia de Defesa: Prof. Dr. Giuseppe Miceli Junior • Outras áreas: Prof. Dr. Marcelo de Miranda Reis

Editores associados externos:

• Dr. André Fenili – Universidade Federal do ABC, Santo André, SP • Dr. Fernando Fachini Filho – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, SP • Dr. José Carlos Costa da Silva Pinto – Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ • Dr. José Carlos Maldonado – Universidade de São Paulo, São Carlos, SP • Dr. Júlia Célia Mercedes Strauch – Escola Nacional de Ciências Estatísticas, RJ • Dr. Luiz Pereira Calôba – Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ • Dr. Otto Corrêa Rotunno Filho – COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ • Dr. Richard Magdalena Stephan – COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ • Dr. Webe João Mansur – COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ • Dr. Carlos Alberto Nunes Consenza – COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ

DIREÇÃO, IMPRESSÃO E DISTRIBUIÇÃO:

Diretor:

Cel Art Marcos Walfrido Ricarte Figueiredo

Editor executivo:

Cap R1 Antônio Carlos Manhães de Souza

ADMINISTRAÇÃO, REVISÃO, PROGRAMAÇÃO E DIAGRAMAÇÃO:

Coordenação: INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA – IME

Redação, Diagramação e OJS:

Rubenildo Python de Barros

Marcela Fagundes Casotti

Luiz Tadeu Carqueija Mota

Revisão Tikinet:

Revisores: Cristina Saez; Guilherme Oliveira; Picro Kanaan • Diagramador: Ilário Junior

Impressão e distribuição:

BIBLIEx



Desde 1949

"A Gráfica do Exército" - Compromisso com a Qualidade

Impresso na Gráfica do Exército

Al. Mal. Rondon - Setor de Garagens - QGEX - SMU - CEP:70630-901 - Brasília - DF

Tel: 3415-4367 - Site: <http://www.graficadoexercito.eb.mil.br>

E-mail: [divcmcl@graficadoexercito.eb.mil.br](mailto:divcmcl@graficadoexercito.eb.mil.br)

PUBLICAÇÃO TRIMESTRAL



REVISTA MILITAR de  
CIÊNCIA e TECNOLOGIA

REVISTA MILITAR DE CIÊNCIA E  
TECNOLOGIA - Volume XL  
4º Trimestre de 2023

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA - IME

Praça General Tibúrcio, 80 - Praia Vermelha -

Rio de Janeiro-RJ - CEP 22.290-270 -

Tel.: (21) 2546-7115

Website: <https://ebrevistas.eb.mil.br/CT> - Email:

[rmct@ime.eb.br](mailto:rmct@ime.eb.br)

BIBLIOTECA DO EXÉRCITO

EDITORA (BIBLIEx)

Palácio Duque de Caxias - Praça D. de Caxias, 25

3º andar - Ala Marcílio Dias

Centro - Rio de Janeiro-RJ

CEP 20.221-260

Tel.: (21) 2519-5707

ACESSE NOSSA REVISTA DIGITAL



Nossa capa:

Homenagem ao Quadro de Engenheiros Militares





A convergência entre materiais avançados, processos de fabricação e técnicas de inteligência artificial está redesenhando a engenharia e a infraestrutura modernas. As seis linhas de investigação apresentadas aqui — desde ligas microligadas e tratamentos térmicos até detecção de malware e análise de patologias rodoviárias — mostram não apenas avanços isolados, mas um panorama integrado onde ciência dos materiais, manufatura aditiva e métodos estatísticos alimentados por redes neurais se complementam para oferecer maior desempenho, segurança e sustentabilidade.

A combinação de desenvolvimento de ligas e caracterização superficial é central para aplicações estruturais e biomédicas. Estudos sobre ligas de aço microligado de baixo carbono submetidas ao processo de Têmpera e Partição revelam oportunidades para aumentar a tenacidade e a resistência mecânica sem sacrificar a ductilidade, otimizando microestruturas por meio de controle térmico. Em paralelo, a análise de superfícies de titânio durante a silanização demonstra como tratamentos de superfície dirigidos podem modular adesão, biocompatibilidade e resistência à corrosão, essenciais para implantes e componentes aeroespaciais. A interação entre microestrutura do núcleo (ligas tratadas termicamente) e química superficial (silanização) define o comportamento funcional final das peças, sugerindo que projetos integrados de material e superfície tragam ganhos exponenciais em desempenho. A introdução da manufatura aditiva por deposição com energia direcionada (MA-DED) usando pó de aço ferramenta H13 atomizado no Brasil representa um salto estratégico: redução de lead time, maior complexidade geométrica e possibilidade de reparos localizados. Porém, a transição bem-sucedida exige atenção à qualidade do pó, controle de densificação, propriedades anisotrópicas e integração com tratamentos posteriores como têmpera e partição. O desenvolvimento de uma cadeia de suprimento nacional para pós atomizados fortalece a autonomia tecnológica e reduz custos logísticos, mas deve caminhar junto a protocolos rigorosos de caracterização (microestrutura, dureza, propriedades mecânicas) e a avaliações de compatibilidade entre processos aditivos e tratamentos térmicos subsequentes. O uso de redes neurais convolucionais para identificação e classificação de patologias em rodovias e a detecção de novidades em famílias de malware ilustram duas frentes onde aprendizado de máquina transforma prevenção e resposta. Em rodovias, modelos convolucionais integrados a sistemas embarcados e imagens de alta resolução permitem priorizar intervenções com base em risco, custo e impacto social, enquanto metodologias estatísticas para redução do desgaste em trilhos ferroviários, quando comparadas com o desgaste real, fornecem um ciclo de feedback que otimiza manutenção preditiva. Na cibersegurança, detectar variações emergentes em famílias de malware requer pipelines que combinem análise comportamental, assinatura dinâmica e algoritmos de detecção de anomalias, promovendo respostas mais rápidas e resilientes. A interseção entre ciência dos materiais, manufatura aditiva e inteligência artificial fornece uma plataforma poderosa para repensar como projetamos, produzimos e mantemos estruturas e sistemas. Priorizar integração entre processos experimentais, cadeia de suprimentos local e modelos inteligentes não é apenas uma estratégia de eficiência: é um imperativo para garantir segurança, longevidade e autonomia tecnológica diante dos desafios industriais e digitais do século XXI.

Em conclusão, a interseção entre ciência dos materiais, manufatura aditiva e inteligência artificial fornece uma plataforma poderosa para repensar como projetamos, produzimos e mantemos estruturas e sistemas. Priorizar integração entre processos experimentais, cadeia de suprimentos local e modelos inteligentes não é apenas uma estratégia de eficiência: é um imperativo para garantir segurança, longevidade e autonomia tecnológica diante dos desafios industriais e digitais do século XXI. É nesse contexto que se encontra o Instituto Militar de Engenharia, uma Universidade corporativa fundada em 1792 que tem como objetivo primordial atender às necessidades do

Exército Brasileiro principalmente através do aumento do seu poder de combate. Isso, sem deixar de lado aplicações duais que possam vir a contribuir o máximo possível com a sociedade civil. Nesse contexto, aparece como primordial na área de ciência e tecnologia militar o papel a ser desempenhado pela Revista Militar de Ciência e Tecnologia (RMCT, publicação *Open Access*) uma das publicações regulares do Exército Brasileiro.

Excelente leitura a todos!

**Dr. Eng. Fernando M. Araujo-Moreira**  
**Editor-chefe da RMCT**

---

# SUMÁRIO

---

- 4** Avaliação de ligas de aço microligado de baixo C e alta resistência mecânica, submetidas ao processo de Têmpera e Partição  
Flávia Tolomelli, Andersan dos Santos Paula, Fernando Cosme Rizzo Assunção
- 16** Detecção de Novidades em Famílias de Malware  
Ricardo Sant’Ana, Julio Cesar Cardoso Tesolin, Julio Cesar Duarte
- 27** Análise e caracterização de superfícies de titânio em diferentes etapas do processo de silanização  
André Aguiar Marques, Marcelo Henrique Prado da Silva, Álvaro José Boareto Mendes, Carlos Nelson Elias
- 38** Fabricação de superfícies via manufatura aditiva – deposição por energia direcionada (MA-DED) com pó de aço ferramenta H13 atomizado no Brasil  
Rafael Ramos, Naiara V. Le Sénéchal, Helder P. Vicente, Paulo P. O. L. Dyer, Andersan S. Paula, Getúlio Vasconcelos
- 47** Identificação e classificação de patologias em rodovias a partir de um sistema integrado com rede neural convolucional  
Kaio Gefferson de Almeida Mesquita, Yasmin Pereira de Brito Barroso, Thiago de Sousa Tostes, Luan Pablo de Holanda Barros, Thiago Prezotte Reis, Frederico Rodrigues
- 60** Uma metodologia estatística para redução do desgaste em trilhos ferroviários e sua comparação com o desgaste real  
Larissa Fernandes Nunes, Luiz Antônio Silveira Lopes, Luiz Paulo Brandao, Wellington Luiz Pereira, João Carlos De Serpa

# Avaliação de ligas de aço microligado de baixo C e alta resistência mecânica, submetidas ao processo de Têmpera e Partição<sup>1</sup>

Flávia Tolomelli<sup>1\*</sup>, Andersan dos Santos Paula<sup>1</sup>, Fernando Cosme Rizzo Assunção<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

<sup>2</sup>Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC-RJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

\*flavia.tolomelli@ime.eb.br

**RESUMO:** Por meio do processo de têmpera e partição podem ser obtidos aços AHSS (Aços Avançados de Alta Resistência) com boa tenacidade e ductilidade. Neste trabalho é avaliado o desempenho de duas ligas desses aços (com adição de Ti ou Cr) submetidas ao processo de Têmpera e Partição (T&P) de um estágio. O estudo envolveu o uso do programa ThermoCalc (TCFE9) para determinar a composição da austenita, bem como equações empíricas para determinar as principais temperaturas de transformação de interesse nesse processo, usadas como base para os tratamentos térmicos de têmpera com resfriamento em óleo. A caracterização das ligas foi feita usando microscopia ótica e eletrônica de varredura, como também quantificação de fase com auxílio do software Image J. Esse último para avaliar de forma indireta o percentual de austenita retida em função da fração de constituinte MA (martensita-austenita). Como resultado foi observado que a liga com adição de Ti comparada à liga com adição de Cr além de apresentar maiores frações de MA, apresentou maiores valores de limite de escoamento, limite de resistência e alongamento total, indicando que ela apresenta maior aptidão ao processo T&P.

**PALAVRAS-CHAVE:** Aços microligados; T&P; ThermoCalc; Austenita retida.

**ABSTRACT:** Quenching and partitioning can produce AHSS (advanced high strength steel) with good toughness and ductility. This study evaluated the performance of two alloys of these steel forms (with Ti or Cr addition) that were subjected to one-stage quenching and partitioning. This study used the ThermoCalc program (TCFE9) to determine austenite composition and empirical equations to determine the main transformation temperatures of interest in this process, which were used as a basis for quenching heat treatments in oil. The alloys were characterized by optical and scanning electron microscopy and phase quantification on Image J. The latter was used to indirectly evaluate the retained austenite content as a function of the MA constituent fraction (martensite-austenite). Results found that the alloy with Ti-addition showed higher fractions of MA and higher yield strength, tensile strength limit, and total elongation than with Cr, indicating its greater aptitude for quenching and partitioning.

**KEYWORDS:** Microalloyed steels; Q&P; ThermoCalc; retained austenite.

## 1. Introdução<sup>2</sup>

Os aços avançados de alta resistência (AHSS), de terceira geração, visam agregar maior tenacidade e ductilidade aos aços AHSS de primeira geração. Isso é possível porque esses aços contêm elevada fração volumétrica de ferrita de grão fino, bainita livre de carboneto,

martensita e austenita retida em sua microestrutura. O nível de resistência mecânica é dado por meio dos constituintes ferrita de grão ultrafino, bainita e martensita, enquanto a ductilidade e o alto expoente de encruamento são altamente dependentes da fração e estabilidade mecânica da austenita (GRAJCAR, KU-ZIAK, ZALECKI, 2012; MATLOCK, SPEER, 2009). O conceito do projeto da microestrutura dos aços AHSS de terceira geração visa a obtenção de uma quantidade considerável de austenita retida (> 20% em volume) em uma matriz martensítica/ferrítica. Para obter uma estrutura multifásica sofisticada, são empregadas rotas complexas de processamento térmico (BLECK *et al.*, 2019). Nesse contexto, destacam-se os aços que são obtidos por meio do processo de têmpera e partição (aços T&P) ou do nome original em inglês (aços Q&P) *Quenching and Partitioning Steels*.

1 Indicação de financiamento: deverá ser indicado em “considerações ao editor” durante a submissão, conforme exemplo nas diretrizes ao autor. Não incluir no manuscrito.

2 Observações iniciais ou contextualização, se necessárias, devem ser incluídas como nota de rodapé na in Os títulos dos itens e subitens são apenas exemplos. No entanto, sugerimos usar o formato 1.2.3 para sua subdivisão.

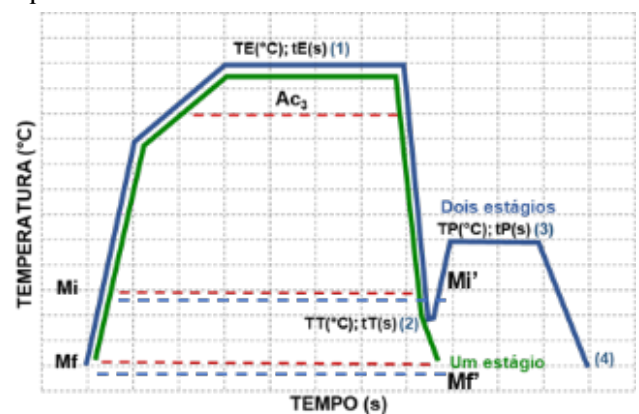
O processo de têmpera e partição, inicialmente proposto por Speer, tem se mostrado uma alternativa de rota viável na obtenção de aços com microconstituintes mistos, tornando-os atrativos devido a sua excelente combinação de propriedades com pouca adição de elementos de liga (SEO, 2019). Um bom projeto de liga para obtenção de um aço de têmpera e partição com microestrutura formada por ripas de martensita separadas por finos filmes de austenita retida deve levar em conta a adição de elementos de ligas que, somado às altas taxas de resfriamento, empregadas no processo de têmpera, permitam: a não formação das fases ferrita e perlita durante a etapa de têmpera; atraso ou inibição da formação de bainita; não formação ou minimização da precipitação de carbonetos (que consumiriam o carbono necessário para estabilização da austenita) e um teor de carbono suficientemente alto para estabilização de uma fração considerável de austenita retida à temperatura ambiente (SANTOFIMIA, 2011). Com essa finalidade, além de C, esses aços apresentam em suas composições outros elementos de liga, tais como: Mn, Ni, Cr, que retardam a formação de ferrita, perlita e bainita; e Si, Al ou P, que adicionados isoladamente ou em combinações inibem a precipitação de carboneto épsilon e cementita, os quais consumiriam o carbono necessário à estabilidade dessa austenita. O enriquecimento em carbono da austenita é considerado benéfico porque o efeito TRIP durante a deformação pode contribuir significativamente para a conformabilidade e a energia de absorção do aço (SANTOFIMIA, 2008). Tem-se ainda que C e Mn, assim como os demais elementos de liga gamagênicos, reduzem a temperatura  $A_{c3}$  ou  $A_{r3}$  (ou seja, temperatura de transformação ou decomposição eutetóide [ $A_{c3}$ ] fora do equilíbrio considerando o resfriamento ou aquecimento, respectivamente) aumentando o campo de estabilidade da austenita.

O processo, de têmpera e partição (T&P), mostrado na figura 1, foi proposto para a criação de microestruturas de aço contendo austenita retida e tem sido objeto de várias pesquisas, desde então (SPEER, 2003). Ele consiste em um primeiro estágio com um tratamento térmico de têmpera, a partir da austenitização completa (campo austenítico) ou parcial (campo intercrítico) do aço, seguido de resfriamento com taxa adequada para

inibir qualquer transformação difusional ou mista, interrompido em temperatura entre  $M_i$  e  $M_f$ , ou seja, temperaturas de início e fim da transformação martensítica, conforme mostrada na Figura 1. Ao final desse estágio do processo, a microestrutura é composta por frações controladas de martensita e austenita retida. Durante o tempo de permanência (*quenching time*,  $Q_t$ ) do aço nessa faixa de temperatura (tratamento em um estágio) ou em temperatura ligeiramente acima de  $M_i$  (tratamento em dois estágios), ocorre a partição de carbono da martensita supersaturada em carbono para a austenita não transformada e que tem por objetivo estabilizá-la em função do decréscimo das suas temperaturas  $M_i$  e  $M_f$  (conforme mostrada na Figura 1), ou seja, após o resfriamento final, a austenita enriquecida em carbono se fará presente até a temperatura ambiente.

Assim, a fração volumétrica de austenita final pode ser controlada pela temperatura de interrupção do resfriamento, entre  $M_i$  e  $M_f$ , no tratamento térmico de têmpera e, ao final do tratamento, obtêm-se microestruturas formadas por martensita e austenita retida (se o encharque do tratamento de têmpera for realizado a partir do campo austenítico) ou por ferrita livre, martensita e austenita retida (se o encharque do tratamento de têmpera for realizado a partir do campo intercrítico) (SPEER, 2005; SPEER, 2011).

**Figura 1** - Processo de têmpera e partição de 1 estágio e 2 estágios aplicados a aços passíveis a T&P.  $M_i$  e  $M_f$  = referente à austenita retida no resfriamento da têmpera;  $M_i'$  e  $M_f'$  = referente à austenita enriquecida no particionamento.



Fonte: X

Os fatores que influenciam a fração volumétrica da austenita retida no aço Q&P incluem principalmente: a composição química, que determina a temperatura  $M_i$  da austenita; a temperatura de têmpera (QT), que determina a fração volumétrica inicial da martensita; e o tempo de particionamento, que determinará a fração volumétrica final de austenita retida. Se o tempo de particionamento for muito curto, a difusão do carbono da martensita para austenita será insuficiente, o que faz com que a austenita retida se torne instável e se transforme em martensita no processo de resfriamento seguinte; se o tempo de particionamento for muito longo, a austenita retida é enriquecida em carbono, mas pode se decompor em ferrita e carboneto ou em bainita na temperatura de particionamento (PT) e a fração volumétrica da austenita retida diminuirá (WANG, SPEER, 2013; TOJI, MIYAMOTO, RAABE, 2015; KIM *et al.*, 2009; LI *et al.*, 2010; DE MOOR *et al.*, 2006).

Outros fatores incluem ainda o tamanho do grão austenítico e a morfologia da austenita. O percentual de carbono da austenita é afetado pelo tempo e pela temperatura de partição, de forma que aumentando tanto o tempo quanto a temperatura de partição ocorrerá um aumento na taxa de difusão do carbono e, conseqüentemente, maior estabilização da austenita retida (KNIF *et al.*, 2014; XIE *et al.*, 2019; ZINSAS-BORUJERDI, *et al.*, 2018; ZHAO *et al.*, 2014).

Em relação às propriedades mecânicas, de acordo com Zinsaz-Borujerdi *et al.* (2018), nos aços passíveis do processo de têmpera e partição a fração volumétrica de austenita retida é considerada o principal fator que irá afetar a sua ductilidade, ou seja, o alongamento total avaliado no ensaio de tração uniaxial. O motivo principal é o fato de o alongamento total do aço não depender somente do percentual de austenita retida, mas também do seu percentual de carbono, visto que a estabilidade da austenita enriquecida ao final do encharque, na temperatura de partição, irá definir se no resfriamento subsequente se terá, em conjunto com martensita revenida, somente austenita retida, ou então austenita retida em conjunto com outra martensita

com teor de carbono superior somado à alguma austenita retida. Aumentando-se a temperatura ou tempo de partição aumenta-se a taxa de difusão de carbono e, conseqüentemente, a estabilidade da austenita retida (ZHAO *et al.*, 2014). Matsumura, Sakuma e Takechi (1987) concluíram que, quanto maior o percentual de austenita retida e sua estabilidade, maior o valor de alongamento total obtido.

Diversos trabalhos têm mostrado a influência das condições de processamento dos aços de T&P e de suas microestruturas nos resultados de propriedades mecânicas (JUNG, 2011; ARLAZAROV *et al.*, 2016; KICKINGER *et al.*, 2021; CHENG *et al.*, 2022; JING, 2014; HE *et al.*, 2019).

O objetivo do presente trabalho consistiu na avaliação de duas ligas de aços microligados, AHSS, com diferentes composições, quanto às suas aptidões na obtenção de um aço T&P, quando submetidas ao processo de têmpera e partição de um estágio. Após obtenção das microestruturas, resultantes do processo T&P proposto, foi realizada a caracterização das mesmas por meio de microscopia ótica e eletrônica de varredura, em função do contraste prévio com utilização de solução para ataque colorido de Klemm e reagente convencional de Nital 3%, respectivamente. Dessa maneira, foi possível a identificação dos microconstituintes a partir da análise de imagens, oriundas das micrografias de microscopia ótica, bem como a quantificação da estimativa de austenita retida, por meio da quantificação do percentual de constituinte MA, utilizando o software ImageJ. Agregando a esses resultados a caracterização mecânica por ensaio de tração uniaxial.

## 2. Materiais e Métodos

### 2.1. Determinação do projeto de liga

A seleção das ligas, visando a avaliação da aptidão dos aços para o processo T&P, levou em conta uma composição química básica, de Fe-C-Mn-Si, de duas ligas de aços microligados ao Nb, sendo a Liga A com adição de Ti e Mo e a Liga B com adição de Cr e Mo, conforme mostrado na tabela 1. As ligas foram vaza-

das, em escala industrial, em conversor LD e, após os processos de laminação a quente, decapagem e laminação a frio, foram retiradas amostras das chapas para realização do estudo.

**Tabela 1** - Composição Química (%peso) das ligas selecionadas para o estudo.

Ligas	C	Mn	Cr	Si	Mo	Ti+nB
Liga A	0,15	2,0	-	0,5	0,3	0,1
Liga B	0,20	2,0	0,3	0,5	0,3	0,050

(valores máximos).

## 2.2. Determinação das temperaturas de encharque do tratamento de têmpera

O programa ThermoCalc, com banco de dados na versão TCFE9, foi utilizado para determinar as temperaturas que delimitam o campo intercrítico no equilíbrio ( $A_{e1}$  e  $A_{e3}$ ), avaliar a composição química da austenita (percentual de carbono), bem como as temperaturas de precipitação das fases a partir do campo austenítico.

### 2.2.1. Equações Empíricas

Equações empíricas (GORNI, 2019) para determinação das temperaturas  $A_{e1}$ ,  $A_{e3}$ , e  $M_i$  foram adotadas conforme as indicadas nas equações 1, 2 e 3, e comparadas com os valores obtidos via ThermoCalc. Essas temperaturas foram utilizadas como base para a realização dos tratamentos térmicos de têmpera propostos neste trabalho para o processo T&P em um estágio.

$$A_{e1} = 739 - 22,8C - 6,8Mn + 18,2Si + 11,7Cr - 15Ni - 6,4Mo - 5V - 28Cu \quad \text{Equação 1.}$$

$$A_{e3} = 937,3 - 224,5C - 17Mn + 34Si - 14Ni + 21,6Mo + 41,8V - 20Cu \quad \text{Equação 2.}$$

$$M_i = 539 - 423C - 30,4Mn - 17,7Ni - 12,1Cr - 11Si - 7,5Mo \quad \text{Equação 3.}$$

## 2.3 Amostragem para a realização dos Tratamentos

Foram coletadas chapas, com espessura de 1,50 mm, de amostras laminadas a frio em escala industrial e confeccionados corpos de provas na dimensão de 90 x 270 mm (direção longitudinal – DL em relação à direção de laminação) para realização dos tratamentos térmicos. O processo de T&P em um estágio com distintas temperaturas de encharque para cada aço, foi realizado em forno de mufla com monitoramento da temperatura por meio de termopares tipo K, fixados às chapas e acoplados a um aparelho fluke.

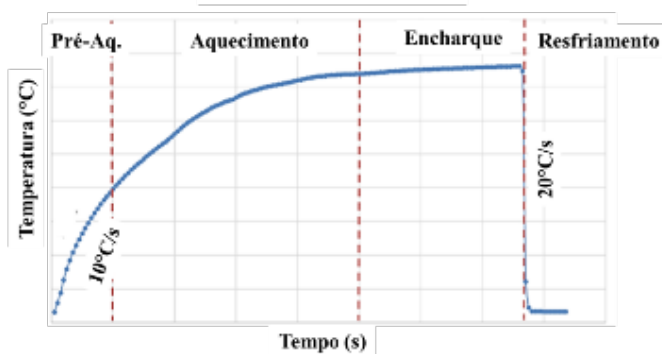
## 2.4. Processo T&P em um estágio

Para a realização dos tratamentos térmicos de têmpera e partição duas condições de encharque

foram utilizadas: encharque no campo austenítico e encharque no campo intercrítico, em função do processo T&P em um estágio proposto. Para a realização do encharque no campo austenítico foi adotada a temperatura de 840 °C para as duas ligas em estudo, uma vez que as temperaturas  $A_{e3}$  das ligas estava abaixo dessa temperatura. Para a realização do tratamento térmico no campo intercrítico, a partir dos valores obtidos para as temperaturas  $A_{e1}$  e  $A_{e3}$ , foram adotadas as temperaturas de 780 °C e 820 °C com tempo de encharque de 120 s e tempo de espera de 20 s. O meio de resfriamento utilizado foi óleo à temperatura ambiente e a taxa de resfriamento obtida ficou acima de 20 °C/s. Um exemplo do gráfico obtido para monitoramento do perfil do

ciclo térmico realizado nos tratamentos térmicos pode ser visto na Figura 2. Pode-se observar que o aquecimento se deu com um perfil não linear e com taxa decrescente com o incremento da temperatura, subdividido em duas regiões de pré-aquecimento (taxa média de  $10\text{ }^{\circ}\text{C/s}$ ) e de aquecimento (taxa menor e com maior variação). Com isso, faz-se necessário um tempo de espera das chapas no forno, pré-aquecido na temperatura de encharque proposta, de aproximadamente 90 s para assim considerar-se o início do tempo do encharque.

**Figura 2** - Esquema de tratamento térmico utilizado para as Ligas A e B.



## 2.5. Caracterização metalográfica

Para a realização da caracterização metalográfica foram utilizadas duas técnicas:

- microscopia ótica – MO (em microscópio Zeiss) com reagentes convencionais à base de Nital (solução de 3 mL de ácido nítrico diluído em 97 mL de álcool etílico) e Klemm (solução aquosa saturada de tiosulfato de sódio: 50 mL (solubilidade do sulfato anidro ( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ ) 50 g/100 mL a  $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ , solubilidade do sulfato hidratado 291,1 g/100 mL a  $45\text{ }^{\circ}\text{C}$  e 1 g de metabissulfito de potássio). O tempo de ataque variou em função da microestrutura;

- microscopia eletrônica de varredura em um MEV QUANTA 3D FEG a partir das microestruturas reveladas com a solução de Nital 3%.

## 2.6. Metalografia Quantitativa

Para realizar uma avaliação quantitativa, estimada, da fração de austenita retida, presente na microestrutura, associada ao percentual de constituinte MA, foi utilizado o software ImageJ como ferramenta de apoio à caracterização. Dois corpos de prova de cada liga, submetidos às mesmas condições de tratamento, foram utilizados para análise de forma comparativa das microestruturas resultantes do ataque com Nital 3%.

## 2.7. Caracterização Mecânica

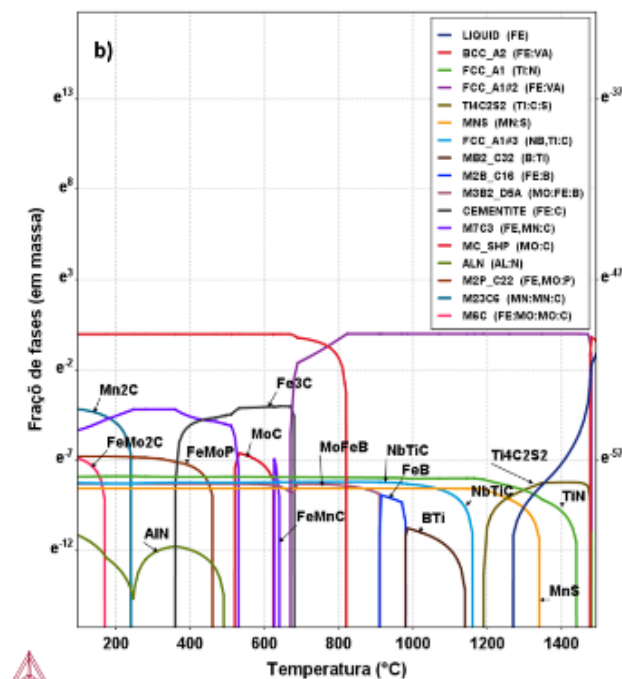
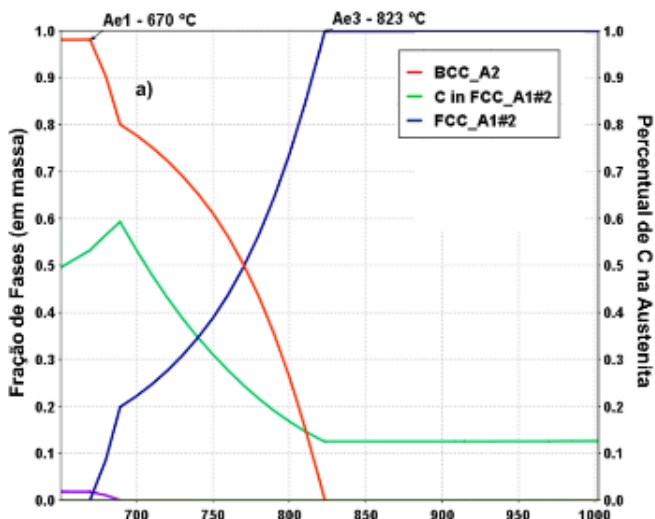
Foram realizados ensaios de tração uniaxial em máquina Instron 5585H 25t, com alongamento total determinado por meio de extensômetro AVE com vídeo. Os corpos de prova, no total de 02 por condição em estudo para cada liga, foram retirados na posição longitudinal e seguiram o padrão conforme normas ASTM-E-290, sendo do tipo ISO I com base de medida 50 mm.

# 3. Resultados e Discussão

## 3.1 Aspectos Termodinâmicos

Na Figura 3 (a,b), podem ser observadas as temperaturas  $A_{e1}$  e  $A_{e3}$ , calculadas via Thermocalc, para as ligas A e B, em que é observado um maior campo de estabilidade da austenita na primeira liga comparativamente à segunda. Na figura 4 (a,b), são mostradas as temperaturas de precipitação de carbonetos, nitretos e carbonitretos das referidas ligas. Nota-se que, na condição de equilíbrio, a liga A poderá consumir mais C na formação de precipitados (08 precipitados à base de C) do que a liga B (05 precipitados à base de C), indicando que nessa última poderá haver maior probabilidade de sobrar C para estabilizar a austenita à temperatura ambiente do que na primeira.

**Figura 3** - Gráficos referentes a dados termodinâmicos da Liga A, condição no equilíbrio, destacando: (a) as temperaturas de transformações de fases,  $A_{e1}$  e  $A_{e3}$ , e a distribuição do carbono na austenita; e (b) os mapas de fases.



### 3.2 Percentual de Carbono da Austenita e CE

Pode ser visto na Figura 3(a) que os percentuais de carbono da austenita (na condição de equilíbrio) estão acima de 0,20 %C na temperatura de 780 °C, e abaixo

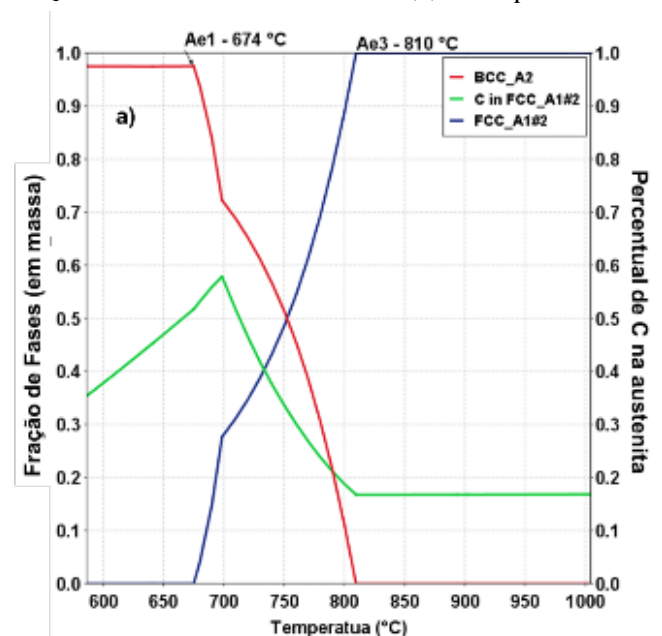
de 0,15 %C nas temperaturas de 820 e 840 °C para a liga A. E pode ser visto na Figura 4 (a) que esses valores também ficaram acima de 0,20 %C na temperatura de 780 °C, porém ficaram acima de 0,15 %C nas temperaturas de 820 e 840 °C, respectivamente, para a liga B.

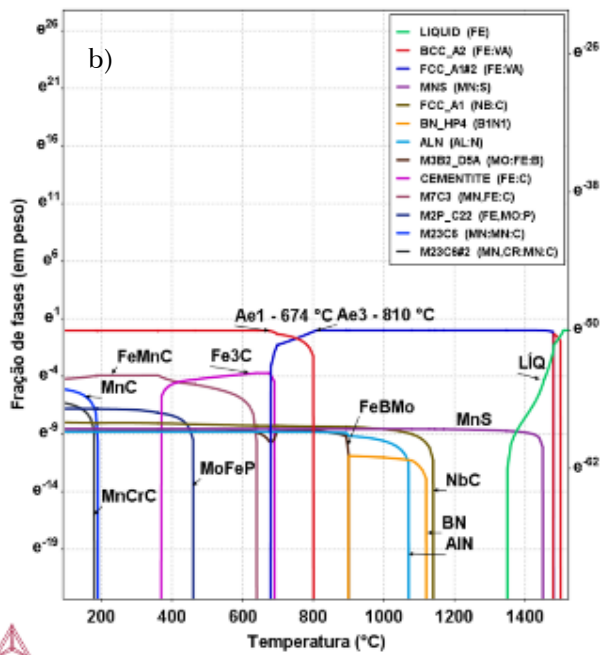
Na Tabela 2 pode ser observado que os teores de carbono equivalente da liga A (0,71; 0,52; 0,52%) são menores do que os teores de carbono equivalente da liga B (0,73; 0,60; 0,60%) para as temperaturas de 780 °C, 820 °C e 840 °C, respectivamente, indicando que a liga B poderá apresentar maior temperabilidade quando comparada à liga A.

**Tabela 2** - Percentual de carbono equivalente das ligas A e B em distintas temperaturas de encharque.

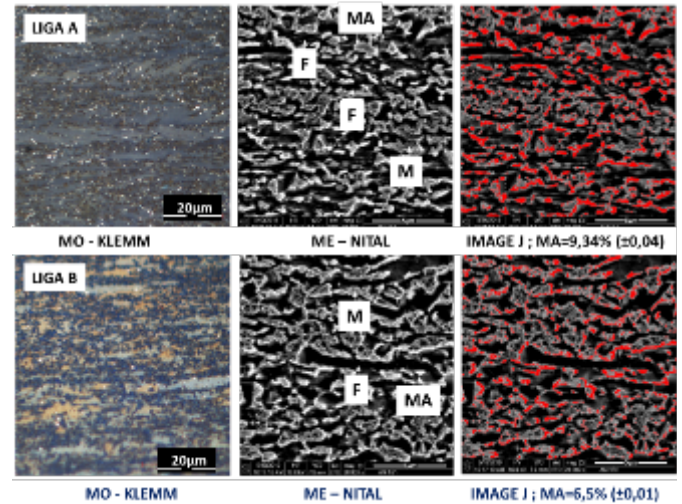
% de Carbono Equivalente das Ligas		
T(°C)	Liga A	Liga B
780	0,71	0,73
820	0,52	0,60
840	0,52	0,60

**Figura 4** - Gráficos referentes a dados termodinâmicos da Liga B, condição no equilíbrio, destacando: (a) as temperaturas de transformações de fases,  $A_{e1}$  e  $A_{e3}$ , e a distribuição do carbono na austenita; e (b) os mapas de fases.





**Figura 5** - Caracterização microestrutural: MO (500x) e MEV (20.000x) e seus resultados (estimativa) de quantificação de austenita retida (relacionada ao constituinte MA) das ligas A e B submetidas ao processo T&P, com encharque a partir das temperaturas de 780 °C.

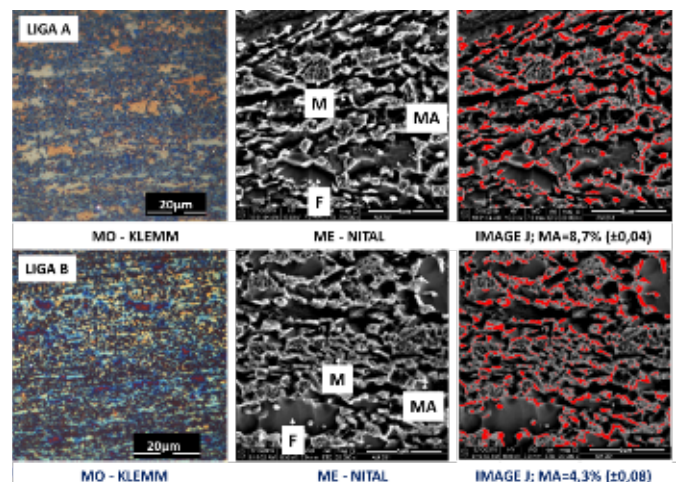


### 3.2 Avaliação Microestrutural

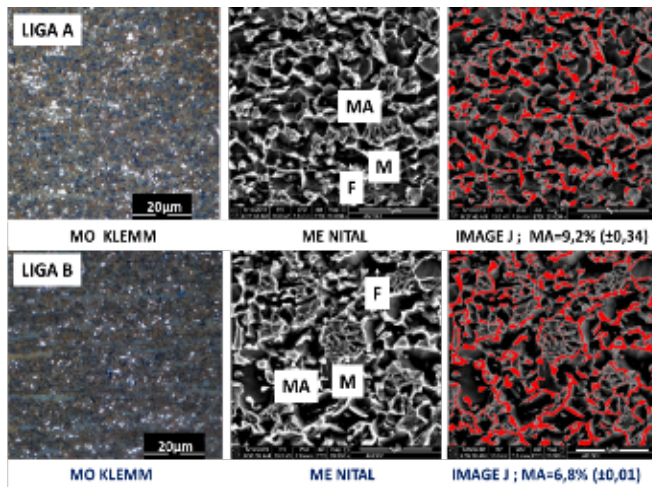
Nas Figuras 5, 6 e 7 são apresentados os aspectos microestruturais, resultantes do tratamento térmico de têmpera, realizado no campo intercrítico, nas temperaturas de encharque de 780 °C e 820 °C, e no campo austenítico, na temperatura de encharque de 840 °C, respectivamente para o tempo de encharque de 2 min em função das análises feitas nos microscópios ótico (MO) e eletrônico de varredura (MEV).

As micrografias resultantes da análise microestrutural estão dispostas nas referidas Figuras 5, 6 e 7 da seguinte forma, da esquerda para a direita: micrografia do microscópio ótico resultante do ataque colorido com a solução de Klemm (primeira coluna); micrografia do microscópio eletrônico de varredura resultante do ataque com solução de Nital 3% (segunda coluna) e a respectiva análise de imagem para quantificação da austenita retida no ImageJ (terceira coluna), a partir da seleção das regiões mais claras destacadas nas micrografias de MEV.

**Figura 6** - Caracterização microestrutural: MO (500x) e MEV (20.000x) e seus resultados (estimativa) de quantificação de austenita retida (relacionada ao constituinte MA) das ligas A e B submetidas ao processo T&P com encharque a partir das temperaturas de 820 °C.



**Figura 7** - Caracterização microestrutural: MO (500x) e MEV (20.000x) e seus resultados (estimativa) de quantificação de austenita retida (relacionada ao constituinte MA) das ligas A e B submetidas ao processo T&P, com encharque na temperatura de 840 °C.



Ao se comparar a quantificação das amostras tratadas a partir das temperaturas de 780 °C, 820 °C e 840 °C foi observada uma ligeira redução no percentual de austenita retida (relacionada ao % de constituinte MA) com o aumento da temperatura de 780 °C para 820 °C. Esse fato pode estar associado ao decréscimo no percentual de carbono das ligas de 0,20% C a 780°C para 0,14% C a 820°C, no caso da liga A, e 0,25% C a 780°C para % C < 0,15, no caso da Liga B,

que é observada à medida em que a temperatura do tratamento aumenta, diminuindo, assim, a possibilidade de estabilidade da austenita retida à temperatura ambiente, em função do decréscimo da temperatura  $M_r$  e, assim, uma maior proporção de austenita no constituinte MA.

Foi observado também que a Liga A apresentou maior percentual de austenita retida (valor estimado pelo % de constituinte MA) comparativamente à Liga B, na temperatura de 840 °C. Nessa faixa de temperatura, o percentual de carbono da austenita é igual ao percentual de carbono das ligas, ou seja: 0,13 %C para a Liga A e > 0,15 %C para a Liga B.

### 3.3. Ensaio de tração

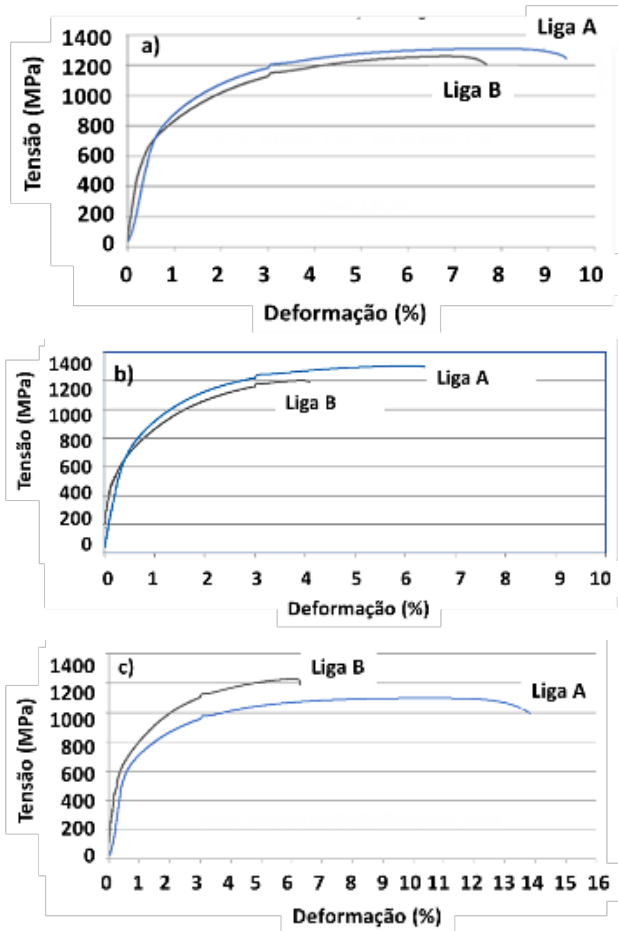
Na Tabela 3 são apresentados os valores das propriedades mecânicas (média de dois corpos de provas) para as variáveis limite de escoamento, LE (MPa), limite de resistência à tração, LR (MPa), alongamento total, AL (%) e expoente de encruamento, valor n, (medida até no máximo 6 % de deformação, exceto para a liga B, tratada a 820 °C, em que a medida foi até 4 % de deformação), extraídos dos ensaios de tração uniaxial realizados em corpos de prova para duas ligas em estudo, tratadas nas temperatura de 780, 820 e 840 °C (conforme Figura 8), com esses valores relacionados aos percentuais de constituinte MA quantificados na análise metalográfica.

**Tabela 3** - Resultados de propriedades mecânicas da liga A e liga B, correlacionados à fração de constituinte MA, em função da temperatura adotada no tratamento térmico.

Ligas	Temp(°C)	LE (Mpa)	LR (Mpa)	Al (%)	N <sub>4-6%</sub>	MA (%)
A	780	804	1309	9,4	0,15	9,34 ± 0,2
B	780	670	1270	7,7	0,17	6,5 ± 0,3
A	820	760	1306	6,5	0,12	8,7 ± 0,1
B	820	592	1199	4,1	0,09	4,3 ± 0,2
A	840	639	1100	13,9	0,19	9,2 ± 0,25
B	840	631	1152	6,5	0,19	6,8 ± 0,3

Pode-se destacar, pelos resultados obtidos, que a Liga A, ao apresentar maiores valores de fração de constituinte MA (média de 10 medidas), também revelou ter valores superiores de LE (MPa), LR (MPa) e AL (%), quando tratada nas temperaturas de 780 e 820 °C. No entanto, os corpos, provas resultantes do tratamento térmico a 840 °C para ambas as ligas, apresentaram uma evidência de decréscimo nos valores de LE (MPa) e LR (MPa), e a manutenção de maior AL (%) para a Liga A. Por fim, os valores de  $n_{4-6\%}$  não apresentaram um comportamento conclusivo em função das ligas em estudo, temperaturas de encharque no tratamento térmico de têmpera e fração de constituinte MA observado.

**Figura 8** -Curvas tensão x deformação, em engenharia, das ligas A e B submetidas ao processo T&P a partir das temperaturas de encharque de 780 °C (a), 820 °C (b) (campo intercrítico) e 840 °C (c) (campo austenítico).

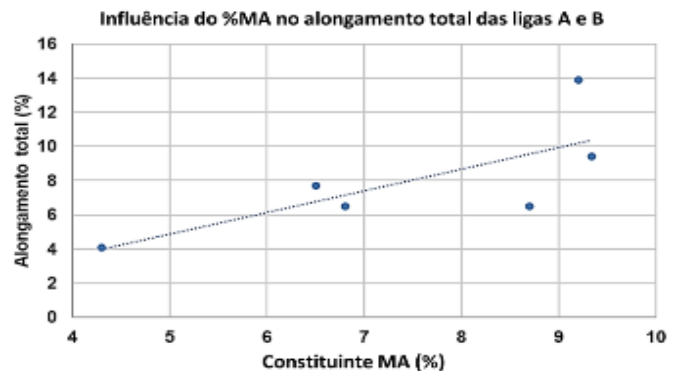


Pela análise das curvas tensão x deformação, em engenharia, destacadas na Figura 8, fica mais em evidência que o incremento na temperatura de encharque, adotada nos tratamentos praticados, proporcionou à liga A uma evolução microestrutural que resultou em um incremento contínuo no valor de alongamento total e tenacidade da referida liga comparativamente à Liga B, para o tempo de encharque adotado no tratamento (2 min).

### 3.4. Influência do percentual de austenita retida (relacionada ao constituinte MA) no alongamento total

Na Figura 9 são apresentados os valores quantificados de constituinte MA, relacionados à austenita retida, com o alongamento total observado nos corpos de prova submetidos ao ensaio de tração uniaxial, após serem submetidos aos tratamentos térmicos de têmpera nas temperaturas de encharque de 780, 820 e 840 °C.

**Figura 9** - Influência do percentual de austenita retida (relacionada ao % de constituinte MA) no alongamento total das ligas A e B, quando submetidas ao processo de T&P de um estágio.



Pela reta plotada no gráfico da Figura 9, foi observado que existe uma tendência de obtenção de maiores valores de alongamento total quando o percentual de austenita retida, associado ao % de constituinte MA, aumenta.

## 4. Conclusão

Conclui-se que os fatores que podem justificar a evolução microestrutural e o comportamento mecânico distinto entre as ligas avaliadas neste

trabalho, quanto à aptidão para o processo de têmpera e partição (com encharque na têmpera no campo intercrítico e austenítico), podem estar associados a:

- a. ação do Ti combinando-se com o N em alta temperatura, formando o composto TiN e provavelmente deixando B em solução sólida, a qual atua atrasando o processo transformação da austenita no resfriamento. Esse fato pode ser mais bem observado para as temperaturas praticadas no campo intercrítico (780 °C e 820 °C);
- b. embora o percentual de C na liga com adição de Cr fosse mais favorável à estabilização da austenita no resfriamento, é possível que a dissolução dos precipitados na referida liga, no aquecimento, possa não ter ocorrido de forma completa ao longo do encharque concomitante com o processo de recristalização dessa liga.
- c. é provável ainda que, do ponto de vista cinético, tenha ocorrido uma menor formação de

carbonetos na liga com adição de Ti comparativamente à liga com adição de Cr, deixando C livre para estabilização da austenita no resfriamento.

- d. dessa forma, pode-se inferir que a Liga com adição de Ti possivelmente apresentará maior aptidão para o processo de têmpera e partição, comparativamente à liga com adição de Cr, para as condições de tratamento adotadas neste trabalho, em função dessa ter apresentado valores superiores de propriedades mecânicas (LE, LR e Al), e maior percentual de constituinte MA, como também provável maior retenção de austenita ao final do resfriamento na têmpera.

## Agradecimentos

Os autores agradecem à CSN, IME e PUC-RJ pelo apoio recebido com as amostras, ensaios laboratoriais e caracterização, bem como ao PROEX/CAPES pelos subsídios de custeio fornecidos ao PPGCM/IME.

## Referências

- [1] ARLAZAROV, A.; OLLAT, M.; MASSE, J. P.; BOUZAT, M. Influence of partitioning on mechanical behavior of Q&P steels. *Materials Science and Engineering: A*, [s. l.], v. 661, p. 79-86, 2016. DOI: 10.1016/j.msea.2016.02.071.
- [2] ASTM INTERNATIONAL. *E290-14: Standard test methods for bend testing of material for ductility*. [s. l.]. 2014.
- [3] BLECK, W.; BRÜHL, F.; MA, Y.; SASSE, C. Materials and processes for the third-generation advanced high-strength steels. *Berg- und Hüttenmännische Monatshefte*, [s. l.], v. 164, p. 466-474, 2019. DOI: 10.1007/s00501-019-00904-y.
- [4] CHENG, Y. Y.; ZHAO, G.; XU, D. M.; MAO, X. P.; BAO, S. Q.; YANG, G. W. Comparative study on microstructures and mechanical properties of Q&P steels prepared with hot-rolled and cold-rolled C-Si-Mn sheets. *Journal of Materials Research and Technology*, [s. l.], v. 20, p. 1226-1242, 2022. DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.07.139.
- [5] CLARKE, A. J.; SPEER, J. G.; MATLOCK, D. K.; RIZZO, F. C.; EDMONDS, D. V.; SANTOFIMIA, M. J. Influence of carbon partitioning kinetics on final austenite fraction during quenching and partitioning. *Scripta Materialia*, [s. l.], v. 61, n. 2, p. 149-152, 2009. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2009.03.02.1.
- [6] DE MOOR, E.; LACROIX, S.; SAMEK, L.; PENNING, J.; SPEER, J. Dilatometric study of the quench and partitioning process. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED STRUCTURAL STEELS, 3., 2006, Gyeongju. *Proceedings Of The 3rd International Conference On Advanced Structural Steels*. Gyeongju: Korean Institute of Metals and Materials, 2006.
- [7] EDMONDS, D. V.; HE, K.; RIZZO, F. C.; DE COOMAN, B. C.; MATLOCK, D. K.; SPEER, J. G. Quenching and partitioning martensite — A novel steel heat treatment. *Materials Science and Engineering: A*, [s. l.], v. 438-440, p. 25-34, 2006. DOI: 10.1016/j.msea.2006.02.133.
- [8] GORNI, A. A. *Steel forming and heat-treating handbook*. [s. l.]: [s. n.], 2019.
- [9] GRAJCAR, A.; KUZIAK, R.; ZALECKI, W. Third generation of AHSS with increased fraction of retained austenite for the automotive industry. *Archives of civil and mechanical engineering*, [s. l.], v. 12, n. 3, p. 334-341, 2012.
- [10] HE, J.; HAN, G.; LI, S.; ZOU, D. To correlate the phase transformation and mechanical behavior of QP steel sheets. *International Journal of Mechanical Sciences*, [s. l.], v. 152, p. 198-210, 2019.
- [11] KICKINGER, C.; SUPPAN, C.; HEBESBERGER, T.; SCHNITZER, R.; HOFER, C. Microstructure and mechanical properties of partially ferritic Q&P steels. *Materials Science and Engineering: A*, [s. l.], v. 815, p. 141-296, 2021.

- [12] KIM, D. H.; SPEER, J. G.; KIM, H. S.; DE COOMAN, B. C. Observation of an isothermal transformation during quenching and partitioning processing. *Metallurgical and Materials Transactions A*, [s. l.], v. 40, p. 2048-2060, 2009.
- [13] KNIF, D. D.; PETROV, R.; FÖJER, C.; KESTENS, L. A. I. Effect of fresh martensite on the stability of retained austenite in quenching and partitioning steel. *Materials Science Engineering: A*, [s. l.], v. 615, p. 107-115, 2014. DOI: 10.1016/j.msea.2014.07.054.
- [14] LI, H. Y.; LU, X. W.; LI, W. J.; JIN, X. J. Microstructure and mechanical properties of an ultrahigh-strength 40SiMnNiCr steel during the one-step quenching and partitioning process. *Metallurgical and Materials Transactions A*, [s. l.], v. 41, n. 5, p. 1284-1300, 2010. DOI: 10.1007/s11661-010-0184-8.
- [15] LIU, H.; JIN, X.; DONG, H.; SHI, J. Martensitic microstructural transformations from the hot stamping, quenching and partitioning process. *Materials characterization*, [s. l.], v. 62, n. 2, p. 223-227, 2011.
- [16] MATLOCK, D. K.; SPEER, J. G. Third generation of AHSS: microstructure design concepts. In: HALDAR, A.; SUWAS, S.; BHATTACHARJEE, D. (eds). *Microstructure and Texture in Steels and Other Materials*. Londres: Springer, 2009. p. 185-205.
- [17] MATSUMURA, O.; SAKUMA, Y.; TAKECHI, H. Enhancement of elongation by retained austenite in intercritical annealed 0,4C-1,5Si-0,8Mn steel. *Transaction ISIJ*, [s. l.], v. 27, n. 7, p. 570-579, 1987.
- [18] SANTOFIMIA, M. J.; ZHAO, L.; PETROV, R.; SIETSMA, J. Characterization of the microstructure obtained by the quenching and partitioning process in a low-carbon steel. *Materials Characterization*, [s. l.], v. 59, n. 12, p. 1758-1764, 2008.
- [19] SANTOFIMIA, M. J.; ZHAO, L.; PETROV, R.; KWAKERNAAK, C.; SLOOF, W.G.; SIETSMA, J. Microstructural development during the quenching and partitioning process in a newly designed low-carbon steel. *Acta Materialia*, [s. l.], v. 59, n. 15, p. 6059-6068, 2011.
- [20] SEO, E. J.; CHO, L.; KIM, J. K.; MOLA, J.; ZHAO, L.; DE COOMAN, B. C. Constituent-specific properties in quenching and partitioning (Q&P) processed steel. *Materials Science and Engineering: A*, [s. l.], v. 740-741, p. 439-444, 2019.
- [21] SPEER, J. G.; ASSUNÇÃO, F. C. R.; MATLOCK, D. K.; EDMONDS, D. V. The “quenching and partitioning” process: background and recent progress. *Materials Research*, [s. l.], v. 8, n. 4, p. 417-423, 2005. DOI: 1590/S1516-14392005000400010.
- [22] SPEER, J. G.; DE MOOR, E.; FINDLEY, K. O.; MATLOCK, D. K.; DE COOMAN, B. C.; EDMONDS, D. V. Analysis of microstructure evolution in quenching and partitioning automotive sheet steel. *Metallurgical and materials transactions A*, [s. l.], v. 42, p. 3591-3601, 2011.
- [23] SPEER, J. G.; STREICHER, A. M.; MATLOCK, D. K.; RIZZO, F.; KRAUSS, G. Quenching and partitioning: a fundamentally new process to create high strength trip sheet microstructures. In: SYMPOSIUM ON THE THERMODYNAMICS, KINETICS, CHARACTERIZATION AND MODELING, 2003, Chicago. *Austenite formation and decomposition*. Warrendale: TMS, 2003. p. 505-522.
- [24] SUN, J.; YU, H. Microstructure development and mechanical properties of quenching and partitioning (Q&P) steel and an incorporation of hot-dipping galvanization during Q&P process. *Materials Science and Engineering: A*, [s. l.], v. 586, p. 100-107, 2013.
- [25] SUN, J.; YU, H.; WANG, S.; FAN, Y. Study of microstructural evolution, microstructure-mechanical properties correlation and collaborative deformation-transformation behavior of quenching and partitioning (Q&P) steel. *Materials Science and Engineering A*, [s. l.], v. 596, p. 89-97, 2014.
- [26] TOJI, Y.; MIYAMOTO, G.; RAABE, D. Carbon partitioning during quenching and partitioning heat treatment accompanied by carbide precipitation. *Acta Materialia*, [s. l.], v. 86, p. 137-147, 2015.
- [27] WANG, L.; SPEER, J. G. Quenching and partitioning steel heat treatment. *Metallography, Microstructure, and Analysis*, [s. l.], v. 2, p. 268-281, 2013. DOI: 10.1007/s13632-013-0082-8.
- [28] ZHAO, C. *et al.* Effect of annealing temperature and time on microstructure evolution of 0,2C-5Mn steel during intercritical annealing process. *Materials Science Technology*, [s. l.], v. 30, n. 7, p. 791-799, 2014. DOI: 10.1179/1743284713Y.00000000416.
- [29] ZINSAZ-BORUJERDI, A.; ZAREI-HANZAKI, A.; ABEDI, H. R.; KARAM-ABIAN, M.; DING, H.; HAN, D.; KHERADMAN, N. Room temperature mechanical properties and microstructure of a low alloyed TRIP-assisted steel subjected to one-step and two-step quenching and partitioning process. *Materials Science and Engineering: A*, [s. l.], v. 725, p. 341-349, 2018.

- [30] XIE, Z. J.; HAN, G.; YU, Y. S.; SHANG, C. J.; MISRA, R. D. K. The determining role of intercritical annealing condition on retained austenite and mechanical properties of a low carbon steel: Experimental and theoretical analysis. *Materials Characterization*, [s. l.], v. 153, p. 208-214, 2019. DOI: 10.1016/j.matchar.2019.05.010

# Detecção de Novidades em Famílias de Malware

Ricardo Sant'Ana<sup>1</sup>, Julio Cesar Cardoso Tesolin<sup>1</sup> e Julio Cesar Duarte<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto Militar de Engenharia (IME)

Praça General Tibúrcio, 80, 22290-270, Praia Vermelha, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

\*ricardo.santana@ime.eb.br

**RESUMO:** Muitas pesquisas já apresentaram abordagens para a tarefa de detecção de malware. Classificá-los em famílias fornece uma melhor compreensão de seu comportamento, permitindo que empresas e pesquisadores otimizem seus esforços. No entanto, um problema ainda precisa ser tratado corretamente: como verificar se um artefato computacional detectado como malware pertence a uma família já conhecida? Este trabalho propõe o uso de dois classificadores amplamente conhecidos – GMM e SVM – para uma tarefa de detecção de novidade em análise de malware, em que o objetivo é direcionar esforços humanos e computacionais adequados para fornecer uma rápida contramedida. A principal contribuição deste trabalho está no uso de características diretamente extraídas do arquivo binário do malware detectado, como entropia e textura de imagem para a tarefa de detecção de novidade.

**PALAVRAS-CHAVE:** Modelo de Misturas Gaussianas. Detecção de Família de Malware. Detecção de Novidade. Máquina de Vetores de Suporte. Malware como imagem. Entropia.

**ABSTRACT:** Many researches have already presented approaches to the malware detection task. Classifying them into families provides a better understanding of their behavior, allowing companies and researchers to optimize their efforts. Nevertheless, an issue still needs to be properly addressed: how to verify if an artifact detected as a malware belongs to a known family? This work proposes the use of two widely known classifiers – GMM and SVM – for a novelty detection task in malware analysis to redirect proper human and computational efforts for a quick countermeasure. The main contribution of this work is the use of features directly extracted from the detected malwares's binary file such as entropy and image's texture for novelty detection.

**KEYWORDS:** Gaussian Mixture Model. Malware Family Detection. Novelty Detection. Support Vector Machine. Malware as an image. Entropy.

## 1. Introdução

A detecção e a proteção contra artefatos computacionais maliciosos é um dos tópicos de grande visibilidade na área de segurança cibernética. A literatura apresenta várias definições sobre o que são artefatos maliciosos (ou *malware*) [12], de forma geral, são programas que podem causar danos a usuários, sistemas e redes, corrompendo seus códigos, prejudicando suas operações e/ou furtando suas informações.

Uma pesquisa realizada em 2017 por uma grande empresa produtora de programas de combate a artefatos maliciosos [1], envolvendo 1.300 profissionais de pequenas e grandes empresas de Tecnologia da Informação, revelou que 91% delas foram atacadas por algum tipo de *malware*, 45% estavam mal preparadas para ataques cibernéticos dedicados e 17% perderam dados financeiros como resultado desses ataques.

Normalmente, novos artefatos maliciosos são versões daqueles já existentes. Esse fato pode ser

verificado em [21], em que menos de 10% dos *malware* relacionados em 2019 são novos. Assim, caracterizá-los em determinadas famílias de *malware* acelera a identificação de seu comportamento, informação de vital importância para a alocação de recursos computacionais e humanos que promoverão uma contramedida tão logo seja possível. Porém, nos casos em que o artefato malicioso não é uma variação dos já existentes, ou seja, uma novidade dentre os conjuntos de *malware* existentes, essa caracterização não se aplica. Assim, faz-se necessário iniciativas de pesquisa que busquem identificar automaticamente essas novidades de forma a acelerar o combate a essas ameaças.

Assim, o objetivo desta pesquisa é avaliar a capacidade dos modelos de classificação de artefatos nunca vistos nas famílias de *malware* conhecidas, utilizando dois modelos de aprendizado de máquina comuns para a detecção de novidade: Modelos de Misturas Gaussianas (GMM – *Gaussian Mixture Models*) e Máquinas de Vetores de Suporte (SVM – *Support Vector*

*Machines*). Tal tarefa impôs: (a) definir um conjunto mínimo de características dos *malware* de forma a permitir uma rápida detecção; (b) propor um método para a seleção do conjunto de dados; e (c) critérios de escolha dos hiperparâmetros do modelo, sempre considerando a tarefa de detecção de novidades. Estas são as principais contribuições deste artigo.

Este artigo foi estruturado da seguinte forma: a Seção 2 descreve os fundamentos teóricos de detecção de novidades, os modelos de aprendizado de máquina utilizados, além da base de dados de *malware* publicamente disponíveis. A Seção 3 relata os principais trabalhos relacionados com a utilização de aprendizado de máquina em análise de *malware*. A Seção 4 apresenta o método utilizado para definir os conjuntos de dados e selecionar os hiperparâmetros mais adequados para ajustar os modelos de detecção de novidade. Já a Seção 5 expõe os experimentos e os resultados obtidos. Finalmente, na Seção 6, são apresentadas as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.

## 2. Referencial Teórico

Nesta seção, são abordados, de forma sucinta, os fundamentos teóricos de análise de *malware*, de detecção de anomalias e novidades, dos métodos de aprendizados de máquina utilizados e do conjunto de dados usado para o experimento.

### 2.1 Análise estática e dinâmica

Existem duas abordagens fundamentais para a análise de *malware*: a abordagem estática e a abordagem dinâmica. A análise estática envolve examinar o *malware* sem executá-lo, enquanto a análise dinâmica envolve a execução do *malware*[22]. Ambas as técnicas têm vantagens e desvantagens e podem ser utilizadas de forma a complementar o processo de análise.

### 2.2 Detecção de novidade

De acordo com [13], anomalias são padrões nos dados que não se adaptam a uma noção bem definida do que é um comportamento normal. Trazendo

essa definição para a detecção de *malware*, um artefato malicioso que não se enquadra em qualquer família conhecida é uma anomalia. No entanto, artefatos maliciosos (anomalias) nunca vistos são bastante comuns, e, portanto, de acordo com [13], esse tipo de anomalia é definido como novidade.

O uso de um termo ou outro não é uma mera questão semântica: os métodos de identificação de anomalias partem do princípio de que existem amostras anômalas – ainda que em quantidade bem reduzida – como parte do conjunto de treinamento. Já nos métodos de detecção de novidade, essas amostras anômalas não existem para parametrizar o modelo, tornando a detecção de um *malware* nunca antes visto ainda mais desafiadora. Obviamente, o problema de detecção de anomalias pode utilizar métodos de aprendizado de máquinas supervisionados, enquanto o problema de detecção de novidade utiliza comumente métodos de aprendizado de máquina não supervisionados.

### 2.3 Modelos de misturas gaussianas

O modelo de misturas gaussianas (*GMM – Gaussian Mixture Models*) é um modelo probabilístico que assume que todos os pontos de dados são gerados a partir de uma mistura de um número finito de distribuições gaussianas com parâmetros desconhecidos. Assim, um modelo GMM-1 utiliza apenas uma distribuição gaussiana para modelar a distribuição de dados, enquanto um modelo GMM-32 utiliza 32 distribuições gaussianas ponderadas. Nas técnicas estatísticas tradicionais, que utilizam modelos gaussianos para detecção de novidade, o limiar das regiões de probabilidade pode ser definido de duas maneiras: (i) como  $\mu \pm 3\sigma$ , em que  $\mu$  é a média e  $\sigma$  é o desvio-padrão (ii), como prescreve o teste de Grubbs [13]. Contudo, em aprendizado de máquina não se estabelece, *a priori*, o limiar para as novidades.

A detecção de novidade utilizando o aprendizado não supervisionado envolve, principalmente, a tarefa de se estimar densidades. Claramente, o conhecimento prévio da densidade dos pontos de dados nos permitiria resolver qualquer problema com base nos dados [14].

## 2.4 Máquinas de suporte a vetor

As máquinas de vetores de suporte (SVM – *Support Vector Machines*) são um conjunto de métodos de aprendizado supervisionados usados para classificação, regressão e detecção de anomalias. Especificamente para a aplicação de detecção de novidades, a utilização de SVM pode ser encontrada em [14], em que é proposto um método para resolver o seguinte problema: estabelecido um conjunto de dados, extraído de uma distribuição de probabilidade subjacente  $P$ , deseja-se estimar um subconjunto  $S$  de forma que a probabilidade de uma amostra de teste retirada de  $P$  ficar fora de  $S$  seja igual a  $V$ . A utilização do SVM neste tipo de tarefa é conhecida como *OneClassSVM* (OC-SVM) e tem a vantagem de não fazer suposições sobre a forma da distribuição dos dados conhecidos [15], ou seja, ser aplicável em qualquer distribuição. De acordo com [23], a ideia é encontrar uma função que seja positiva para regiões com alta densidade de pontos e negativa para pequenas densidades.

Uma desvantagem do *OneClassSVM* é o fato de o método prever, de forma discreta, se a amostra pertence ou não ao grupo modelado. É possível expandir essa limitação realizando modificações no *OneClassSVM*, ao permitir que a saída do SVM seja na forma de probabilidades de classes condicionais, conforme proposto em [16]. Uma abordagem probabilística oferece muitas vantagens em relação ao método convencional, incluindo a facilidade de selecionar automaticamente um limite de novidade probabilístico.

## 2.5 Base de dados de artefatos maliciosos para detecção de novidade

As técnicas de detecção de anomalias e novidades baseadas em aprendizado de máquina são claramente dependentes de bases de dados com volume representativo de amostras. Neste quesito, são poucas as bases de dados de *malware* disponíveis para o público.

Ainda, de acordo com [20], os artefatos maliciosos para a plataforma Windows, em agosto de 2019, representavam 74,49% do universo de *malware* existentes, o que motivou nossa escolha por essa plataforma.

## 3. Trabalhos relacionados

Nesta seção, são apresentados, de forma resumida, os principais trabalhos relacionados ao emprego de aprendizado de máquina à análise de *malware*.

A utilização de aprendizado de máquina em análise de *malware* é extensa e abrange diversos objetivos, como a detecção de artefatos maliciosos [2, 3, 4, 5, 6], a detecção de variantes de *malware* [7, 8], a detecção de categorias de *malware* [9,10,12], entre outros.

Em [2], um novo algoritmo baseado em grafos, construídos a partir de traços de instruções coletadas de forma dinâmica, é proposto para a tarefa de classificação de artefatos em maliciosos ou benignos. O resultado mostra que a utilização da análise dinâmica combinada com n-gramas é superior ao obtido por ferramentas de antivírus da época (2011). Já em [3], os autores propõem a utilização de análise estática e dinâmica de artefatos, assim como métricas de similaridade, com diversos *kernels* para a detecção de *malware*. Um peso é dado para cada *kernel*, de forma a encontrar a combinação pesos/*kernels* que obtenha a melhor acurácia. O resultado utilizando tal abordagem foi de 99,78% de acurácia. Em [4], o autor faz uso de máquinas de vetores de suporte para a tarefa de detecção de *malware*. O escopo do trabalho foi limitado a 398 amostras, obtendo uma acurácia entre 94% e 95%. Os autores em [5] utilizam técnicas estáticas e dinâmicas de forma conjunta para a detecção de artefatos maliciosos. Neste trabalho, foram utilizados os algoritmos C5.0 e *Random Forest*, sendo implementados no *framework* FAMA. A acurácia obtida foi de 95,75% para a classificação binária e 93,02% para a categorização múltipla. Uma arquitetura para análise automática de artefatos maliciosos (análise dinâmica) é proposta em [6]. Os resultados obtidos com *Random Forest* (baseados no ID3) apresentaram uma acurácia acima de 90%.

Em [7], um novo método para utilização de modelos ocultos de Markov é proposto: inicialmente, são selecionados conjuntos de *opcodes* relevantes para, em seguida, submeter esta sequência a um modelo oculto de Markov. O trabalho apresenta melhorias entre 8% e 42% nos resultados, em comparação aos trabalhos que usam Modelos Ocultos de Markov sem a seleção de *opcodes*. Já em [8],

é apresentada uma estrutura genérica que extrai informações estruturais de *malware* como gráficos de chamadas de função sendo codificadas como atributos em nível de função. Essa abordagem é avaliada em 11 famílias de *malware*, obtendo uma acurácia de 86,67% na detecção de amostras de variantes previamente escolhidas.

Em [9], são utilizados algoritmos de árvore de decisão e máquina de vetores de suporte para categorizar artefatos maliciosos nas classes *Trojan*, *Infecter*, *Backdoor* e *Worm*. O resultado obteve uma acurácia acima de 98% para o algoritmo de árvores de decisão e de 97% para o algoritmo de máquina de vetores de suporte. Já em [10], os autores propõem a utilização de duas abordagens de aprendizado de máquina para fornecer uma correta classificação dos artefatos maliciosos apresentados no *Microsoft Malware Classification Challenge* [11]. Nesse trabalho, são extraídas várias características dos artefatos: referentes ao conteúdo binário do artefato malicioso e referentes ao arquivo desconstruído (*disassembled*). Com a utilização de um algoritmo para a seleção dos melhores atributos, o sistema obteve uma acurácia de 99,76%. Finalmente, em [12], os autores utilizam a abordagem de aprendizado de máquina não supervisionado para a classificação e a detecção de novas famílias de *malware*, denominadas *Shared Nearest Neighbor – SNN*. Utilizando uma base de dados com 20 mil amostras, os resultados mostram uma melhoria de 3% utilizando o algoritmo de *Random Forest* e de 18% utilizando o algoritmo de *Naive Bayes*, considerando uma combinação de três tipos de atributos em todos os casos (atributos de imagem em escala de cinza e de n-grama). Em síntese, esses últimos artigos mostram duas estratégias diferentes: [10] limita-se a classificar os *malware* nas famílias existentes e [12] propõe a classificação e a detecção utilizando uma abordagem não supervisionada.

Assim, apesar da extensa pesquisa na área de análise de *malware* utilizando aprendizado de máquina, nenhum dos artigos analisados aborda a tarefa de detecção de novidade, tema trabalhado no presente artigo.

## 4. Desenvolvimento da pesquisa

Nesta seção, são apresentados os processos e os métodos utilizados para ajustar os hiperparâmetros

dos modelos de aprendizagem de máquina para detecção de novidades no conjunto de dados de *malware* selecionado.

### 4.1 Análise do conjunto de dados de malware

Neste trabalho, utilizou-se o conjunto de dados fornecido pela Microsoft para seu desafio de classificação de famílias *malware*, sendo este hospedado na plataforma *Kaggle* [11]. Originalmente, são fornecidos dois conjuntos de dados: um de treinamento, com 10.868 amostras de famílias conhecidas, e um de testes, com 10.873 amostras de famílias desconhecidas. Apenas o subconjunto de treinamento foi utilizado para esta pesquisa, uma vez que era o único a apresentar os rótulos de família para cada amostra. A distribuição por família deste subconjunto de treinamento é apresentada na Tabela 1.

**Tabela 1** - Distribuição das famílias da malware na base de dados da microsoft [11]

Ordem	Nome da família	Quantidade de amostras
1	Ramnit	1.541
2	Lollipop	2.478
3	Kelihos_ver3	2.942
4	Vundo	475
5	Simda	42
6	Tracur	751
7	Kelihos_ver1	398
8	Obfuscator.ACY	1.228
9	Gatak	1.013

As amostras de *malware* desta base de dados estão disponibilizadas em dois formatos: binário bruto, que contém a representação hexadecimal do conteúdo binário do arquivo; e o código desconstruído, resultado do processo de *disassembler* do código original (com a ferramenta IDA [17, 10]). Em ambos os casos, o cabeçalho do arquivo (*PE header*) foi removido, inviabilizando qualquer tentativa de análise dinâmica do código.

Como o objetivo da pesquisa é definir um classificador capaz de identificar novidades de forma rápida, considerou-se apenas um conjunto mínimo de atributos extraídos dos dados binários brutos a partir de duas premissas: (i) distribuição próxima à distribuição normal; e (ii) sucesso na utilização em outros trabalhos. Dessa forma, quatro classes de atributos foram escolhidas de [10]: as de entropia (ENT), as de metadados (MD1), as de Haralick (IMG1) e as de padrões binários locais (IMG2).

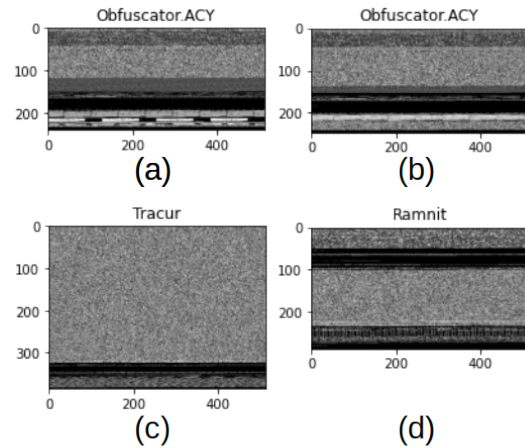
Os atributos de entropia (ENT) são utilizados para medir a quantidade de desordem do arquivo binário bruto. A entropia é calculada utilizando  $N$  janelas deslizantes de forma a representar o *malware* como uma medida de entropia  $E = E_i$  com  $i = \{1, 2, 3 \dots N\}$ , em que  $E_i$  é a entropia medida na janela  $i$  e  $N$  é o número de janelas. Em seguida, considerou-se a estatística do vetor de entropia obtido usando o método de janela deslizante, ou seja, foi calculada a entropia para cada janela de 10.000 *bytes* e então considerou-se as medidas estatísticas quantis, percentis, média e variância da distribuição obtida. Foram computados também a entropia de todos os *bytes* do *malware*, totalizando 202 características. Já os atributos de metadados extraídos (MD1) são o tamanho do arquivo e o endereço da primeira sequência de *bytes*, totalizando duas características.

Uma maneira original de representar uma amostra de *malware* é visualizar os *bytes* como escala de cinza de um pixel em uma imagem 2D [10]. A Figura 1 mostra um recorte da imagem em escala de cinza de (a) um *malware* da família Obfuscator.ACY, (b) outro *malware* da família Obfuscator.ACY, (c) um *malware* da família Tracur e (d) um *malware* da família Ramnit. Nota-se por (a) e (b) que dois *malware* da mesma família têm representação visual similar.

Da imagem de escala de cinza de cada amostra, foram extraídos dois conjuntos de atributos que descrevem as texturas: os atributos *Haralick* (IMG1), com 53 características extraídas; e os atributos padrões binários locais (IMG2), com 108 características extraídas, todas de fácil obtenção do ponto de vista de processamento [10]. Para essa extração, utilizou-

se a biblioteca de processamento de imagens e visão computacional *Mahotas* [18].

**Fig. 1** - Representação de *malware* em suas respectivas famílias por meio de imagens em escala de cinza.



Assim, as classes de atributos de entropia (ENT), metadados (MD1), *Haralick* (IMG1) e padrões binários locais (IMG2) totalizam 365 atributos individuais e o código fonte dos programas de extração desses atributos pode ser encontrado em [10]. Não foram realizadas iniciativas para reduzir a dimensionalidade, tendo em vista que estes 365 atributos foram selecionados dos 1.805 atributos utilizados em [10].

#### 4.2 Definição do conjunto de treinamento e teste

A definição dos conjuntos de treinamento e teste foi feita em três passos, de forma a obter subconjuntos de dados adequados para a tarefa de detecção de novidade.

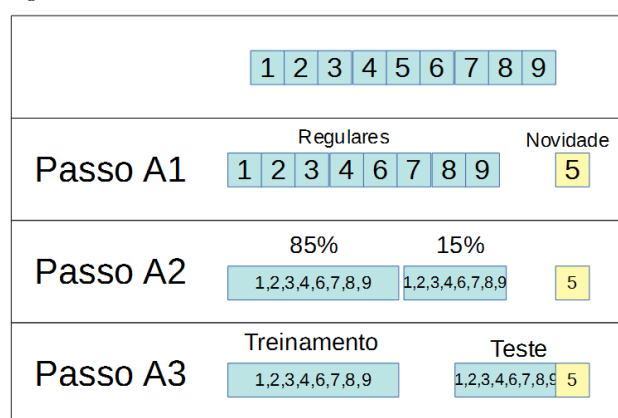
Inicialmente, a atividade de selecionar a família de *malware* para fazer o papel de novidade mostrou-se desafiadora, uma vez que, salvo melhor entendimento, não há uma definição ou método formal para execução dessa tarefa. Seria possível, por exemplo, escolher tanto a família com o menor número de amostras quanto a que tivesse a maior distância em relação aos centroides das outras famílias (considerando que um conjunto de atributos foi selecionado). Para esta pesquisa, resolveu-se adotar como novidade a família com o menor número de amostras.

Assim, no Passo A1, foram selecionadas as amostras pertencentes à família 5 (Simda), apresentada na Tabela 1. A partir deste ponto, foi convencionado indicar esta família como classe **novidade**, enquanto as demais foram reunidas em uma única classe denominada **regular**.

Em seguida, no Passo A2, a classe regular foi dividida em dois grupos, compostos respectivamente por 85% e 15% do total de amostras, por meio de um particionamento extratificado aleatório. Finalmente, no Passo A3, o primeiro grupo foi definido como o conjunto de treinamento (85% das amostras da classe regular), enquanto o conjunto de testes foi definido como a união do segundo grupo (15% das amostras da classe regular) e a classe novidade (Simda).

Como resultado deste particionamento (resultado do Passo 3), nenhuma amostra da classe novidade pertence ao conjunto de treinamento. A relação entre a quantidade de amostras do grupo de treinamento e teste ficou em torno de 6:1. A Figura 2 apresenta os passos descritos, sendo que os números de 1 a 9 representam as 9 famílias de *malware* da Tabela 1.

**Fig. 2 -** Representação do método de partição dos conjuntos de treinamento e teste.



### 4.3 Definição do conjunto de treinamento e validação

Como exposto na Seção 2.2, a detecção de uma novidade não é o mesmo que a detecção de uma anomalia. Enquanto nesta existem amostras para

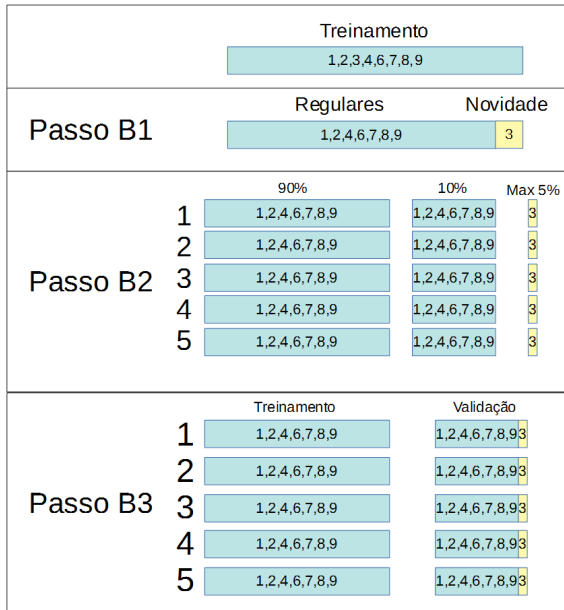
calibrar o processo de aprendizagem de máquina, naquela não há essa possibilidade. Logo, deve-se adaptar o processo de seleção de conjunto de treinamento e validação à tarefa de detecção de novidade, fazendo com que diversas famílias do conjunto de treinamento definido na Seção 4.2 desempenhem o papel de classe novidade no conjunto de validação. Haverá então uma iteração, sendo que cada família do conjunto de treinamento fará o papel de classe novidade. Da mesma forma que na seção anterior, dividiu-se este processo em três passos, como mostra a Figura 3.

No passo B1, foi escolhida uma família do conjunto de treinamento para representar a classe novidade, enquanto o restante das amostras foi utilizado para representar a classe regular. Na Figura 3, a título de exemplo, utilizou-se a família 3 como a classe escolhida para fazer o papel de família novidade. Já no Passo B2, dividiu-se a classe regular em cinco subconjuntos de igual tamanho, utilizando particionamento extratificado aleatório. A ideia de se utilizar cinco subconjuntos é que, durante a fase de treinamento e validação do modelo, o desempenho será o valor da média dos desempenhos obtidos em cada um dos cinco subconjuntos. Em seguida, cada subconjunto foi dividido em dois grupos: o primeiro com 90% das amostras e o segundo com 10% das amostras.

Finalmente, no Passo B3, designou-se o primeiro grupo (90% das amostras) como o conjunto de treinamento. Já o conjunto de validação é formado pela união do segundo grupo criado (10% das amostras) com um conjunto de amostras da família novidade definida no Passo B1 (exemplificado na Figura 3 como família 3), limitando seu volume em 5% da quantidade total do segundo grupo de forma aleatória. Portanto, o conjunto de **validação** tem amostras regulares e amostras novas. Novamente, buscou-se uma relação entre amostras de treinamento e validação próximo a 6:1.

Como cada família fará o papel de novidade, um total de oito experimentos serão realizados, dos quais serão definidos os conjuntos de treinamento/validação, conforme descrito anteriormente.

**Fig. 3** - Método para selecionar o conjunto de treinamento e validação para a tarefa de detecção de novidade. A família 3 foi utilizada como classe novidade.



#### 4.4 Seleção dos parâmetros do classificador

Os hiperparâmetros do modelo foram ajustados considerando, de forma simultânea, o resultado nos oito experimentos de treinamento/validação definidos na Seção 4.3. Assim, criou-se um critério para o aceite de determinado conjunto de hiperparâmetros de um modelo.

Inicialmente, define-se  $P_i$  como um conjunto de hiperparâmetros, em que  $i = \{1, 2, 3 \dots n\}$  e  $n$  é o número de tentativas. Para avaliar o processo de aprendizado a partir desses hiperparâmetros, foram estabelecidas três métricas:

**Porcentagem do Erro de Treinamento (PETr):** erro no conjunto de treinamento, calculado a partir da divisão do número de previsões de que não pertence à classe regular e o total de elementos da classe de treinamento. No conjunto de dados de treinamento há somente elementos da classe regular.

**Porcentagem do Erro de Validação (PEV):** erro no conjunto de validação, calculado a partir da divisão número de equívocos cometidos na predição das amostras do conjunto de validação dividido pelo número total de amostras do conjunto de validação.

O conjunto de validação possui amostras regulares e amostras novidade.

**Porcentagem do Erro de Novidade (PEV<sub>Nov</sub>):** o erro de novidade é definido dividindo o número de equívocos cometidos na predição apenas das amostras da classe novidade do conjunto de validação pelo número total de amostras da classe novidade do conjunto de validação.

Para aceitar um conjunto de parâmetros  $P_i$ , definiu-se o seguinte critério:

$$(PETr < 30\%) \wedge (PEV < 30\%) \wedge (PEV_{Nov} < 40\%)$$

Esse critério deve ser validado considerando a média das métricas PETr, PEV e PEV<sub>Nov</sub> para cada um dos oito experimentos definidos na Seção 4.2. Cabe ressaltar que os limiares percentuais apresentados anteriormente foram estabelecidos após seguidas tentativas.

Caso  $P_i$  atenda ao critério estabelecido, ele é selecionado. Senão, um novo conjunto de parâmetros  $P_{i+1}$  é definido e o processo de seleção de parâmetros é reiniciado. Não houve a pretensão de escolher o melhor modelo possível. O objetivo foi escolher aquele com hiperparâmetros definidos como  $P_i$ , capaz de ser utilizado em todos os oito experimentos. A premissa adotada é que o critério de escolha de hiperparâmetros  $P_i$  é suficiente para generalizar o modelo final e obter um bom resultado para amostras nunca vistas anteriormente.

Finalmente, com o conjunto de hiperparâmetros  $P_i$  foi selecionado, um modelo com todo o conjunto de treinamento original (famílias 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8 e 9) é treinado. Em seguida, o conjunto de teste (família 5) é apresentado para este modelo. Para estimar o desempenho do modelo no conjunto de teste, as seguintes métricas são definidas:

**Porcentagem do Erro de Treinamento (PETr):** erro no conjunto de treinamento, calculado a partir da divisão do número de previsões de que não pertence à classe regular e ao total de elementos da classe de treinamento, conforme apresentado na Figura 2.

**Porcentagem do Erro de Teste (PET):** erro no conjunto de teste, calculado a partir da divisão número de equívocos cometidos na predição das amostras do conjunto de teste dividido pelo número total de amostras do conjunto de validação. O conjunto de teste possui amostras regulares e amostras novidade da família 5.

Porcentagem do Erro de Novidade ( $PET_{Nov}$ ): o erro de novidade, ou seja, família 5, que é definido dividindo o número de equívocos cometidos na predição apenas das amostras da classe novidade do conjunto de teste pelo número total de amostras da classe novidade do conjunto de teste.

## 5. Resultados

Esta seção apresenta os resultados a partir dos hiperparâmetros escolhidos na seção anterior, utilizando os modelos de máquina de vetores de suporte e de misturas gaussianas. Conforme apresentado nas seções 2.3 e 2.4, os modelos de máquina de vetores de suporte e o modelo de misturas gaussianas são utilizados em trabalhos de detecção de anomalia e novidades, apesar da sua abordagem bastante diferente. Assim, a escolha desses modelos se justifica para verificar o comportamento deles em um caso específico na área de *malware*. Cabe ressaltar que o desempenho dos experimentos será avaliado tanto em amostras de famílias previamente identificadas como em amostras nunca antes vistas pelo modelo.

### 5.1 Modelo de máquina de vetores de suporte

Para o modelo SVM, decidiu-se utilizar o *kernel* RBF conforme orientação apresentada em [19]. O restante dos hiperparâmetros possíveis de serem modificados são (i) *outliers*, que definem a quantidade de anomalias do conjunto de treinamento e (ii) *gamma* ( $\gamma$ ), que define o *kernel* escolhido. Como não foi encontrada uma implementação probabilística do *One-ClassSVM*, conforme apresentado em [16], optou-se por utilizar a versão convencional do algoritmo.

Depois, os melhores resultados foram obtidos utilizando *outliers* iguais a 13% e  $\gamma$  igual a 0,01, seguindo o método apresentado na Seção 4.4. Os resultados das métricas para os diversos conjuntos de validação é apresentado na Tabela 2. Em cada linha tem-se a média da métrica para 5 subconjuntos, em que uma das oito famílias faz o papel de novidade (ver Seção 4.3).

Durante a fase de seleção de parâmetros, identifica-se que o pior resultado ocorre quando a família 6 (família *Tracur*, com porcentagem de erro de novi-

dade de 74,18%) é novidade. O possível motivo para isso é que os *malware* da família *Tracur* se diferenciam dos demais por, prioritariamente, serem capazes de redirecionar as pesquisas na *web* do computador infectado, além de serem capazes de baixar e executar arquivos, incluindo outros *malware*, e permitir ações de comando e controle no computador infectado. Assim, os artefatos da família *Tracur* se diferenciam dos demais por serem mais diversificados com relação à capacidade de atividades maliciosas. Com isso, o classificador pode, de forma equivocada, acabar classificando-os em outras famílias.

Observando que o resultado médio das métricas atende aos critérios definidos na Seção 4.4, selecionou-se este conjunto de hiperparâmetros para criar o modelo capaz de considerar todo o conjunto de treinamento descrito na Seção 4.2.

**Tabela 2** - Erro treinamento e validação para SVM

Nome da família	PETr	PEV	PEV <sub>Nov</sub>
Ramnit	13,14%	12,48%	6,08%
Lollipop	13,10%	13,97%	7,08%
Kelihos_ver3	13,21%	12,46%	0,00%
Vundo	13,17%	11,63%	1,41%
Tracur	13,18%	33,99%	74,18%
Kelihos_ver1	13,14%	12,48%	6,08%
Obfuscator.ACY	13,27%	12,61%	3,92%
Gatak	13,19%	16,44%	15,73%
<b>Média:</b>	<b>13,18%</b>	<b>15,86%</b>	<b>13,43%</b>

Em seguida, realizou-se a predição no conjunto de testes e o resultado das métricas neste conjunto é apresentado na Tabela 3. Pode-se observar que o modelo SVM se manteve sólido para detecção de amostras do conjunto regular, mas nota-se uma queda de desempenho na detecção de novidade.

**Tabela 3** - Erro de teste para SVM

Nome da família	PETr	PET	PET <sub>Nov</sub>
Simda	13,17%	17,29%	26,19%

## 5.2 Modelo de misturas gaussianas

Inicialmente, foi utilizado um modelo de misturas gaussianas com apenas uma gaussiana, o que é equivalente a utilizar um modelo de gaussiana simples para detecção de novidade. Diversas tentativas foram realizadas para encontrar o valor de limite de erro ( $\epsilon$ ), utilizando a abordagem descrita na Seção 4.4, na qual valores abaixo desse limiar indicam que a amostra não pertence à classe regular.

Após diversos experimentos, chegou-se a um limiar de erro  $\epsilon = \mu - 0,98\sigma$ , em que  $\mu$  é a média dos logaritmos ponderados das probabilidades para cada amostra de treinamento e  $\sigma$  é o desvio-padrão dos logaritmos ponderados das probabilidades para cada amostra de treinamento. Os resultados das métricas para os diversos conjuntos de validação estão presentes na Tabela 4. Em cada linha, a média da métrica para os cinco subconjuntos é apresentada, em que cada uma das oito famílias fez o papel de novidade.

**Tabela 4** - Erro treinamento e validação para GMM-1

Nome da família	PETr	PEV	PEV <sub>Nov</sub>
Ramnit	31,66%	30,91%	40,50%
Lollipop	21,64%	21,66%	10,97%
Kelihos_ver3	31,52%	32,51%	0,01%
Vundo	28,70%	29,04%	98,12%
Tracur	33,76%	35,16%	38,54%
Kelihos_ver1	28,30%	28,72%	13,31%
Obfuscator.ACY	29,40%	28,79%	88,71%
Gatak	26,25%	27,37%	24,37%
<b>Média:</b>	<b>28,95%</b>	<b>18,97%</b>	<b>39,34%</b>

Observando o resultado médio das métricas, os critérios definidos na Seção 4.4 foram atendidos. As famílias que obtiveram pior resultado foram Vundo e Obfuscator.ACY. O possível motivo para esse erro é que a distribuição dos atributos dessas famílias não pode ser aproximada de uma distribuição gaussiana. Assim, este conjunto de hiperparâmetros foi selecio-

nado, criando-se um modelo que considera todo o conjunto de treinamento e, em seguida, realizou-se a predição no conjunto de testes. Os resultados para o conjunto de testes são apresentados na Tabela 5.

**Tabela 5** - Erro de teste para GMM-1

Nome da família	PETr	PEV	PEV <sub>Nov</sub>
Simda	27,79%	27,91%	19,05%

Pode-se concluir preliminarmente que o modelo com uma gaussiana atendeu à tarefa de detecção de novidade, considerando os critérios utilizados para a seleção de parâmetros utilizada.

De qualquer forma, realizaram-se diversos experimentos variando o número de gaussianas do GMM. Modelos com 2, 4, 8, 16, 32 e 64 gaussianas foram experimentados. A partir de 32 gaussianas, não foi observada nenhuma melhora no resultado do treinamento/validação. Dessa forma, os resultados das métricas para os diversos conjuntos de validação para 32 gaussianas é apresentado na Tabela 6.

**Tabela 6** - Erro treinamento para GMM-32

Nome da família	PETr	PEV	PEV <sub>Nov</sub>
Ramnit	16,00%	30,25%	0,08%
Lollipop	8,57%	20,25%	14,98%
Kelihos_ver3	8,14%	21,69%	0,19%
Vundo	8,54%	18,86%	97,92%
Tracur	11,27%	21,09%	29,97%
Kelihos_ver1	18,04%	27,26%	2,84%
Obfuscator.ACY	9,18%	18,84%	88,77%
Gatak	7,87%	17,74%	26,40%
<b>Média:</b>	<b>10,95%</b>	<b>22,00%</b>	<b>39,33%</b>

Novamente, pode-se identificar uma grande variação na porcentagem de erro de novidade, também observado no caso do GMM-1. Nota-se ainda que a média da porcentagem de erro do modelo com apenas uma gaussiana é próxima à do modelo com 32 gaussianas.

Realizou-se o processo de escolha e seleção de hiperparâmetros para os modelos com 2, 4, 8, 16 e 32 gaussianas e aplicou-se o conjunto de testes em cada um desses modelos. O resultado é apresentado na Tabela 7.

**Tabela 7** - Erro de teste para GMM 2,4,8,16 e 32

GMM	Nome da família	PET <sub>r</sub>	PET	PET <sub>Nov</sub>
2	Simda	17,09%	18,13%	30,95%
4	Simda	27,22%	30,79%	28,57%
8	Simda	26,58%	28,09%	28,57%
16	Simda	21,00%	27,01%	28,57%
32	Simda	15,52%	25,15%	26,19%

Se considerarmos apenas a quantidade de erros na detecção de novidades, tem-se 13 erros para GMM-2, 12 erros (28,57%) para GMM-4, GMM-8 e GMM-16 e 11 erros (26,19%) para GMM-32. Assim, os resultados no treinamento e teste de modelo mostraram o modelo GMM-32 um pouco melhor. Isso era esperado, se considerarmos que, quanto maior o número de gaussianas, melhor o modelo se adequa à distribuição das características.

É interessante observar que o modelo com uma única gaussiana se saiu melhor na detecção de novidade. Ou seja, um modelo que melhor se adapta à distribuição de atributos do conjunto regular não necessariamente é o melhor modelo para detecção de novidades. Ainda, em ambos os modelos (GMM-1 e GMM-32) e durante a fase de seleção de parâmetros, nota-se que os piores resultados são obtidos nas classes 4 (Vundo) e 8 (Gatak) no papel de novidade.

A partir dos resultados apresentados para os modelos SVM, GMM-1 e GMM-32, pode-se concluir que todos os modelos foram adequados para a tarefa de detecção de novidade, considerando os critérios de seleção de parâmetros escolhidos e considerando a

dificuldade na tarefa de detectar amostras nunca vistas pelo modelo (novidade).

Em outras palavras, dizer que o SVM tenha obtido PET<sub>Nov</sub> de 26,19% e o GMM-1, um PET<sub>Nov</sub> 19,05%, é o mesmo que dizer que o SVM e o GMM-1 detectaram 73,81% e 80,95% das novidades, respectivamente. Muito melhor do que não detectar nada.

O modelo utilizando SVM parece ter um potencial maior para obter melhor resultado de detecção de novidade quando comparado ao modelo GMM, mas os modelos mostraram resultados compatíveis neste trabalho.

## 6. Conclusão

A detecção de novidade é uma tarefa complexa – não há uma relação óbvia entre os resultados na fase de seleção de parâmetros (usando conjunto de treinamento e validação) e os resultados na fase de teste (usando conjunto de teste). Assim, neste artigo, utilizou-se dois algoritmos de classificadores (GMM e SVM), que obtiveram um resultado satisfatório para a detecção de novidades. A definição da seleção do conjunto de treinamento, validação e teste, além de critérios de aceite de hiperparâmetros, foi essencial para a obtenção do resultado. O método utilizado para a seleção de parâmetros de cada um dos modelos foi adequado, ainda que seja necessário um estudo mais aprofundado, uma vez que alguns experimentos tiveram resultado ruins durante a fase de seleção de parâmetros (classe novidade Vundo e Gatak para GMM, classe novidade Tracur para SVM).

Como sugestão para trabalhos futuros, propomos a utilização de outros atributos, um aprofundamento sobre os resultados ruins em alguns experimentos na fase de seleção de parâmetros, a utilização de *datasets* com maior quantidade de famílias de *malware*, além do emprego de um classificador SVM de novidades probabilístico, conforme sugerido em [16].

## Referências

- [1] – KASPERKY LABS. Ready... or Not? Balancing future opportunities with future risks. Moscou: Kaspersky Labs, 2017. Disponível em: [https://media.kaspersky.com/documents/business/brfwn/en/The-Kaspersky-Lab-Global-IT-Risk-Report\\_Kaspersky-Endpoint-Security-report.pdf](https://media.kaspersky.com/documents/business/brfwn/en/The-Kaspersky-Lab-Global-IT-Risk-Report_Kaspersky-Endpoint-Security-report.pdf). Acesso em: dd mmm aaaa.

- [2] - ANDERSON, B.; QUIST, D.; NEIL, J.; STORLIE, C.; LANE, T. Graph-based malware detection using dynamic analysis. *Journal in Computer Virology*, v. 7, n. 4, p. 247-258, 2011. DOI: 10.1007/s11416-011-0152-x
- [3] - ANDERSON, B.; STORLIE, C.; LANE, T. Improving malware classification: Bridging the static/dynamic gap. In: *Proceedings of the workshop on security and artificial intelligence*, 5., [S.l.: s.n.], 2012. p. 3-14.
- [4] - KRUCZKOWSKI, M.; SZYNKIEWICZ, E. N. Support vector machine for malware analysis and classification. In: *Proceedings Of The 2014 Ieee/Wic/Acm International joint conferences on Web Intelligence (WI) and Intelligent Agent Technologies (IAT)*. Washington, DC: IEEE Computer Society, 2014. p. 415-420. DOI: 10.1109/WI-IAT.2014.127
- [5] - MANGIALARDO, R. J.; DUARTE, J. C. Integrating static and dynamic malware analysis using machine learning. *IEEE Latin America Transactions*, v. 13, n. 9, p. 3080-3087, 2015.
- [6] - ANDRADE, C. A. B.; MELLO, C. G.; DUARTE, J. C. Malware automatic analysis. In: *2013 BRICS Congress On Computational Intelligence And 11th Brazilian Congress on Computational Intelligence*. [S.l.: s.n.], 2013. p. 681-686.
- [7] - GHARACHEH, M.; DERHAMI, V.; HASHEMI, S.; HAZRATI FARD, S. M. Detection of metamorphic malware based on hmm: A hierarchical approach. *International Journal of Intelligent Systems and Applications*, v. 8, n. 4, p. 18-25, 2016.
- [8] - KONG, D.; YAN, G. Discriminant malware distance learning on structural information for automated malware classification. In: *Proceedings of the 19th acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining*, 19., New York: ACM, 2013. p. 1357-1365. DOI: 10.1145/2487575.2488219
- [9] - CHEN, Z.; ROUSSOPOULOS, M.; LIANG, Z.; ZHANG, Y.; CHEN, Z.; DELIS, A. Malware characteristics and threats on the internet ecosystem. *Journal of Systems and Software*, v. 85, n. 7, p. 1650-1672, 2012. DOI: 10.1016/j.jss.2012.02.015
- [10] - AHMADI, M.; ULYANOV, D.; SEMENOV, S.; TROFIMOV, M.; GIACINTO, G. Novel feature extraction, selection and fusion for effective malware family classification. In: *ACM Conference on Data and Application Security and Privacy (CODASPY)*, 16., 2016. p. 183-194
- [11] - PANCONESI, A.; MARIAN; CUKIERSKI, W. Microsoft Malware Classification Challenge (BIG 2015). [S. l.]: Kaggle, 2015. Disponível em: <https://www.kaggle.com/c/malware-classification>. Acesso em: 17 set. 2018.
- [12] - LIU, L.; WANG, B.-S.; YU, B.; ZHONG, Q.-X. Automatic malware classification and new malware detection using machine learning. *Frontiers of Information Technology & Electronic Engineering*, v. 18, p. 1336-1347.
- [13] CHANDOLA, V.; ARINDAM, B.; VIPIN, K. Anomaly Detection: A Survey. *ACM Computing Surveys*, v. 41, n. 3, p. 1-58.
- [14] - SOLLA, S. A.; LEEN, T. K.; MÜLLER, K.-R. Support vector method for novelty detection. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*, 12., Cambridge: MIT Press, 2000. p. 582-588.
- [15] - SHAWE-TAYLOR J.; ŽLIČAR, B. Novelty Detection with One-Class Support Vector Machines. In: MORLINI, I.; MINERVA, T.; VICHI, M. (Ed.). *Advances in Statistical Models for Data Analysis*. Berlin: Springer, 2015. p. 231-257.
- [16] - CLIFTON, L.; CLIFTON, D. A.; ZHANG, Y.; WATKINSON, P.; TARASSENKO, L.; YIN, H. Probabilistic novelty detection with support vector machines. *IEEE Transactions on Reliability*, v. 63, n. 2, p. 455-467, 2014.
- [17] - RONEN, R.; RADU, M.; FEUERSTEIN, C.; YOM-TOV, E.; AH-MADI, M. Microsoft malware classification challenge. [S. l.: s. n.], 2018.
- [18] - COELHO, L. P. 2013. Mahotas: Open source software for scriptable computer vision. *Journal of Open Research Software*, v. 1, n. 1, 2013.
- [19] - CHANG, C. C. A practical guide to support vector classification, Technical report, n. 5. Taipei: National Taiwan University, 2005.
- [20] - Heightened threat scenario: all the facts in the AV-TEST Security Report 2018/2019. Magdeburg. AVTEST - The Independent IT-Security Institute, 2019. Disponível em: <https://www.av-test.org/en/news/heightened-threat-scenario-all-the-facts-in-the-av-test-security-report-2018-2019/>. Acesso em: 23 ago. 2019.
- [21] - Malware. AVTEST - The Independent IT-Security Institute, 2019. Disponível em: <https://www.av-test.org/en/statistics/malware/>. Acesso em: 10 set. 2019.
- [22] SIKORSKI, M.; HONIG, A. *Practical malware analysis: the hands-on guide to dissecting malicious software*. San Francisco: No Starch Press, 2012.
- [23] SCHÖLKOPF, B.; WILLIAMSON, R.; SMOLA, A.; SHAWE-TAYLOR, J.; PLATT, J. Support vector method for novelty detection. *NIPS*, v. 12. 1999.

# Análise e caracterização de superfícies de titânio em diferentes etapas do processo de silanização

André Aguiar Marques<sup>1</sup>, andre.marques@ime.eb.br, ORCID: 0000-0003-1511-4038

Marcelo Henrique Prado da Silva<sup>1</sup>, marceloprado@ime.eb.br, ORCID: 0000-0002-1182-5345

Álvaro José Boareto Mendes<sup>1</sup>, boareto@ime.eb.br, ORCID: 0000-0003-1432-9045

Carlos Nelson Elias<sup>1</sup>, elias@ime.eb.br, ORCID: 0000-0002-7560-6926

<sup>1</sup>Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

**RESUMO:** As principais modalidades de modificação física, química e topográfica das superfícies dos implantes metálicos já são amplamente estudadas e documentadas. Com os avanços da engenharia tecidual, novas abordagens de substituição ou reparo de órgãos e tecidos são possibilitadas por uma nova era de materiais bioativos com a combinação de biomateriais com biomoléculas. A associação de biomoléculas às superfícies de titânio pode ser realizada por meio do método de silanização, que viabiliza uma ligação covalente entre a biomolécula e o silano ancorado na superfície de titânio previamente funcionalizada. Este estudo propõe a análise, através de microscopia eletrônica de varredura e caracterização em interferometria a laser, de superfícies de titânio em três etapas que compõem o processo de silanização e precedem a associação da biomolécula. Para isso, foram utilizados discos de titânio Grau 4 com 6 mm de diâmetro e 2 mm de espessura e estudadas após as etapas de condicionamento ácido, de condicionamento alcalino e após a incorporação do silano. As superfícies de titânio dos discos das três etapas citadas do processo de preparação foram analisadas e caracterizadas, comparando o padrão de uniformidade e parâmetros de rugosidade e molhabilidade encontrados. Os resultados mostraram que todas as etapas do tratamento mantiveram uma superfície microrrugosa e uniforme, com parâmetros de rugosidade adequados e compatíveis com os parâmetros considerados ideais. No entanto, houve uma variação importante quanto à molhabilidade nos grupos estudados.

**PALAVRAS-CHAVE:** Titânio, biomolécula, silanização, rugosidade, molhabilidade.

**ABSTRACT:** The main methods of physical, chemical and topographical modification of the surfaces of metallic implants have already been widely studied and documented. With advances in tissue engineering, new approaches to replacing or repairing organs and tissues are made possible by a new era of bioactive materials with the combination of biomaterials with biomolecules. The association of biomolecules with titanium surfaces can be carried out through the silanization method, which enables a covalent bond between the biomolecule and the silane anchored on the previously functionalized titanium surface. This study proposes the analysis, through scanning electron microscopy and characterization in laser interferometry, of titanium surfaces in three stages that make up the silanization process and precede the association of the biomolecule. For this, Grade 4 titanium discs with 6 mm in diameter and 2 mm in thickness were used and studied after the acid etching and alkaline etching stages and after the incorporation of silane. The titanium surfaces of the discs from the three mentioned stages of the preparation process were analyzed and characterized, comparing the uniformity standard and roughness and wettability parameters found. The results showed that all stages of the treatment maintained a micro-rough and uniform surface with adequate roughness parameters compatible with the parameters considered ideal. However, there was an important variation regarding wettability in the groups studied.

**KEYWORDS:** Titanium, biomolecule, silanization, roughness, wettability.

## 1. Introdução

A pesar da taxa de sucesso dos implantes de titânio ser da ordem de 95-98%, novas técnicas de modificação de superfície são continuamente desenvolvidas para melhorar a rugosidade, molhabilidade, adesão, fixação de célula, proliferação celular e a osseointegração [1]. Procura-se, com os tratamentos, obter a rugosidade adequada dos implantes para aumentar a ancoragem óssea e melhorar a biocompatibilidade dos implantes [2]. Paralelamente, as alterações na camada de óxidos das

superfícies metálicas, como a do titânio, e as técnicas de funcionalização de superfícies com materiais bioativos têm sido investigadas e desenvolvidas [3]. A funcionalização das superfícies metálicas é bastante relevante na área de biomateriais, uma vez que esta é capaz de controlar a molhabilidade do material [4], a energia de superfície [5], a adsorção de proteínas [6], a liberação de drogas [7] e a interação das células com o implante [8].

A funcionalização da superfície através silanos é um dos métodos mais comumente usados para preparar monocamadas. A principal vantagem do uso de

silanos em superfícies metálicas é a rápida formação de uma ligação covalente entre o substrato e o grupo de ancoragem. Essa ligação covalente estabiliza a monocamada e permite modificações químicas posteriores, como a associação de biomoléculas, sem comprometer a integridade da monocamada [9].

Diante da possibilidade de conferir a atividade antimicrobiana à superfície do titânio, ou até mesmo algum nível de bioatividade em um metal considerado inicialmente inerte, este estudo realizou análise através de Microscópio Eletrônico de Varredura com Fonte de Emissão de Campo (MEV-FEG) e caracterização em Interferometria a laser de superfícies de titânio em três etapas diferentes do processo de silanização, com objetivo de analisar e caracterizar o padrão de uniformidade e parâmetros de rugosidade encontrados.

## 2. Revisão de literatura

diversas modificações da superfície dos implantes metálicos foram desenvolvidas usando métodos subtrativos e aditivos. Entre esses métodos, os mais utilizados são o jateamento de partículas, o ataque ácido e a anodização. Essas técnicas aumentam a rugosidade e melhoram o sucesso clínico, com taxas de cicatrização mais rápidas e potencialmente menores intervalos de tempo para carregamento. No entanto, cada procedimento gera uma superfície rugosa com características topográficas ligeiramente diferentes, mesmo quando possuem valores iguais em suas médias aritméticas de rugosidade (Ra). Além disso, como resultado dessas modificações, a molhabilidade e as características químicas da superfície do implante também são frequentemente alteradas e podem mudar drasticamente a resposta celular inicial a um material implantado [10].

A maior parte dos trabalhos disponíveis na literatura que analisam a influência da rugosidade na osseointegração utilizam, convencionalmente, somente os valores de Ra. Alguns trabalhos correlacionam o valor de Ra com outras propriedades das superfícies, como a molhabilidade, adesão das células *in vitro* e adsorção de proteínas. Além do fato da escolha de Ra como parâmetro de análise da rugosidade não ser justificada nesses trabalhos, a avaliação isolada de um parâmetro

da rugosidade do implante não constitui a análise ideal para sua caracterização, pois superfícies com valores semelhantes de Ra podem apresentar morfologias diferenciadas. Portanto, há necessidade de correlacionar entre si os diversos parâmetros que caracterizam a rugosidade, bem como analisar a interferência com outras propriedades da superfície dos implantes [11].

Os parâmetros para análise e caracterização de rugosidade caracterizam a superfície implantar. No entanto, o papel específico de cada parâmetro da rugosidade na osseointegração ainda não é conclusivo [11]. Uma melhor avaliação da rugosidade e adesão celular pode ser obtida por meio da associação dos valores de pelo menos um parâmetro de altura, um espacial, e um híbrido [12]. A rugosidade da superfície pode ser dividida em três níveis, dependendo da escala dos recursos: topologias macro, micro e nano-dimensionadas [13]. O nível macro é definido para características topográficas como estando na faixa de milímetros a dezenas de microns. Essa escala está diretamente relacionada com a geometria do implante, com parafusos rosqueados e tratamentos de superfície macroporosa dando rugosidade superficial superior a  $10 \mu\text{m}$ . A alta rugosidade resulta em intertravamento mecânico entre a superfície do implante e o osso adjacente. No entanto, um grande risco com alta rugosidade da superfície pode ser um aumento na peri-implantite [14].

A rugosidade micrométrica dos implantes dentários está na faixa de  $1-10 \mu\text{m}$ . Essa faixa de rugosidade maximiza o intertravamento entre o osso mineralizado e a superfície do implante. Nessas superfícies, as irregularidades permitem que células osteogênicas se unam e depositem osso, produzindo a interface osso-implante e por isso considera-se que as microrrugosidades atuam no nível celular da osseointegração [15].

Perfis de superfície na faixa nanométrica desempenham um papel importante na adsorção de proteínas, adesão de células osteoblásticas e na taxa de osseointegração. No entanto, a rugosidade da superfície reproduzível na faixa nanométrica é difícil de produzir com tratamentos químicos. Além disso, a nanotopografia de superfície ideal para adsorção seletiva de proteínas levando à adesão de células osteoblásticas e aposição óssea rápida ainda é desconhecida [14].

Vários métodos foram desenvolvidos para criar uma superfície rugosa e melhorar a osseointegração de implantes dentários de titânio. Esses métodos usam pulverização de plasma de titânio, jateamento com partículas cerâmicas, ataque ácido e anodização [10, 14].

As técnicas de modificação da superfície podem ser utilizadas individualmente, ou combinadas, e podem ser classificadas em três categorias: físicas, químicas e biológicas [2].

Superfícies nano rugosas com características semelhantes às dos receptores e proteínas da membrana celular têm um papel crucial na melhoria do desempenho do implante e da osseointegração. Em uma condição de nanoescala, os receptores de membrana celular, integrinas e proteínas estão envolvidos e melhoram a qualidade geral da osseointegração e outras reações biológicas entre osso e implante [16].

Embora os biomateriais metálicos possam diferir em diversas propriedades físicas e químicas, muitos deles compartilham o potencial de funcionalização da superfície por meio da reatividade da superfície grupos -OH ligados como pontos de ancoragem para a formação de monocamadas densamente empacotadas. A ativação pode ser obtida por ataque a úmido, ataque a seco e ativação por plasma. A superfície terminada por grupos hidroxila torna possível a ligação com outras moléculas por meio de reações de condensação [9].

Diversos grupos funcionais reagem com a hidroxila terminal, levando à formação de camadas conhecidas como *self assembled monolayers* (SAMs) ou monocamadas auto-organizadas. Por meio de interações químicas específicas, moléculas orgânicas podem se organizar espontaneamente sobre vários tipos de superfície [17].

A preparação de monocamadas de silano a partir de solução é padronizada atualmente para obter de forma mais reprodutível e rápida SAM's de silano através da imersão de um metal em uma solução do precursor APTES (3-aminopropil) trietoxissilano em diferentes concentrações e temperaturas. O APTES é comumente usado para obter superfícies terminadas em amina que são aplicadas para promover adesão de proteínas e crescimento celular em implantes biológicos [9].

A reação tem o potencial de formar uma superfície modificada ou funcionar como um intermediário na ligação de ligantes orgânicos a superfícies de titânio [4].

### 3. Materiais e métodos

o preparo das amostras foi realizado em conjunto no laboratório de Biomateriais – SE/8 e Laboratório de Processos Biotecnológicos – SE/5 do Instituto Militar de Engenharia, RJ.

Um total de 15 amostras foi dividido em três grupos com cinco discos de titânio grau 4, medindo 6X2 mm e inicialmente com superfície polida. Os grupos formados foram: titânio após a etapa de condicionamento (Ti-Etc), titânio após a etapa de condicionamento alcalino (Ti-Alk) e o titânio após a etapa de silanização (Ti-Sil).

Todos os discos foram submetidos ao mesmo condicionamento ácido com solução composta por  $H_2SO_4$  / HF / HCl e para formar uma superfície microrrugosa uniforme semelhante à microtextura dos implantes osseointegráveis disponíveis no mercado, sendo esta, portanto, a superfície inicial de trabalho para o presente estudo. Após esse tratamento, os discos foram lavados com água destilada, secos em  $N_2$ .

As amostras dos grupos Ti-Alk e Ti-Sil foram ativadas com tratamento alcalino por imersão em 20 ml de solução com NaOH 5M durante 8h à temperatura de 60°C para a formação dos grupos funcionais hidroxila ( $OH^-$ ) necessários para a união covalente entre o titânio e o silano.

Depois dessa etapa, foram lavadas com água destilada por 30 min e secas individualmente em  $N_2$ . Apesar dessa etapa tornar possível a ligação do silano na superfície do titânio, ela tem como possível consequência a formação de uma camada de titanato de sódio amorfa na superfície do metal, que se imersa em fluido com condições iônicas ideais, poderá sofrer cristalização em apatita, conferindo, assim, algum nível de bioatividade ao material.

Para o procedimento de silanização, são necessários um silano, uma base e um solvente. O silano escolhido foi o CPTES de 3(cloropropil)-trietoxissilano, devido à presença do grupo terminal cloro em sua porção organofuncional, o que facilita a interação do silano com o peptídeo a um pH de 11. O solvente escolhido foi o pentano anidro e a base a N,N-diisopropiletilamina (DIPEA). Todos os reagentes foram adquiridos da Sigma-AldrichBrasil.

Para a criação do grupo Ti-Sil, cinco amostras previamente ativadas foram imersas em solução contendo 7 ml de pentano anidro, 1,2 ml de 3(cloropropil)-trietoxissilano e 0,6ml da base N,N-diisopropiletilamina (DIPEA) sob uma atmosfera saturada de N<sub>2</sub> durante 1h. Ao final desse período, as amostras foram lavadas três vezes com água destilada e secas com nitrogênio.

Amostras dos três grupos foram analisadas por Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e caracterizadas em Interferometria a laser Zygo no Laboratório de Biomateriais do Instituto Militar de Engenharia (IME).

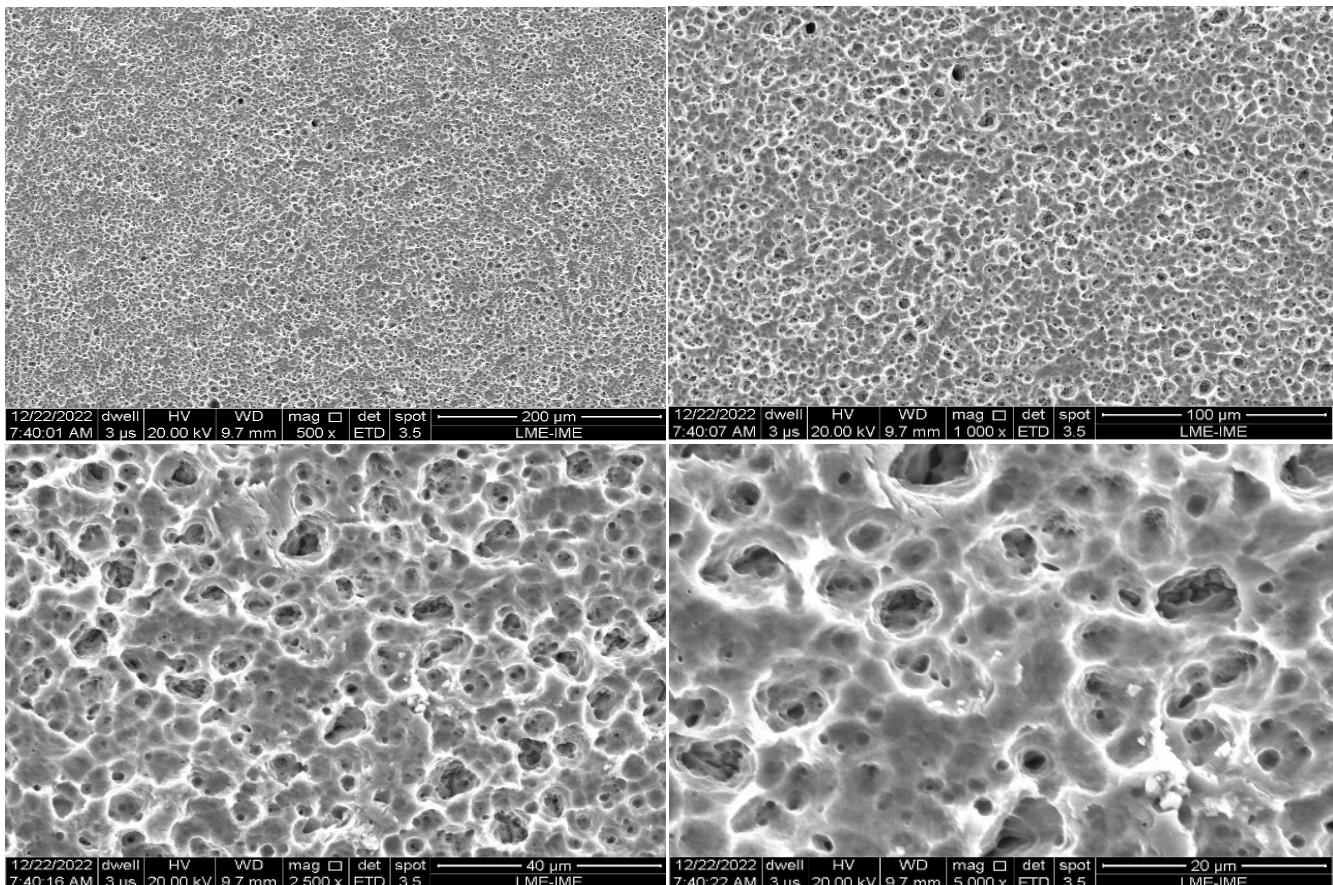
A molhabilidade foi quantificada pela medida do ângulo de contato com água destilada. Neste trabalho, foi empregado o goniômetro FTA100 (First Ten Angstroms, Portsmouth, VA, USA). Quanto menor o ângulo de contato, maior a molhabilidade. A redução do ângulo de contato indica que a superfície é mais hidrofílica.

## 4. Resultados e discussão

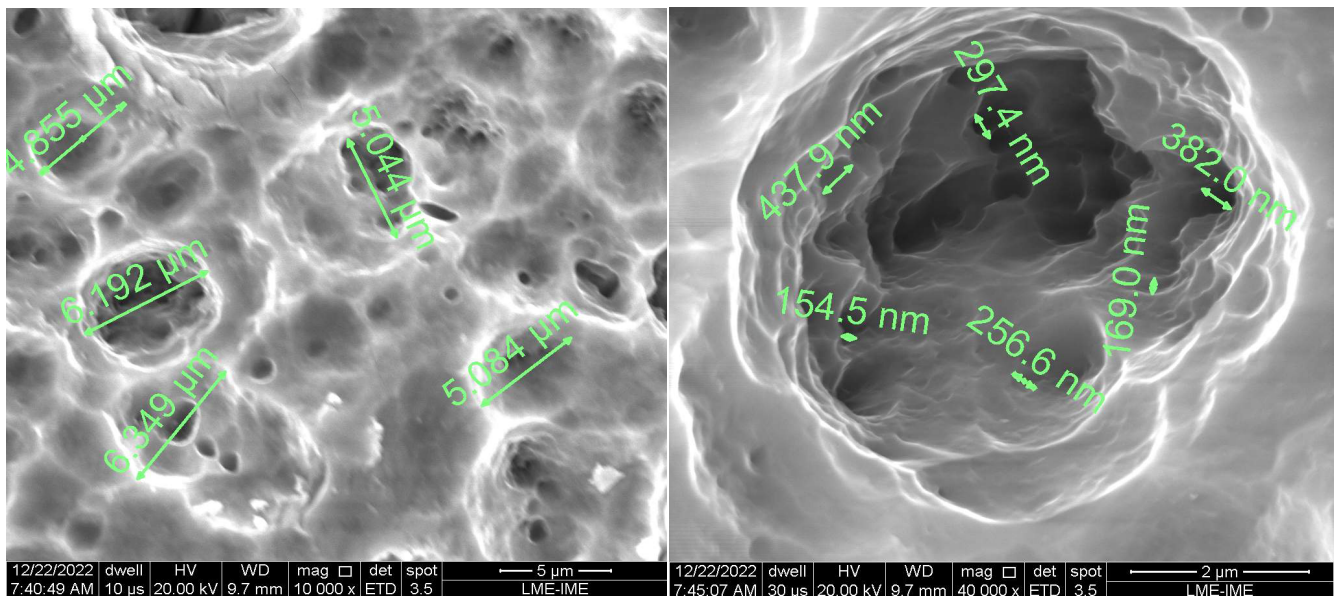
após o condicionamento ácido com solução composta por H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> / HF / HCl, todos os discos formaram uma superfície microrrugosa com parâmetro Ra aproximadamente entre 1 e 2 µm, semelhante à microtextura dos implantes osseointegráveis disponíveis no mercado, conforme verificado nas **figuras 1 e 2**, o que confirmou a uniformidade do tratamento realizado ao longo de toda a sua extensão.

A superfície das amostras ativadas através do condicionamento com NaOH (**figura 3**) e das amostras submetidas à incorporação do silano (**figura 4**) também foram analisadas em MEV/FEG e caracterizadas por meio do Interferômetro a laser Zygo, confirmando a uniformidade da microtextura superficial e parâmetros de rugosidade alcançados após o condicionamento ácido.

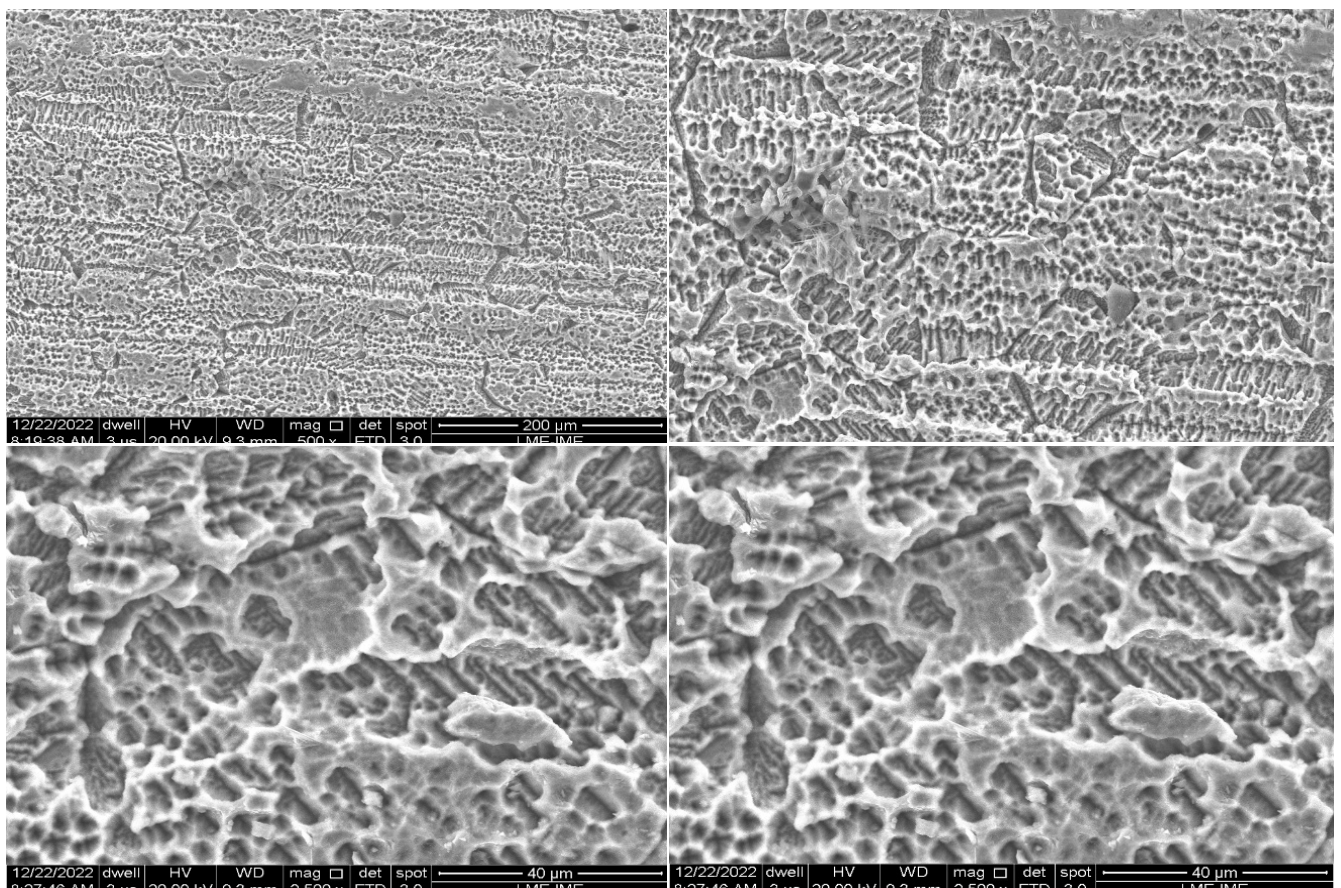
**Fig. 1** - Micrografia (MEV/FEG) da superfície da amostra de titânio do grupo Ti-Etc após condicionamento ácido. Aumento de 500X, 1000X, 2500X, 5000X.



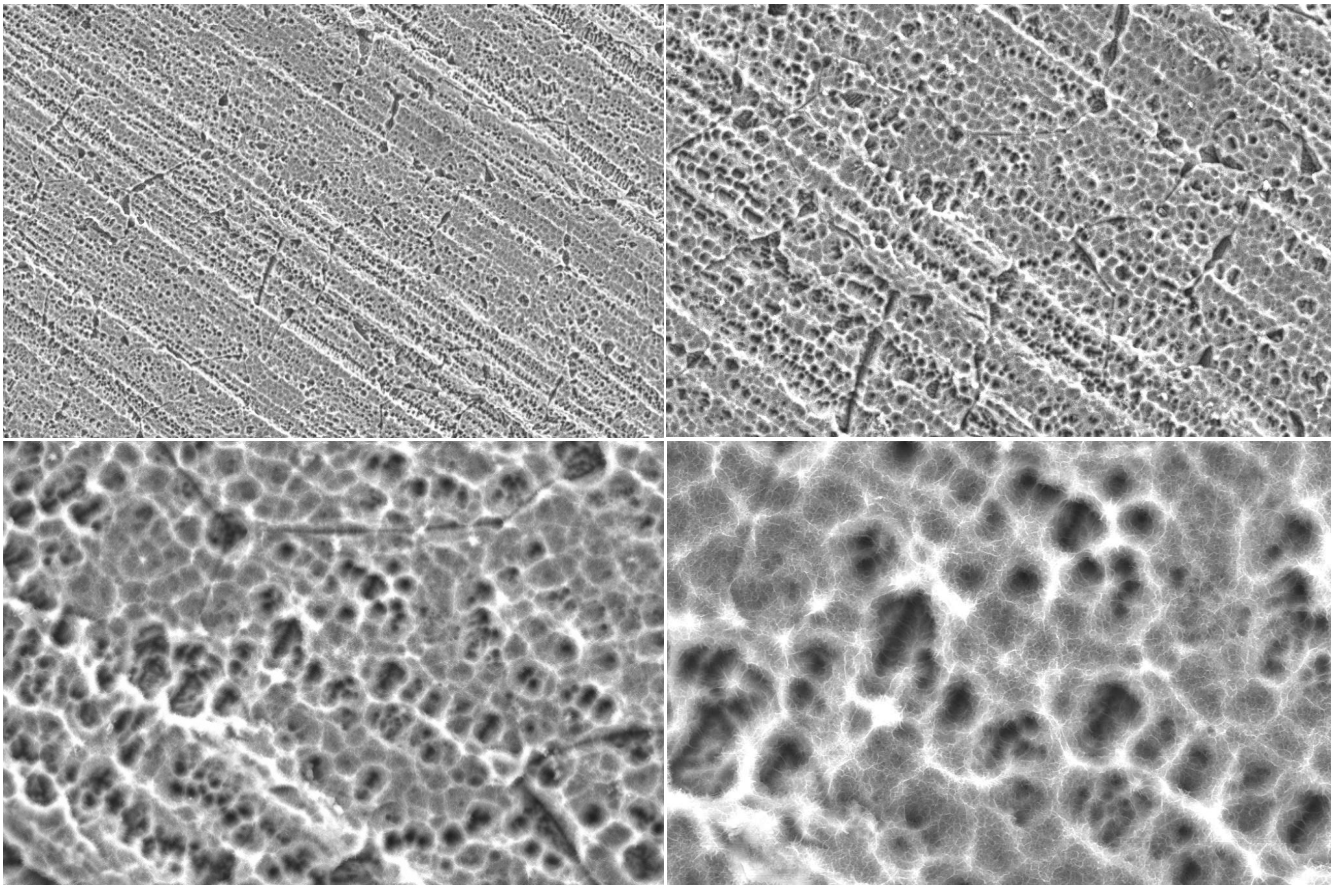
**Fig. 2** - Micrografia (MEV/FEG) da superfície da amostra de titânio do subgrupo Ti-Etc após condicionamento ácido. Aumento de 10.000X, 40.000X.



**Fig. 3** - Micrografia (MEV/FEG) da superfície da amostra de titânio do grupo Ti-Alk após condicionamento alcalino. Aumento de 500X, 1000X, 2500X, 5000X.



**Fig. 4** - Micrografia (MEV/FEG) da superfície da amostra de titânio do grupo Ti-Sil após silanização. SEM/FEG. Aumento de 500X, 1000X, 2500X, 5000X.



A análise em MEV/FEG dos subgrupos Ti-Alk e Ti-Sil em maior aumento, especialmente em 40.000X (figuras 5 e 6), evidenciou superfícies com características nanométricas ao longo da superfície, o que pode significar uma melhor adsorção de proteínas e um aprimoramento na osseointegração de implantes

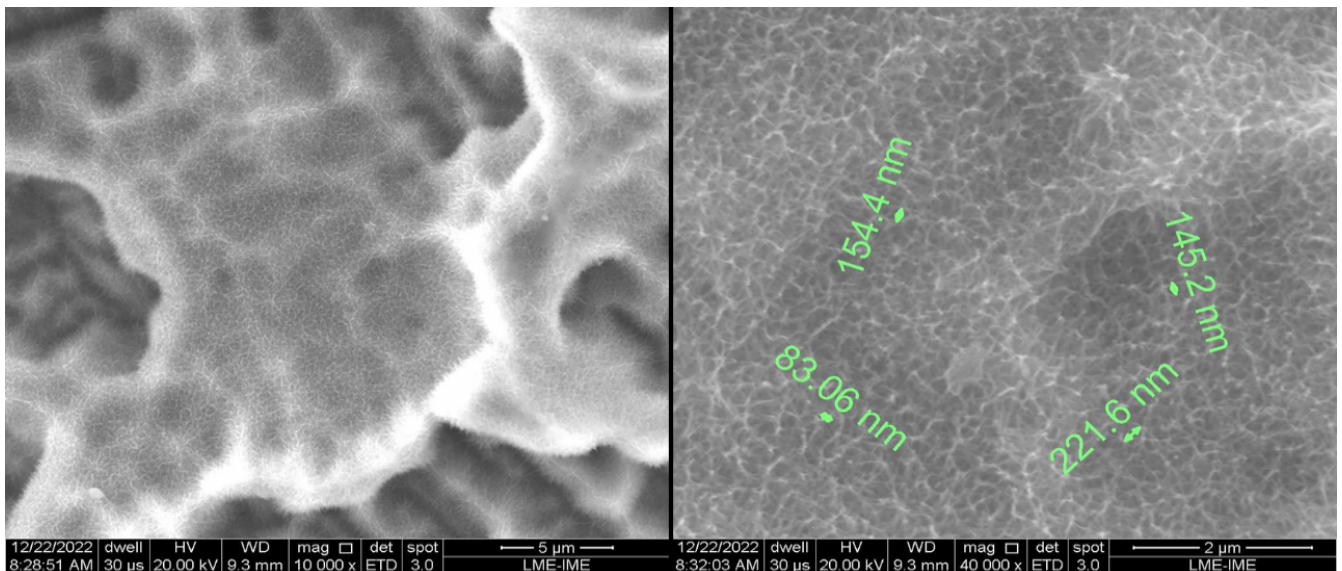
A caracterização das superfícies em Interferômetro a laser Zygo, das amostras dos três grupos estudados (figuras 7, 8, 9; tabelas 1, 2, 3), mostrou uma superfície com parâmetros de rugosidade compatíveis com os implantes osseointegráveis comerciais, inclusive com média do parâmetro Ra entre 1 e 2  $\mu\text{m}$ .

Pode-se observar que não houve diferença significativa entre as médias dos parâmetros de rugosidade entre os grupos estudados. Entretanto, verificou-se diferença estatística entre os demais grupos.

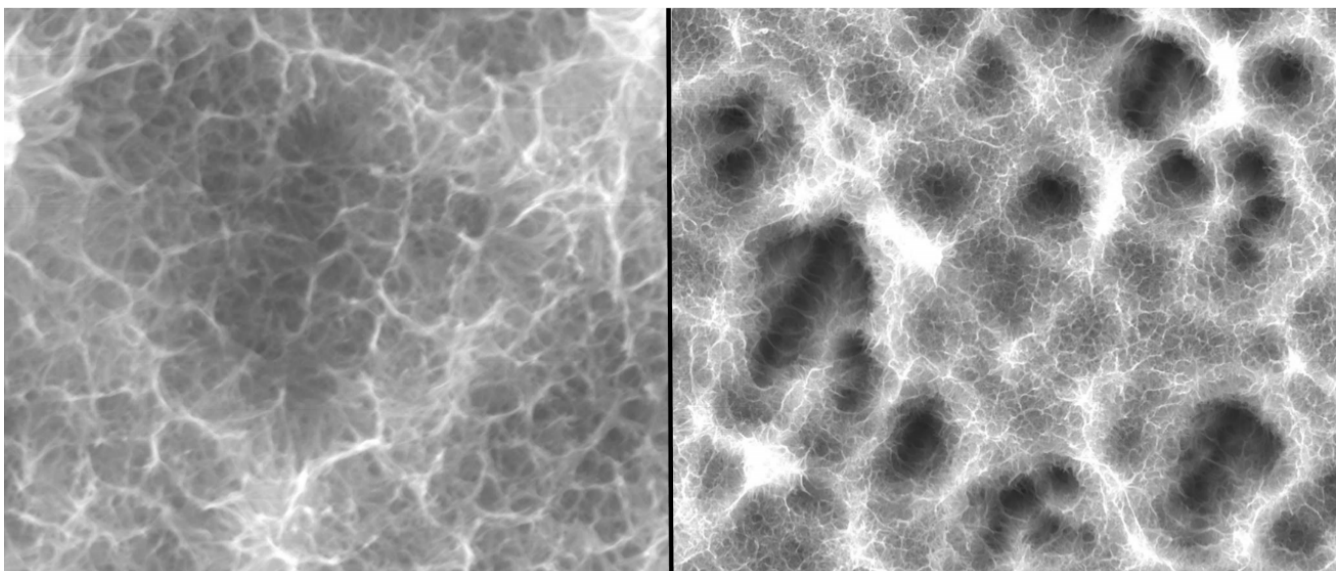
Um estudo comparativo em amostras de titânio com superfície anodizadas, com ataque ácido e fluoreto sobre o valor de Ra e o ângulo de contato, concluíram que os ângulos de contato foram influenciados por Ra nos grupos de amostras. Apesar da pequena diferença entre Ra dos grupos, a molhabilidade apresentou a tendência de reduzir com o aumento de Ra [18].

Diferentes tratamentos aplicados com objetivo de aumentar a rugosidade superficial e a molhabilidade das amostras de titânio, e analisados com medidas de perfilometria e ângulo de contato, mostraram que a molhabilidade não é o parâmetro crítico para adesão e proliferação celular, e que a topografia da superfície desempenha o papel principal [19].

**Fig. 5** - Micrografia (MEV/FEG) da superfície da amostra de titânio do grupo Ti-Sil após condicionamento alcalino. SEM/FEG. Aumento de 10.000X, 40.000X.



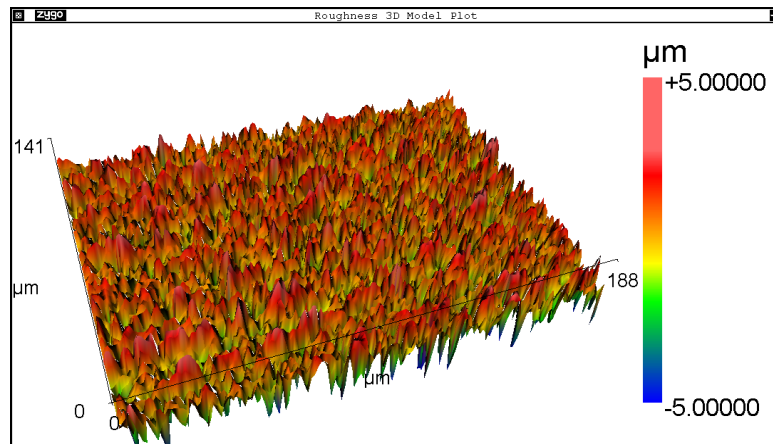
**Fig. 6** - Micrografia da superfície da amostra de titânio do subgrupo Ti-Sil após silanização. SEM/FEG. Aumento de 10.000X, 40.000X.



No presente estudo, os maiores valores médios de Ra foram encontrados no grupo Ti-Alk, ou seja, após a etapa de tratamento alcalino, quando comparado com os outros dois subgrupos. No entanto, diferente

do relatado por Coutinho e Elias [18], o grupo que apresentou maiores valores médios de Ra também apresentou menores valores de ângulo de contato e maior molhabilidade.

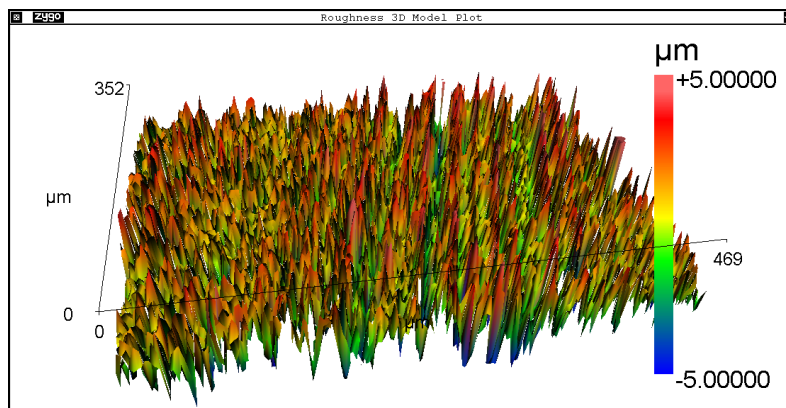
**Fig. 7** - Imagem 3D da microtopografia da superfície da amostra após condicionamento ácido – Interferômetro Zygo



**Tab. 1** - Parâmetros de rugosidade em cinco regiões diferentes na superfície da amostra após condicionamento ácido – Interferômetro Zygo

	Ra	Rq	Picos	Valles	Densidade picos	Densidade vales	Distância picos
	$\mu\text{m}$	$\mu\text{m}$			$1/\text{mm}^2$	$1/\text{mm}^2$	$\mu\text{m}$
1	1,013	1,380	84	480	3.185,323	18.201,848	17,718
2	0,990	1,303	85	457	3.223,391	17.330,467	17,613
3	1,002	1,313	87	464	3.299,397	17.596,782	17,409
4	1,105	1,453	86	403	3.261,101	15.281,670	17,511
5	1,083	1,424	92	418	3.491,314	15.862,711	16,924
Média	1,038	1,374	87	444	3.292,105	16.854,696	17,435
Desvio	0,052	0,066	3	32	119,188	1.229,869	0,308

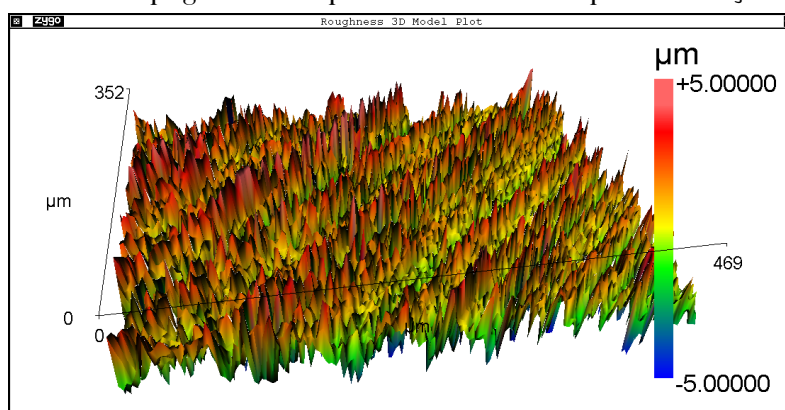
**Fig. 8** - Imagem 3D da microtopografia da superfície da amostra após condicionamento alcalino – Interferômetro Zygo



**Tab. 2** - Parâmetros de rugosidade em cinco regiões diferentes na superfície da amostra após condicionamento alcalino – Interferômetro Zygo

	Ra	Rq	Picos	Valles	Densidade picos	Densidade vales	Distância picos
	µm	µm			1/mm <sup>2</sup>	1/mm <sup>2</sup>	µm
1	1,497	1,881	335	653	2.074,292	4.043,321	21,957
2	1,463	1,848	484	922	3.133,691	5.969,552	17,864
3	1,457	1,842	713	1374	4.980,133	9.597,060	14,170
4	1,522	1,895	396	569	2.429,805	3.491,310	20,287
5	1,550	1,927	295	626	1.797,977	3.815,368	23,583
Média	1,498	1,879	445	829	2.883,180	5.383,322	19,572
Desvio	0,039	0,035	166	334	1274,508	2.546,225	3,687

**Fig. 9** - Imagem 3D da microtopografia da superfície da amostra após silanização – Interferômetro Zygo



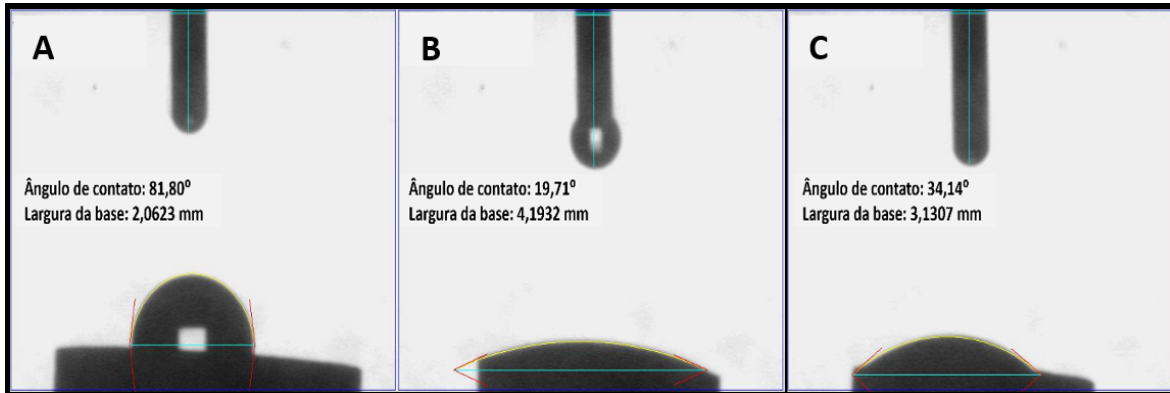
**Tab. 3** - Parâmetros de rugosidade em cinco regiões diferentes na superfície da amostra após silanização – Interferômetro Zygo

	Ra	Rq	Picos	Valles	Densidade picos	Densidade vales	Distância picos
	µm	µm			1/mm <sup>2</sup>	1/mm <sup>2</sup>	µm
1	1,231	1,619	621	620	3.769,170	3.763,101	16,288
2	1,157	1,554	676	634	4.101,644	3.846,808	15,614
3	1,365	1,828	667	498	4.053,691	3.026,594	15,706
4	1,255	1,664	765	551	4.641,971	3.343,433	14,677
5	1,213	1,622	617	651	3.743,953	3.950,265	16,343
Média	1,244	1,657	669	591	4.062,086	3.586,040	15,726
Desvio	0,076	0,103	60	64	362,253	388,538	0,673

A molhabilidade quantificada pela medida do ângulo de contato com água destilada evidenciou menores valores nas superfícies dos grupos Ti-Alk e Ti-Sil,

fazendo com que as superfícies estudadas dessas duas etapas apresentem características mais hidrofílicas em comparação com as superfícies do subgrupo somente com o tratamento ácido (**figura 10**).

**Fig. 10** - Molhabilidade das amostras dos grupos Ti-Etc (A), Ti-Alk (B) e Ti-Sil (C).



## 5. Conclusão

De acordo com os resultados encontrados, pode-se concluir que:

- Não houve diferença significativa entre as médias dos parâmetros de rugosidade entre as amostras com superfície nos três grupos estudados;
- As amostras de todos os grupos estudados apresentaram valores de rugosidade média, compatíveis com os parâmetros recomendados em estudos anteriores;
- As amostras do grupo Ti-Alk apresentaram molhabilidade significativamente superior às

amostras com apenas o condicionamento ácido;

- Nas amostras estudadas, não foi observada a tendência da redução linear da molhabilidade com o aumento da rugosidade;
- As características encontradas nas superfícies do titânio após etapas de condicionamento alcalino e silanização mantêm parâmetros de rugosidade adequados e sugerem ainda uma melhora na molhabilidade, conferindo maior hidroflicidade a essas superfícies, quando comparadas ao grupo inicial de trabalho usado como referência (Ti-Etc).

## Referências

- JEMAT, A.; GHAZALI, M. J.; RAZALI, M.; OTSUKA, Y. Surface modifications and their effects on titanium dental implants. **BioMed Research International**, [s. l.], 2015. <https://doi.org/10.1155/2015/791725>
- LIU, Y.; RATH, B.; TINGART, M.; ESCHWEILER, J. Role of implants surface modification in osseointegration: A systematic review. **Journal of Biomedical Materials Research Part A**, [s. l.], v. 108, n. 3, p. 470-484. <https://doi.org/10.1002/jbm.a.36829>
- ZAVAGLIA, C. A. C.; PRADO-SILVA M. H. **Biomateriais**. São Paulo: Elsevier Inc., 2016.
- PESEK, J. J.; MATYSKA, M. T. Methods for the modification and characterization of oxide surfaces. **Interface Science**, [s. l.], v. 5, p. 103-117, 1997. <https://doi.org/10.1023/A:1008648923962>
- RYU, D. Y.; SHIN, K.; DROCKENMULLER, E.; HAWKER, C. J.; RUSSELL, T. P. A generalized approach to the modification of solid surfaces. **Science**, [s. l.], v. 308, n. 5719, p. 236-239, 2005. <https://doi.org/10.1126/science.1106604>
- LIU, X.; CHU, P. K.; DING, C. Surface nano-functionalization of biomaterials. **Materials Science and Engineering: R: Reports**, [s. l.], v. 70, n. 3-6, p. 275-302, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.mserr.2010.06.013>

- [7] ZAFAR, M. S.; FAREED, M. A.; RIAZ, S.; LATIF, M.; HABIB, S. R.; KHURSHID, Z. Customized therapeutic surface coatings for dental implants. **Coatings**, [s. l.], v. 10, n. 6, p. 568, 2020. <https://doi.org/10.3390/coatings10060568>
- [8] SAFONOV, V.; ZYKOVA, A.; SMOLIK, J.; ROGOWSKA, R.; LUKYANCHENKO, V.; KOLESNIKOV, D. Modification of implant material surface properties by means of oxide nano-structured coatings deposition. **Applied Surface Science**, [s. l.], v. 310, [s. l.], p. 174-179, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.04.110>
- [9] PUJARI, S. P.; SCHERES, L.; MARCELIS, A. T.; ZUILHOF, H. Covalent surface modification of oxide surfaces. **Angewandte Chemie International Edition**, [s. l.], v. 53, n. 25, p. 6322-6356, 2014. <https://doi.org/10.1002/anie.201306709>
- [10] HOTCHKISS, K. M.; SOWERS, K. T.; OLIVARES-NAVARRETE, R. Novel in vitro comparative model of osteogenic and inflammatory cell response to dental implants. **Dental Materials**, [s. l.], v. 35, n. 1, p. 176-184, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.dental.2018.11.011>
- [11] LEITE, G. B.; FONSECA, Y. R.; GOMES, A. V.; ELIAS, C. N. Relação entre os parâmetros de rugosidade 3D e a molhabilidade do titânio com grãos micrométricos e sub-micrométricos. **Revista Matéria**, Rio de Janeiro, v. 25, n. 2, 2020. <https://doi.org/10.1590/S1517-707620200002.1055>
- [12] WENNERBERG, A.; ALBREKTSSON, T. Effects of titanium surface topography on bone integration: a systematic review. **Clinical oral implants research**, [s. l.], v. 20, p. 172-184, 2009. <https://doi.org/10.1111/j.1600-0501.2009.01775.x>
- [13] MATOS, G. R. M. Surface roughness of dental implant and osseointegration. **Journal of Maxillofacial and Oral Surgery**, [s. l.], v. 20, p. 1-4, 2021. <https://doi.org/10.1007/s12663-020-01437-5>
- [14] LE GUÉHENNEC, L.; SOUEIDAN, A.; LAYROLLE, P.; AMOURIQ, Y. Surface treatments of titanium dental implants for rapid osseointegration. **Dental Materials**, [s. l.], v. 23, n. 7, p. 844-854, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.dental.2006.06.025>
- [15] WENNERBERG, A.; ALBREKTSSON, T.; ANDERSSON, B.; KROL, J. J. A histomorphometric study of screw-shaped and removal torque titanium implants with three different surface topographies. **Clinical Oral Implants Research**, [s. l.], v. 6, n. 1, p. 24-30, 1995. <https://doi.org/10.1034/j.1600-0501.1995.060103.x>
- [16] LI, J.; ZHOU, P.; ATTARILAR, S.; SHI, H. Innovative surface modification procedures to achieve micro/nano-graded Ti-based biomedical alloys and implants. **Coatings**, [s. l.], v. 11, n. 6, p. 647, 2021. <https://doi.org/10.3390/coatings11060647>
- [17] FREIRE, R. S.; PESSOA, C. A.; KUBOTA, L. T. Emprego de monocamadas auto-organizadas no desenvolvimento de sensores eletroquímicos. **Química Nova**, [s. l.], v. 26, n. 3, p. 381-389, 2003. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422003000300016>
- [18] COUTINHO, M. P.; ELIAS, C. N. Rugosidade e molhabilidade do titânio usado em implantes dentários com superfícies tratadas. **Revista Brasileira de Odontologia**, Rio de Janeiro, v. 66, n. 2, p. 234-238, 2010. <http://dx.doi.org/10.18363/rbo.v66n2.p.234>
- [19] PORRELLI, D.; MARDIROSSIAN, M.; CRAPISI, N.; URBAN, M.; ULIAN, N. A.; BEVILACQUA, L.; MGLIONE, M. Polyetheretherketone and titanium surface treatments to modify roughness and wettability—Improvement of bioactivity and antibacterial properties. **Journal of Materials Science & Technology**, [s. l.], v. 95, p. 213-224, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.04.023>

# Fabricação de superfícies via manufatura aditiva – deposição por energia direcionada (MA-DED) com pó de aço ferramenta H13 atomizado no Brasil

Rafael Ramos<sup>1</sup>, Naiara V. Le Sénéchal<sup>1</sup>, Helder P. Vicente<sup>2</sup>, Paulo P. O. L. Dyer<sup>2</sup>, Andersan S. Paula<sup>1</sup> e Getúlio Vasconcelos<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto Militar de Engenharia - IME, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais (PPGCEM), Rio de Janeiro, RJ, Brasil

<sup>2</sup>Instituto de Estudos Avançados (IEAv), Divisão de Fotônica, São José dos Campos, SP, Brasil

\*ramos\_rr@ime.eb.br

**Resumo:** Pó de aço H13, pela primeira vez atomizado em água em uma empresa brasileira, foi depositado por manufatura aditiva (MA) via deposição por energia direcionada (DED), sobre chapa laminada de aço microligado. Este estudo objetivou avaliar os aspectos microestruturais, composicionais e mecânicos ao longo da seção transversal das camadas de depósitos formadas, como também na interface substrato-primeira camada, por meio de microscopia óptica e eletrônica de varredura, assim como análise da microdureza. As deposições resultaram em uma morfologia com grãos colunares próximo ao substrato (crescimento epitaxial) e uma redução da extensão colunar, acompanhada de mudanças na microdureza, em áreas reaquentadas nas interseções decorrentes do empilhamento de camadas, cuja sobreposição envolveu a refusão parcial, e o tratamento térmico in situ do volume adjacente às zonas refundidas. Adicionalmente, verificou-se uma diluição química e geométrica com profundidade adequada na interface primeira camada-substrato, garantindo a ancoragem do depósito no substrato.

**PALAVRAS-CHAVE:** Manufatura Aditiva; Deposição Por Energia Direcionada; Aço Ferramenta H13; Microestrutura; Diluição.

**Abstract:** H13 steel powder, for the first-time water atomized in a Brazilian company, was deposited through Direct Energy Deposition (DED) additive manufacturing (AM) over a microalloyed hot rolled steel sheet. This study aimed to evaluate microstructural, compositional, and mechanical aspects along deposited layers cross section, as well as at the substrate-first layer interface, using optical and scanning electron microscopy, as well as microhardness analysis. The depositions resulted in a morphology with columnar grains close to the substrate (epitaxial growth) and a reduction in columnar extension, accompanied by changes in microhardness, in reheated areas at the intersections derived from layers stacking, which overlap involved partial layer remelting, and the in-situ heat treatment of remelted zones adjacent volume. In addition, adequate geometric and chemical dilution depth at the first layer-substrate interface anchoring the deposit to the substrate was observed.

**KEYWORDS:** Additive Manufacturing; Direct Energy Deposition; H13 Tool Steel; Microstructure; Dilution.

## 1. Introdução

O aço H13, amplamente definido em normas internacionais AISI/SAE, cuja classificação e composição química (vide Tabela 1) foi recepcionado pela Norma ABNT NBR NM 122-1 [1], é muito útil na fabricação de mol-

des e matrizes para fundição e injeção, devido à estabilidade de suas propriedades em alta temperatura [2, 3, 4]. Porém, os métodos tradicionais de fabricação tomam bastante tempo, são caros [2] e dependem de uma sequência com diversos passos de fabricação mecânica e tratamentos térmicos [4].

**Tabela 1 – Composição química do aço H13**

	Elementos (% em peso)							
	C	Mn	Si	Cr	Mo	V	P	S
Mín	0,32	0,20	0,80	4,75	1,10	0,80	-	-
Máx	0,45	0,50	1,20	5,50	1,75	1,20	0,03	0,03

Fonte: ABNT NBR NM 122-1 [1].

A manufatura aditiva (MA), aí incluída a deposição por energia direcionada (DED), está ganhando a atenção da indústria de ferramental em virtude de suas potencialidades para fabricar peças com geometrias customizadas, complexos sistemas de refrigeração e materiais com gradiente funcional (“*functionally graded materials*” – FGM) [2, 5]. Dentre as técnicas de MA, a DED é capaz de produzir peças de maior dimensão [6] com uso de braços robóticos que garantem liberdade de movimento em variadas direções [7]. Entretanto, compreender as peculiaridades do processo e suas relações com as propriedades das peças produzidas é um desafio [2, 7].

Partes produzidas por MA/DED normalmente apresentam uma estrutura celular, com grãos equiaxiais em áreas reaquecidas (interseção de camadas) e morfologia de grãos colunares nas porções inferiores (crescimento epitaxial), em função dos gradientes de temperatura e do fluxo de calor durante o processo, com diferentes propriedades associadas a cada uma dessas regiões [3].

A deposição de trilhas lateral ou verticalmente superpostas pode levar a zonas refundidas ou ao menos termicamente afetadas (ZTA), nas quais tratamentos térmicos podem ocorrer [8]. Por sua vez, a fusão na deposição também gera uma profundidade de diluição camada-camada ou camada-substrato garantindo a ligação física entre estas, bem como sua interação química. Tal situação é influenciada pelos parâmetros de processo, pela convecção nas poças de fusão e pela solubilidade entre os elementos (principalmente na interface camada-substrato) [9].

Assim, o propósito deste estudo foi avaliar, a partir do seccionamento transversal de amostras fabricadas por MA/DED com densidade de energia fixa, as interações entre as primeiras camadas de um depósito e o substrato.

## 2. Material e Métodos

O material em estudo para a fabricação por MA/DED deste trabalho é um pó de aço H13 atomizado em água, até onde se sabe pela primeira vez produzido em uma empresa brasileira [10].

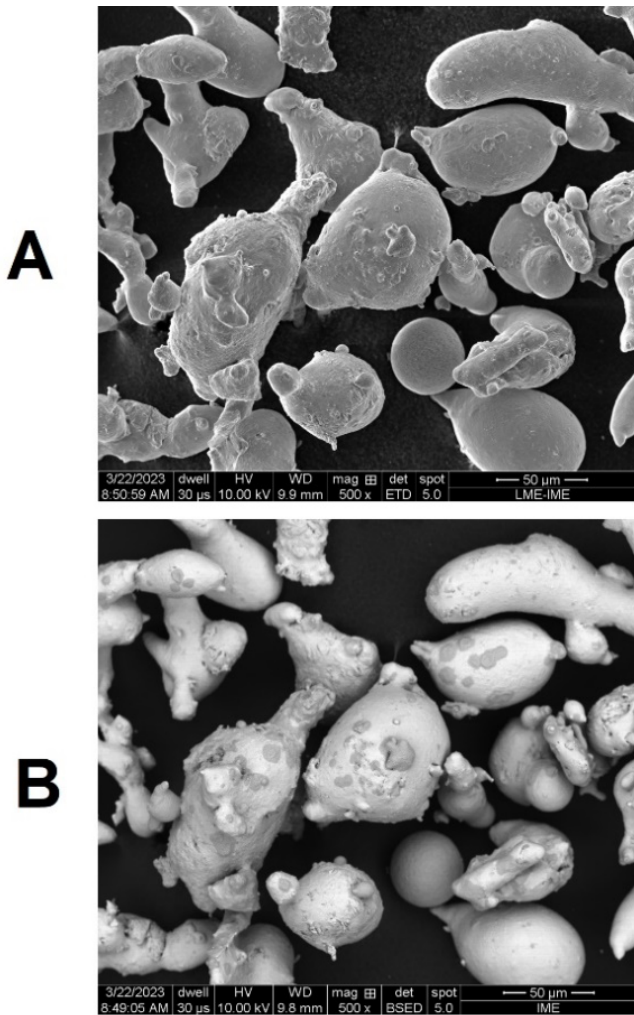
O material foi utilizado em uma tentativa de estimular a independência tecnológica nacional e reduzir custos, se considerados os altos preços envolvidos na importação de tal pó fabricado por atomização a gás em empresas no exterior.

Antes de ser processado no equipamento de MA/DED, tal pó foi peneirado para estar entre 53  $\mu\text{m}$  e 150  $\mu\text{m}$  (peneiras Mesh #270 e #100) e teve suas partículas analisadas por meio de interpretação de micrografia com uso do ImageJ gerando resultados de  $D_{50} = 68 \mu\text{m}$  e  $D_{90} = 128 \mu\text{m}$ . Além disso, a morfologia do pó se mostrou irregular, com algumas partículas esféricas em meio a diversas outras com formato de pêssego (“*pear like*”) [11], conforme ilustrado na Figura 1, aspectos que aparentemente não comprometeram o fluxo de alimentação ou mesmo a densificação da deposição no sistema MA/DED.

As deposições foram realizadas sobre substratos de aço com baixo carbono, com teor relevante de Manganês e microadição de Molibdênio, cuja composição pode ser vista na Tabela 2 [12], em um laboratório de fabricação do Instituto de Estudos Avançados (IEAv), órgão do Centro Tecnológico da Aeronáutica (CTA) e parceiro em projetos do Instituto Militar de Engenharia (IME). Utilizou-se um aparato produtivo não-proprietário, ilustrado na Figura 2, resultado da integração de diversos componentes cuja parametrização inicial foi discutida em outro trabalho [10], em mais uma tentativa de estímulo à independência tecnológica nacional.

O pó metálico foi conduzido por gás inerte Argônio (fluxo de 6 L/min, taxa de alimentação de 7,2 g/min) e fundido por um feixe de laser (1282,5 W de potência e 5 mm/s de velocidade de varredura) durante a deposição, gerando a superposição de diversas trilhas e permitindo a fabricação de amostras com superfícies de uma, duas e três camadas superpostas ao substrato, conforme ilustrado na Figura 3. Os parâmetros mencionados foram definidos após diversos testes com variadas combinações entre velocidades de varredura, potências do laser e taxas de alimentação de pó, entre outros [10].

**Figura 1** - Micrografias MEV de partículas do pó de H13: (A) detector SE; (B) detector BSE



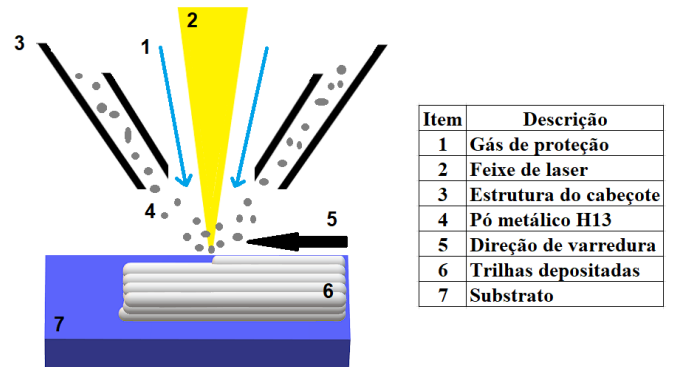
Fonte: O autor.

**Figura 2** - Visão geral do equipamento de deposição: (A) Braço robótico; e (B) Cabeçote com laser e alimentadores de pó



Fonte: O autor.

**Figura 3** - Diagrama esquemático das deposições realizadas



Fonte: O autor.

**Tabela 2** - Composição Química do aço utilizado como substrato

Elementos (% em peso)							
C	Mn	P	S	Si	Cu	Ni	Cr
0,082	1,606	0,016	0,008	0,005	0,014	0,009	0,020
Mo	Sn	Al	N	Ti	Nb	V	B
0,155	0,003	0,028	0,006	0,002	0,014	0,005	0,000

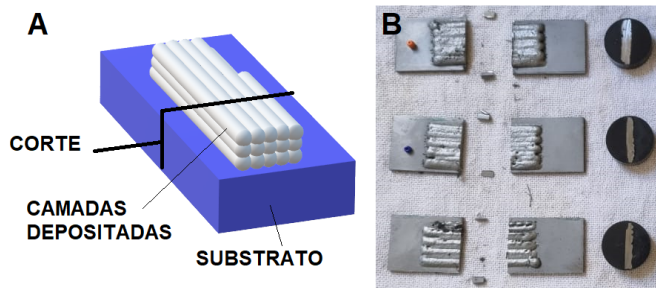
Fonte: Souza (2011) [12].

As amostras foram transversalmente seccionadas, conforme ilustrado na Figura 4, preparadas (lixadas, polidas e quimicamente atacadas com reagentes

Villela e Nital 5%) e avaliadas por meio de microscopia óptica (MO) e eletrônica de varredura (MEV), esta última associada ao uso de detectores de elétrons

secundários (SE) e retroespalhados (BSE), além da espectroscopia por energia dispersiva de raios X (EDS). Também foram realizados ensaios de microdureza Vickers (Hv, 200 gf de carga, 3 a 5 indentações por linha horizontal). As imagens oriundas dos registros micrográficos no MEV do pó metálico e das seções transversais das deposições foram analisadas no software ImageJ quanto à distribuição de tamanho de partícula e a sua espessura, respectivamente.

**Figura 4** - Visão do corte realizado nas amostras depositadas: (A) Desenho esquemático; e (B) Amostras com uma, duas e três camadas após corte e embutimento



Fonte: O autor.

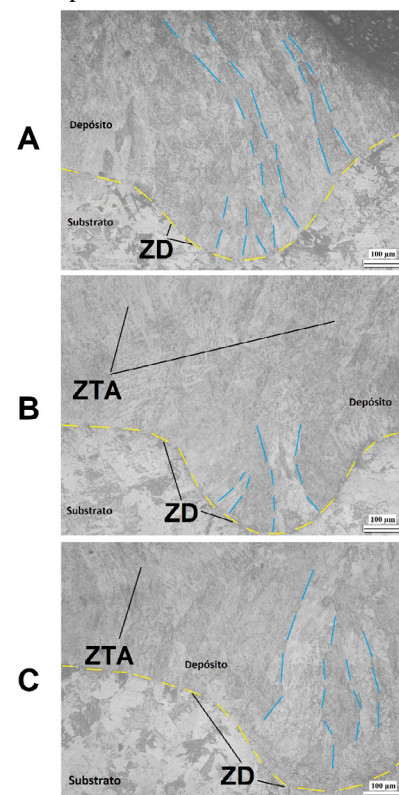
### 3. Resultados

Micrografias resultantes da análise no MO da seção transversal das deposições com uma, duas e três camadas foram avaliadas. São três deposições distintas, conforme se vê na Figura 4B, nas quais escolheram-se para análise micrográfica áreas em que a interação entre depósito e substrato ou entre camadas fosse nítida.

Na Figura 5, verifica-se a zona de diluição (ZD) entre as camadas depositadas e o substrato, região delimitada por linhas tracejadas com orientação próxima à horizontal, defletindo para acompanhar o contorno do cordão de depósito observado, revelando um bom nível de ancoragem e densificação. Além disso, o surgimento de zonas de transição microestrutural é visível nas Figuras 5B e 5C, em comparação à 5A. Estas zonas termicamente afetadas (ZTA) se dão em virtude do fornecimento de calor decorrente da deposição de trilhas lateralmente adjacentes ou superpostas, nas quais o aspecto colunar é reduzido em virtude dos tratamentos térmicos *in situ* [5, 8].

Na Figura 6, com um aumento um pouco maior, o aspecto colunar dos grãos próximos à interface depósito-substrato, decorrente do crescimento epitaxial, se torna ainda mais claro do que na Figura 5. Em ambos os casos, com linhas de orientação tendendo à vertical para sua indicação, sem a intenção de tais linhas demarcarem todos os contornos existentes. Ademais, ao se comparar as três deposições, é possível notar a redução da morfologia colunar dos grãos, assim como seu coalescimento nas amostras com mais camadas de depósitos, bem como a predominância do aspecto colunar em posições superiores (como na Figura 6C), em que novas camadas se depositaram. Atribuem-se tais mudanças ao maior fluxo de calor nas deposições com mais camadas ao fato de nesses casos as camadas inferiores já estarem depositadas e suscetíveis à ação térmica das deposições posteriores e, finalmente, por tal ação térmica gerar microestruturas localmente heterogêneas na MA, a depender do ciclo térmico desenvolvido em cada posição [13].

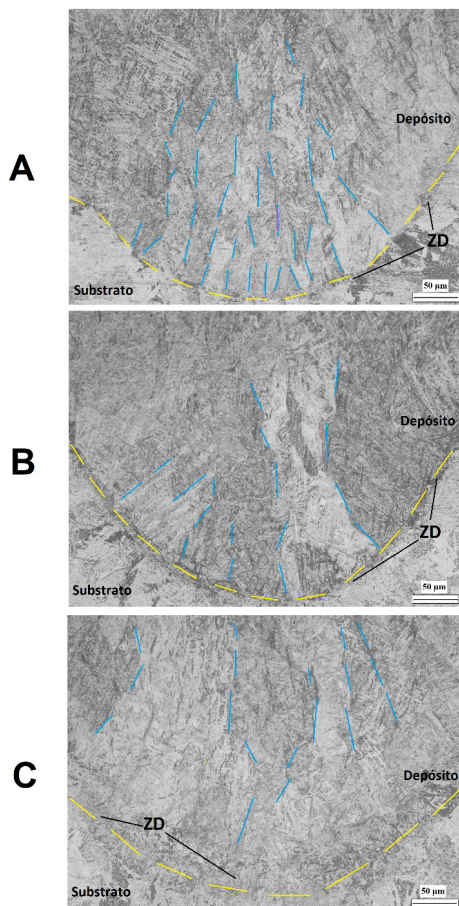
**Figura 5** - Micrografias obtidas via MO, campo claro. Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



Fonte: O autor.

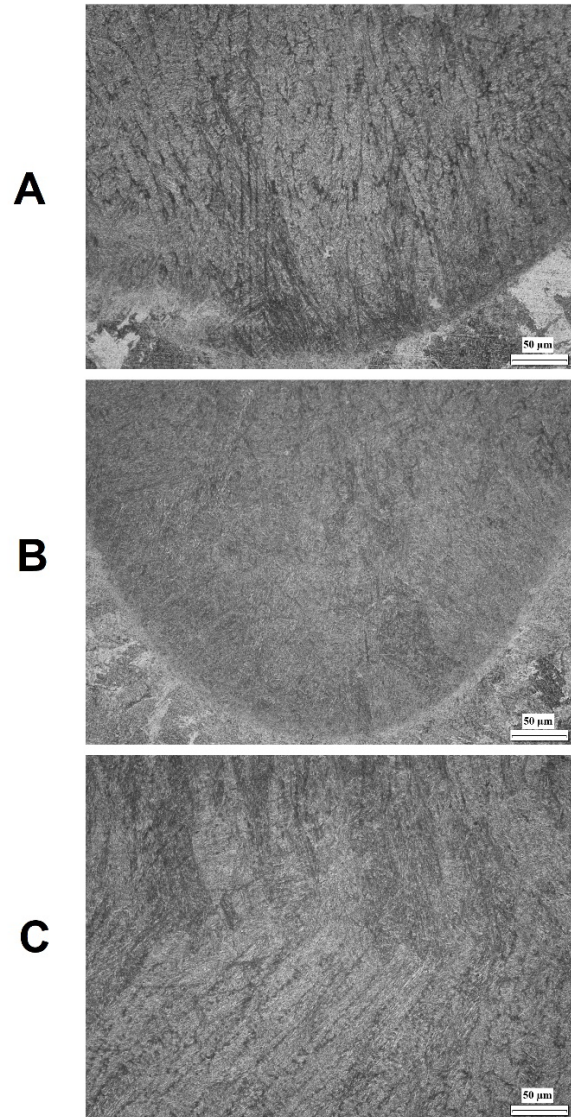
Por sua vez, a observação por meio de MO, em campo escuro, é mostrada na Figura 7, reforçando a visualização da microestrutura colunar dos grãos já mencionada (A) e a ocorrência de efeitos térmicos entre camadas adjacentes; em (B), a porção superior do cordão da primeira camada apresenta algumas mudanças morfológicas; em (C), apresenta-se a zona de transição entre a segunda e a terceira camadas, na amostra em que foram depositadas três camadas. Na Figura 7C, também é notável a mudança da direção de crescimento dos grãos na microestrutura, fruto das mudanças no fluxo de calor por ocasião da deposição de camadas superiores à previamente depositada, já que os grãos crescem na direção oposta ao gradiente térmico presente na poça de fusão em solidificação [14].

**Figura 6** - Micrografias obtidas via MO, campo claro, aumento superior. Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



**Fonte:** O autor.

**Figura 7** - Micrografias obtidas via MO, campo escuro. Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



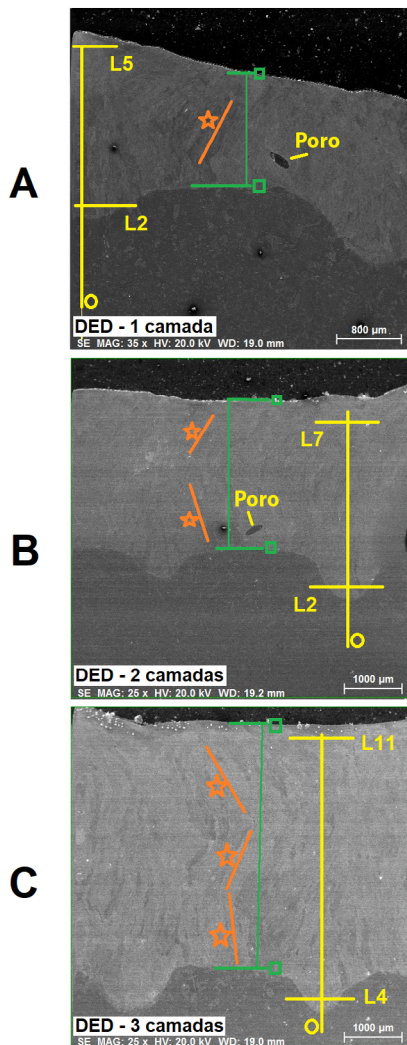
**Fonte:** O autor.

Já nas micrografias obtidas via MEV com baixo aumento (Figura 8), é possível confirmar o fato de a solidificação ser guiada pelo fluxo de calor [14] e assim ser modificada pelo número de camadas e estratégia de deposição, conforme indicam linhas auxiliares marcadas com estrelas, desenhadas sobre as imagens acompanhando o direcionamento da frente de solidificação na microestrutura. Ademais, um bom nível de densificação e ancoragem no substrato são confirmados, apesar da presença de alguns poucos vazios

(Figuras 8A e 8B). Também não se verifica qualquer evidência do defeito de “balling” [6], o qual havia sido observado em trabalhos anteriores com o pó metálico e o aparato produtivo utilizado, porém em outras configurações [10], indicando uma melhora na seleção dos parâmetros produtivos utilizados.

Outro aspecto visível na Figura 8 é a existência de regiões de maior penetração do depósito sobre o substrato formando os já mencionados cordões, regiões relacionadas à porção central do feixe de laser durante a varredura, cuja ação térmica gradualmente diminui em posições que se distanciam desta linha central.

**Figura 8** - Micrografias obtidas via MEV, baixo aumento. Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



Fonte: O autor.

Também foram identificadas na Figura 8, por meio da marcação de um pequeno círculo na base, linhas verticais cortadas por linhas horizontais com indicações de números e letras (L2 e L5 em 8A; L2 e L7 em 8B; e L4 e L11 em 8C). Elas servem de referencial para um estudo de microdureza Vickers ao longo do perfil vertical de cada amostra em estudo, o qual será apresentado adiante, destacando-se que foram feitas medidas em patamares horizontais distantes 0,5 mm uns dos outros, iniciando-se na linha 1, em posição totalmente pertencente ao substrato (L1, não apresentada). As linhas representadas na Figura 8 referem-se aos perfis horizontais nos quais as indentações passaram a ocorrer em regiões dos depósitos (L2 em A e B e L4 em C), bem como às posições finais de maior altura avaliada na região dos depósitos (L5 em A; L7 em B; e L11 em C).

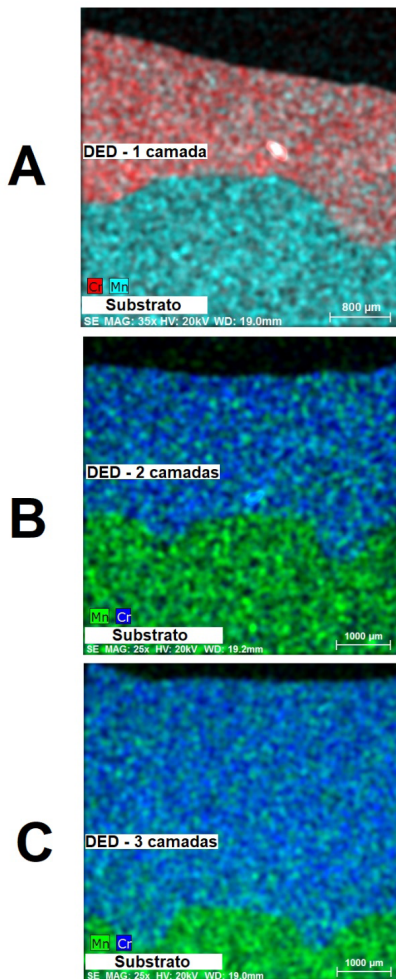
Além disso, foi feito tratamento das micrografias apresentadas na Figura 8 com uso do software ImageJ, permitindo estimar o crescimento das camadas como tendo 1,51 mm na amostra com uma camada, 2,55 mm na amostra com duas e 4,22 mm na deposição com três camadas (respectivamente nas Figuras 8A, 8B e 8C). Tais medidas foram feitas da região entre dois cordões até a superfície superior do depósito, as quais estão identificadas por linhas horizontais, acompanhadas de quadrados, representadas nas imagens da Figura 8. Destaca-se que o objetivo foi avaliar a estimativa do crescimento do depósito e evidenciar que o aumento do número de camadas depositadas, com os parâmetros utilizados, resultava em um crescimento efetivo do depósito. A definição de um valor mais representativo da espessura total de depósito exigiria a realização de um número maior de medidas, com imagens de regiões variadas, haja vista a possibilidade de variação na espessura do depósito em regiões diferentes, aspectos que não foram objeto do presente estudo.

Um mapeamento químico elementar em uma micro-área por EDS/MEV foi realizado com o objetivo de distinguir as regiões do substrato e do depósito, bem como para identificar a extensão da zona de diluição, região na qual se espera a mistura de elementos de liga do substrato e do depósito. Diante desses objetivos, apesar de existirem outros elementos de liga nessas duas porções de investigação, foram escolhidos para observação

os elementos de liga Cr e Mn, por suas composições se destacarem, em termos percentuais, no depósito (Cr, aproximadamente 5%) e no substrato (Mn, aproximadamente 1,6%), sendo sua participação pequena na outra parte (Cr 0,02% no substrato; Mn esperado de aproximadamente 0,35% no depósito), conforme pode ser verificado nas Tabelas 1 e 2, contraste este que permitiu uma melhor distinção entre depósito e substrato.

Os resultados do mapeamento químico por EDS estão apresentados na Figura 9, indicando a existência de domínios bem definidos para as duas porções do material (substrato e depósito) e mostrando que a região de diluição não era extensa, bem como confirmando uma adequada penetração do depósito sobre o substrato.

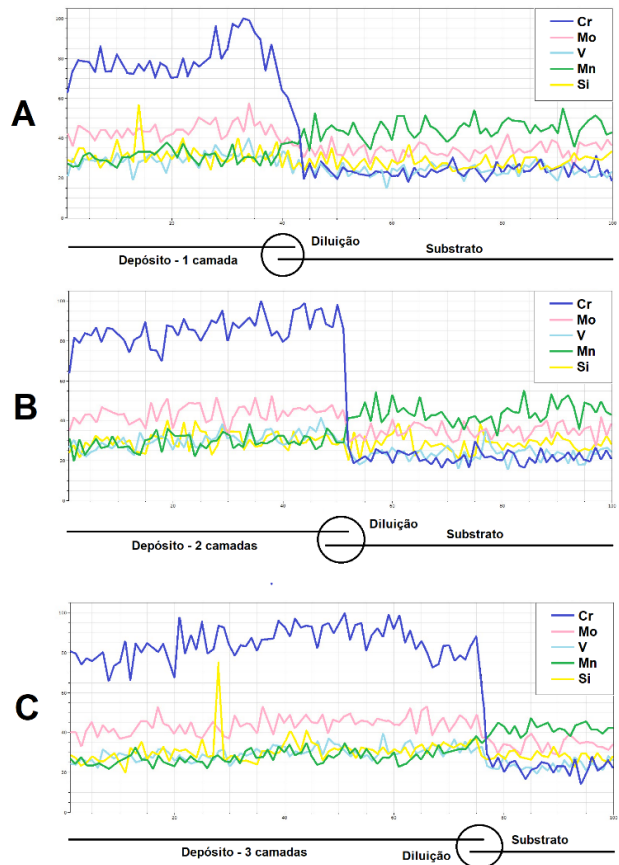
**Figura 9** - Mapeamento de áreas por EDS. Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



Fonte: O autor.

Também foi realizado um mapeamento químico elementar em linha por EDS/MEV (Figura 10), partindo-se do depósito em sentido ao substrato, o que confirmou a existência de dois domínios com composição química relativamente homogênea (depósito e substrato), separados por uma porção de transição em que a composição química suavemente mudou. Isso revelou um bom nível de diluição química, além de ter confirmado que tal mistura química ocorreu em uma extensão limitada [15], tendo esse padrão sido observado em todas as três condições em estudo. Ademais, os mapeamentos em linha (Figura 10) revelaram a evolução dos demais elementos de liga não selecionados nos mapeamentos de microáreas da Figura 9, além de corroborarem a ideia já mencionada de que o Cr e o Mn se prestavam a indicar as regiões de cada um dos domínios (depósito e substrato) e a zona de transição entre eles.

**Figura 10** - Mapeamento de linha por EDS. Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



Fonte: O autor.

Finalmente, a investigação com ensaio de microdureza Vickers (Hv), seguindo os perfis verticais já mencionados, identificados na Figura 8 por meio das linhas verticais com marcação de círculo em sua base, pode ser verificada na Figura 11, na qual estão apresentados os valores médios Hv e os desvios padrão (DP) para cada uma das linhas horizontais ao longo dos perfis verticais já mencionados. Verifica-se um aumento de Hv no sentido a partir do substrato em direção às porções superiores do depósito de H13, apesar de uma leve redução nos valores da dureza Hv em algumas linhas de medida, sendo o DP uma ferramenta para observar como as propriedades se diferenciam em regiões adjacentes devido à influência térmica da deposição sequencial de trilhas [2, 3], acima ou lateralmente, assim como as regiões influenciadas pela diluição. Além disso, grandes valores de DP marcaram a linha em que os depósitos se iniciavam, pois se referiam às linhas em que havia indentações na região de penetração do depósito no substrato (cordões, já mencionados), assim como nas porções de substrato adjacentes aos cordões (L2, L2 e L4, respectivamente, nas Figuras 11A, 11B e 11C, também ilustradas na Figura 8).

## 4. Conclusões

Os depósitos de H13 contendo uma, duas e três camadas apresentaram um bom nível de ancoragem e interação com o substrato, assim como regiões de diluição espacialmente limitadas e com transição suave de composição química na interface substrato-depósito.

Além disso, ocorreu um desenvolvimento direcional da microestrutura após a solidificação, relacionado ao crescimento epitaxial dos grãos colunares e ao fluxo de calor ao longo da solidificação das camadas. Ademais, a influência térmica de trilhas lateralmente adjacentes ou superpostas ficou retratada na variação dos valores de microdureza ao longo do perfil vertical e também em uma mesma linha horizontal, assim como nas mudanças de morfologia da microestrutura, confirmando um padrão heterogêneo de microestrutura e propriedades em amostras “como fabricadas” por MA.

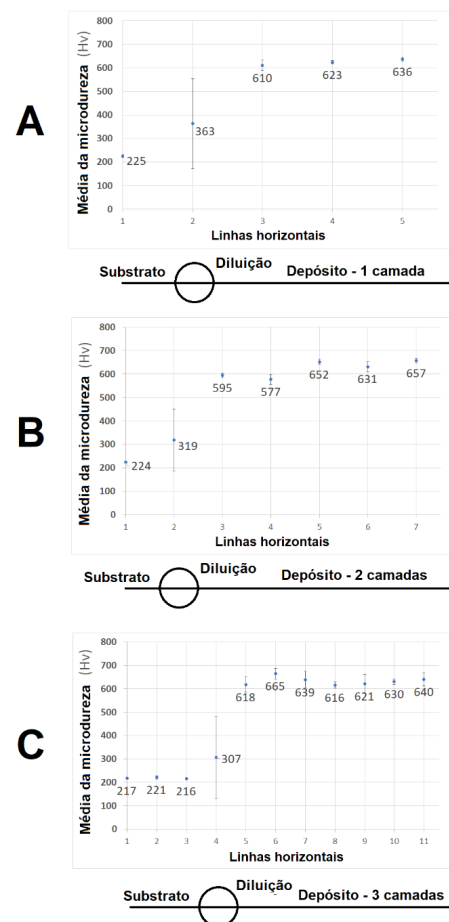
Avalia-se que o estudo abre espaço para uma continuação por meio de análise similar, mas com amostras

submetidas a rotas de tratamento térmico, buscando homogeneizar microestrutura e propriedades ao longo do material depositado.

## Agradecimentos

Os autores agradecem: a Villares Metals, pelo oferecimento de aço H13 convencional, o qual foi atômico; o IEAv e o IME, pela estrutura produtiva e de caracterização de materiais; o Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), pelo apoio no corte e preparação dos substratos; a Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP) e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) (Pró-Defesa IV e PROEX), pelo suporte financeiro.

**Figura 11** - Resultados médios de microdureza Vickers (Hv) e seus desvios padrão (DP). Camadas depositadas: A, uma; B, duas; e C, três



Fonte: O autor.

## Referências

- [1] ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR NM 122-1**: Aços ferramentas – parte 1: Classificação, designação e composição química. Rio de Janeiro: ABNT, 2005.
- [2] ZHAO, X. *et al.* The effect of thermal cycling on direct laser-deposited gradient H13 tool steel: Microstructure evolution, nanoprecipitation behavior, and mechanical properties. **Materials Today Communications**, [s. l.], v. 25, 101390, 2020.
- [3] JOSHI, S. *et al.* Solidification and microstructure evolution in additively manufactured H13 steel via directed energy deposition: Integrated experimental and computational approach. **Journal of Manufacturing Processes**, Amsterdam, v. 68, p. 852-866, 2021.
- [4] KANG, M. *et al.* The effects of annealing temperature and cooling rate on carbide precipitation behavior in H13 hot-work tool steel. **Journal of Alloys and Compounds**, Amsterdam, v. 627, p. 359-366, 2015.
- [5] BOHLEN, A. *et al.* Additive manufacturing of tool steel by laser metal deposition. **Procedia Cirp**, Amsterdam, v. 74, p. 192-195, 2018.
- [6] DEBROY, T. *et al.* Additive manufacturing of metallic components—process, structure and properties. **Progress in Materials Science**, Amsterdam, v. 92, p. 112-224, 2018.
- [7] LIMA, M. S. F. Processo de AM por adição de lâminas, por deposição com energia direcionada e híbridos. In: VOLPATO, N. (org.). **Manufatura Aditiva: Tecnologias e Aplicações da Impressão 3D**. São Paulo: Blücher, 2017. p. 271-287.
- [8] AMIRABDOLLAHIAN, S. *et al.* Tempering behavior of a direct laser deposited hot work tool steel: Influence of quenching on secondary hardening and microstructure. **Materials Science and Engineering: A**, Amsterdam, v. 814, 141126, 2021.
- [9] PELLIZZARI, M. *et al.* Optimizing direct laser metal deposition of H13 cladding on CuBe alloy substrate. **Surface & Coatings Technology**, Amsterdam, v. 432, 128084, 2022.
- [10] RAMOS, R. *et al.* Parametrização de equipamento de deposição por energia direcionada utilizando pó de aço ferramenta H13 atomizado em água. In: CONGRESSO ANUAL DA ABM, 76., 2023, São Paulo. **Anais [...]**. [S. l.]: ABM, 2023. p. 2473-2483. DOI: 10.5151/2594-5327-39934.
- [11] BRAGA, V. *et al.* Microstructural and mechanical aspects of laser metal deposited H13 powder for die repair. **Materials Today Communications**, Amsterdam, v. 29, 102945, 2021.
- [12] SOUZA, A. C. A. **Produtos de transformações de fases obtidos sobre distintas condições de resfriamento em aço baixo carbono com microadição de molibdênio laminado a quente**. 2011. Projeto de Conclusão de Curso (Graduação) – Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2011.
- [13] GE, J. *et al.* Investigation on H13 buildups produced with wire arc additive manufacturing: Deposition strategies-induced microstructural evolution and mechanical performances. **Journal of Alloys and Compounds**, Amsterdam, v. 860, 157893, 2021.
- [14] YANG, X. *et al.* Microstructure evolution and mechanical properties of H13 steel produced by Selective Electron Beam Melting. **Materials Characterization**, Amsterdam, v. 203, 113053, 2023.
- [15] DASS, A.; MORIDI, A. State of the art in directed energy deposition: From additive manufacturing to materials design. **Coatings**, Basel, v. 9, n. 7, n. 418, 2019.

# Identificação e classificação de patologias em rodovias a partir de um sistema integrado com rede neural convolucional

Kaio Gefferson de Almeida Mesquita<sup>\*</sup>, Yasmin Pereira de Brito Barroso<sup>1</sup>, Thiago de Sousa Tostes<sup>1</sup>, Luan Pablo de Holanda Barros<sup>1</sup>, Thiago Prezotte Reis<sup>1</sup>, Frederico Rodrigues<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Imtraff Engenharia e Mobilidade

Av. Cristiano Machado, 640 - sala 1106 - Sagrada Família, Belo Horizonte (MG), Brasil

\*e-mail: kaio@det.ufc.br

**RESUMO:** No Brasil, o transporte rodoviário desempenha um papel crucial na economia, responsável por movimentações de mercadorias e passageiros. No entanto, as estradas enfrentam desafios significativos, com grande parte não pavimentada e muitas apresentando problemas estruturais, como fissuras, trincas e buracos. A detecção precisa dessas patologias é essencial para a intervenção adequada nas rodovias. Este estudo propõe um método inovador utilizando redes neurais convolucionais (CNNs), um subconjunto do aprendizado profundo, para a detecção de patologias nas estradas. O foco é reduzir erros entre classes considerando categorias agregadas e desagregadas. O método mostrou vantagens claras, com melhorias na acurácia, recall e média de precisão ao usar categorias agregadas. A análise comparativa revelou que a agregação de categorias e a exclusão de categorias pouco representadas aprimoraram a precisão do modelo. Com um erro médio de 7%, o modelo já está operacional, contribuindo de maneira prática para otimizar processos de intervenções em estradas.

**PALAVRAS-CHAVE:** Visão Computacional. Rodovias. Detecção de Patologias. Rede Convolucional. Pavimentos Flexíveis.

**ABSTRACT:** Road transportation is essential to Brazil's economy, dominating goods and passenger movements. However, the country faces challenges in road quality, with only a fraction being paved and many exhibiting structural issues. Accurate recognition of these problems is crucial for effective road interventions. Manual approaches prove costly, slow, and error-prone, leading to the emergence of convolutional neural networks (CNNs) as a solution. This study introduces a multi-label CNN method for real-time distress detection on roads, aiming to reduce errors between distress classes in both aggregated and disaggregated categories. The results show clear advantages for the model with aggregated pathology categories, demonstrating improved accuracy, recall, and average precision. Comparative analysis highlights enhanced accuracy with category aggregation and exclusion of poorly represented categories, resulting in an average error of just 7%. In conclusion, the operational model significantly contributes to optimizing the definition of road interventions.

**KEYWORDS:** Computer vision. Highways. Distress Detection. Convolutional Network. Flexible Pavement.

## 1. Introdução

As infraestruturas de transporte são, de longe, os ativos mais demandados em grande parte dos países. Redes rodoviárias maduras e bem conservadas são cruciais para o desenvolvimento da economia de uma nação, principalmente para países com uma matriz de transporte baseada no modo rodoviário, como o Brasil. O transporte rodoviário brasileiro concentra aproximadamente 61% da movimentação de mercadorias e 95% dos passageiros. Embora o Brasil tenha 1.720.700 km de rodovias, apenas 12,4% delas são pavimentadas e, destas, 59% foram consideradas inadequadas em pelo menos um dos critérios (geometria, sinalização ou pavimento), sendo que 52,4%

das rodovias avaliadas apresentaram algum defeito no pavimento [6].

Estudos apontam que patologias aparentes no pavimento demonstram sinais de desgaste estrutural [3] e caracterizam-se como aberturas com direções e formatos variados, podendo ocasionar sinistros. A detecção e o diagnóstico adequado das patologias são de suma importância. A realização de reparos ou o acompanhamento do seu comportamento, nos casos em que o reparo não é possível, minimizam danos ou resolvem o problema como um todo. Para tanto, é necessário que sejam realizados monitoramentos e inspeções regularmente para manutenção e prevenção de falhas. A abordagem manual de inspeções visuais realizadas por engenheiros ou técnicos especializados, embora tradicional, apresenta limitações como

subjetividade na avaliação, alto custo e tempo de execução, além de dificuldades em acompanhar a escala e frequência necessárias para a monitoração adequada de extensas redes rodoviárias. A abordagem manual está caindo em desuso devido à sua subjetividade, tempo, elevados custos financeiros e recursos humanos. Além disso, a inspeção manual está se tornando impraticável devido à escala e frequência necessárias. Com os avanços tecnológicos, há uma tendência crescente de se utilizar levantamentos automatizados para avaliar o pavimento com equipamentos que vão desde câmeras até outras tecnologias, como sensores e visão computacional [16].

Nos últimos oito anos, uma rede neural convolucional (CNN), um tipo particular de rede neural amplamente conhecido como aprendizagem profunda, ganhou notável popularidade em muitos setores, especialmente na visão computacional [11]. As redes neurais convolucionais encontram-se dentro do universo *Deep Learning* (DL) e foram desenvolvidas para classificar imagens, pois são capazes de analisar constantemente os dados e reconhecer padrões. A CNN oferece automatização de processos, mas também se destaca como uma ferramenta particularmente adequada para a detecção de patologias em pavimentação. Sua eficácia singular na detecção de bordas em imagens, graças à aplicação de operações de convolução, a coloca em uma posição de destaque quando comparada a outros modelos de aprendizado profundo. Essa capacidade específica das CNNs não apenas agiliza e simplifica a identificação de problemas na pavimentação, mas também aprimora a precisão e a confiabilidade dos resultados, tornando-as essenciais em aplicações em que a detecção precisa é crucial, como na manutenção de infraestrutura viária. Além de proporcionar automatização de processos, a CNN torna-se particularmente adequada à detecção de patologias em pavimentação, de modo que se sobressai quando comparada a outros modelos de aprendizado profundo, devido à sua singular eficiência na detecção de bordas em imagens em razão de aplicação de operações de convolução. No entanto, na engenharia de pavimentos, a aplicação das técnicas de DL

está em constante evolução, com avanços nas tecnologias de *hardware* e *software*. Após uma revisão da literatura sobre a aplicação da aprendizagem profunda para gerência de pavimentos, os principais focos encontrados foram os defeitos das estradas, e revelam que a atenção tem sido predominantemente na classificação, na detecção e na segmentação de fissuras [10][14], mas não no avanço de detecção de outros tipos de patologias menos frequentes e na diminuição dos erros de detecção, foco deste trabalho. Dessa forma, além do problema de a verificação manual das patologias perder acurácia devido a erros humanos e demandar mais tempo do que a própria coleta em campo, também existe um problema metodológico no processo. Portanto, levanta-se a hipótese de que os modelos de identificação de patologias, devido à grande quantidade de tipos, podem perder a precisão no processo de treinamento, não conseguindo generalizar bem os novos casos, ocasionando o chamado *overfitting* [9].

Neste contexto, o trabalho tem como objetivo propor um método de treinamento e aplicação de uma rede neural convolucional com múltiplos *labels* (criação de caixas no processo de treinamento) para identificar em tempo real patologias em rodovias, diminuindo o erro agregado entre as classes e generalizando os novos casos. O processo busca a automatização do registro e o diagnóstico do pavimento de rodovias, ampliando o sistema de gestão de pavimentos, a partir da comparação entre dois modelos: um treinado com o grupo agregado e específico de patologias e outro genérico, com diversos tipos de patologias desagregadas, de acordo com as especificações da norma do DNIT (2003). Também foram comparados com contagens e classificação manual. Foram utilizados dados amostrais de diversos trechos de uma rodovia brasileira de 3 faixas por sentido. Por fim, foram comparados os resultados com indicadores de desempenho, com a finalidade de verificar a adequação dos modelos aos tipos de patologias.

## 2. Revisão bibliográfica

As infraestruturas rodoviárias são essenciais para qualquer sociedade. Os defeitos estruturais causados

pelo envelhecimento e pelas variações ambientais podem afetar negativamente a durabilidade das estruturas, o que evidencia a importância de estratégias de monitoração e gestão. De modo geral, essa gestão das infraestruturas tem como objetivo fundamental a preservação e o prolongamento da vida útil das estruturas de longa duração [4]. Para manter a integridade das estruturas, é importante detectar o início de qualquer defeito. As fissuras, assim como buracos e trincas, são os defeitos mais comuns nos pavimentos e na superfície das estruturas e essa degradação estrutural pode potencialmente ameaçar a segurança e reduzir a vida útil do pavimento [23].

O primeiro e mais comum procedimento para avaliar o estado de saúde de uma estrutura é a inspeção visual, que é dispendiosa e trabalhosa. Além disso, a inspeção manual requer peritos altamente treinados na área e está sujeita ao julgamento do especialista. Essas limitações motivaram o trabalho em abordagens automáticas de detecção de patologias, tanto na indústria como no meio acadêmico [5]. As abordagens baseadas em imagens são consideradas mais econômicas devido à disponibilidade generalizada de câmeras e *smartphones* [13]. Para automatizar o procedimento de identificação de patologias com base em imagens, as técnicas de visão computacional têm-se revelado eficazes e a sua aplicação tornou-se cada vez mais presente nas últimas décadas [23].

Por conseguinte, os estudos de detecção de patologias com base em imagens são geralmente classificados em (i) abordagens manuais e (ii) abordagens automáticas baseadas na extração de características. Os primeiros estudos concentraram-se na aplicação de métodos como os detectores de bordos [1], as operações morfológicas e a limiarização [7]. As características artesanais extraídas são introduzidas em algoritmos clássicos de aprendizagem automática, como as máquinas de vectores de suporte (SVM), a *Random Forest* e as redes neurais (NN). Com base na aprendizagem profunda, foram propostos numerosos estudos de detecção de patologias que são categorizados a partir de classificação de imagens, reconhecimento de objetos e segmentação semântica [12].

Os métodos de aprendizagem profunda (DNN – Deep Neural Network) concentram-se na aprendizagem de hierarquias de características por meio de

níveis mais elevados formados por uma combinação de características de nível inferior. A aprendizagem de características a vários níveis de abstração permite aprender funções complexas que mapeiam a entrada para a saída diretamente a partir dos dados [10][14].

As redes neurais convolucionais (Convolutional Neural Network – CNN) foram inspiradas no funcionamento do córtex visual para a classificação de imagem [16]. A CNN pode receber uma imagem de entrada e atribuir filtros, que podem ser aprendidos, aos objetos presentes na imagem, além de ser capaz de diferenciar um do outro [2]. O pré-processamento exigido pela CNN é muito menor em comparação a outros algoritmos de classificação, tornando o processamento computacionalmente gerenciável, pois, ao receber as imagens, a rede as reduz sem perder informações.

Normalmente, a CNN requer muitas imagens etiquetadas para atingir uma elevada precisão de previsão. No entanto, por vezes, é difícil recolher milhares de imagens e etiquetá-las manualmente. A aprendizagem por transferência permite criar modelos com menos recursos de entrada. Em vez de iniciar o processo de aprendizagem do zero, a abordagem de aprendizagem por transferência escolhe um modelo já treinado em um conjunto de dados maior, como o *ImageNet*, para resolver um problema semelhante. Esse modelo utiliza pesos pré-treinados e uma taxa de aprendizagem que vai se adaptando conforme a necessidade [22].

A taxa de aprendizagem (*Learning Rate* - LR) é um parâmetro de sintonização num algoritmo de otimização que determina o tamanho do passo em cada iteração, enquanto se move em direção a um mínimo de uma função de perda [17]. [20] reforça a ideia de que a LR deve variar dentro de uma gama de valores, em vez de adotar um valor fixo ou exponencialmente decrescente. Fixam-se os limites mínimo e máximo, e a LR varia ciclicamente entre esses limites. O estudo propõe um treinamento de algumas épocas para estimar os valores limite mínimo e máximo.

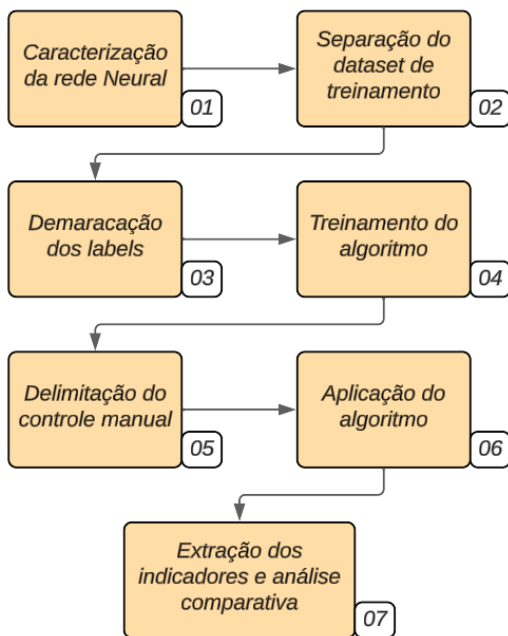
### 3. Método

Na metodologia deste trabalho, foi proposto um desenvolvimento em 7 etapas (Figura 1), sendo elas:

(i) Caracterização da rede neural; (ii) Separação do *dataset* de treinamento; (iii) Demarcação dos *labels* para treinamento; (iv) Treinamento do algoritmo; (v) Delimitação do controle manual; (vi) Aplicação do algoritmo; (vii) Extração dos indicadores e análise comparativa. Todo o processo foi realizado em linguagem *python* 3.10, desenvolvido através do Yolo v7 (*You Only Look Once*), um *framework* implementado com aprendizado profundo de uma *darknet*. Com base nesse algoritmo, foram realizadas implementações para otimização da velocidade e da detecção de várias patologias em uma mesma imagem, conforme será apresentado.

Neste trabalho, foram testadas três hipóteses, sendo elas: (i) O treinamento com categorias desagregadas de patologias podem impactar negativamente a precisão das detecções; (ii) Patologias com mais amostras de treinamento tendem a ter mais detecções em novos *datasets*, enquanto patologias com menos amostras podem diminuir a acurácia do modelo; e (iii) os modelos de identificação de patologias, devido à grande quantidade de tipos, podem perder precisão no processo de treinamento, não conseguindo generalizar bem os novos casos.

**Fig. 1.** - Metodologia para detecção de patologias com rede neural personalizada.



**Fonte:** Autores.

A primeira etapa consiste na caracterização e descrição da rede neural convolucional, conforme será descrito em tópico posterior do método. Posteriormente, é necessário separar imagens amostrais para cada categoria de patologia da rodovia em análise. Nesse caso, a rodovia em análise apresenta 3 faixas por sentido, sendo levantadas informações em todas as faixas. Por questões da Lei Geral de Proteção de Dados [15], não será divulgada a localização da rodovia utilizada no estudo de caso, com foco apenas no método de identificação das patologias. Em seguida, foi delimitado a demarcação dos *labels* para cada categoria, a princípio manualmente, depois de forma otimizada, conforme o padrão de identificação. A ferramenta utilizada foi desenvolvida pelos autores com linguagem *python* e *framework* *pyqt5*, para otimizar o processo.

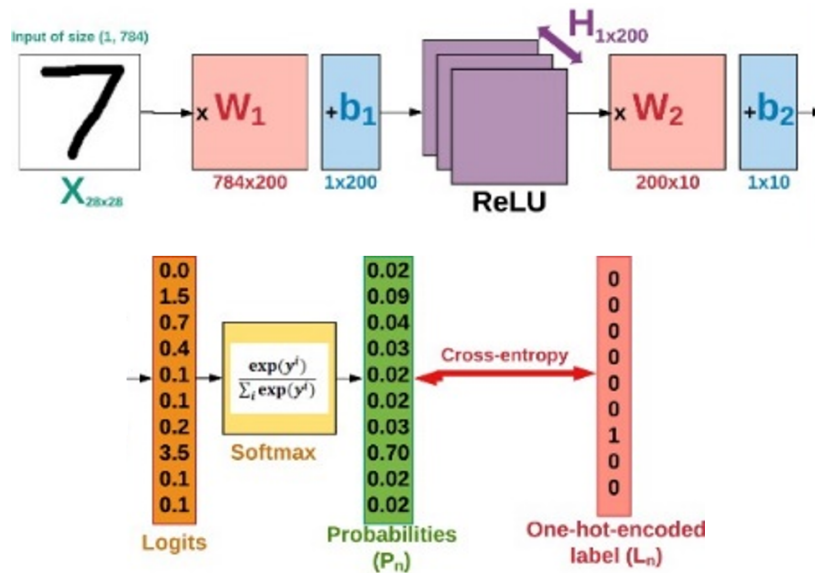
O treinamento do algoritmo ocorreu em uma GPU de 16 núcleos e 32 GB de RAM, permitindo processamento paralelo e visualização dos indicadores enquanto ocorre o treinamento. O processo de treinamento, neste caso, se refere à calibração dos pesos de cada variável (ou categoria, neste caso) para cada função de ativação em cada camada da rede neural. O processo é verificado através de uma função de perda (*Loss Function*), comparando a distribuição de probabilidade original com a distribuição treinada e diminuindo o erro a cada passagem (*epochs*) de imagens da amostra. Os pesos são atualizados com um processo de *backpropagation*, no qual a derivada de cada função de ativação é calculada em relação a cada peso da função, de modo a tentar diminuir o erro na próxima passada, uma vez que a derivada tende a zero quando se encontra um ponto ótimo local ou global (Figura 2).

Para cada modelo aplicado, foi selecionado um controle amostral de identificação manual, com a finalidade de comparar os resultados entre a percepção humana e a da inteligência artificial, comparando a variação dos erros. Por fim, com o treinamento dos algoritmos, foram extraídos os indicadores de *recall*, *accuracy* e média de precisão, e verificou-se entre os modelos a variação desses parâmetros entre o modelo de patologias agregadas (10 classes) e patologias

segregadas (25 categorias). Essa variação se deve ao fato de que algumas categorias apresentam variações, sendo muitas vezes difíceis de identificar até mesmo

manualmente, portanto, com a finalidade de verificar a hipótese I, agregou-se algumas categorias e comparou-se os resultados.

**Fig. 2** - Estruturação do processo de identificação de objetos em uma imagem com CNN.

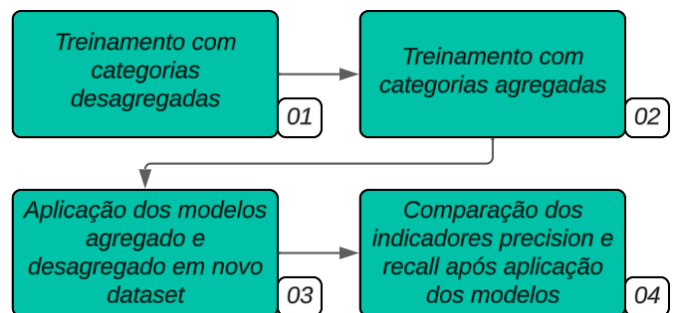


Fonte: [9].

A escolha da estrutura em *darknet* se deu pelo fato de o processamento de cada imagem chegar até 0,05 segundo e uma taxa de 30 frames por segundo. Uma das contribuições neste trabalho foi a utilização de pesos iniciais pré-treinados para identificação das patologias, antes mesmo do novo processo de treinamento. A inicialização não aleatória dos pesos de cada camada, além de otimizar o processo de treinamento, pode garantir que este não estagne em um ótimo local, podendo alcançar o ponto ótimo global da função de ativação requisitada.

Por fim, na Figura 3, é descrito de forma objetiva como este trabalho pretende testar as hipóteses sugeridas. Primeiramente, foram treinados os modelos desagregados e agregados separadamente (mesma base de dados), e aplicados em um novo conjunto de dados (Etapa 3). Na etapa de treinamento, é verificada a primeira hipótese e, na etapa de aplicação, é verificada a segunda hipótese. Na quarta etapa, na qual são extraídos os indicadores, identifica-se a existência de *overfitting* nos modelos, testando, assim, a terceira e última hipótese.

**Fig. 3** - Metodologia para teste das hipóteses.



Fonte: Autores.

### 3.1. Dataset e criação dos *labels* para treinamento dos modelos de identificação de patologias

A base de dados de imagens é composta por registros fotográficos extraídos de vídeos de uma rodovia brasileira de 3 faixas. As gravações foram realizadas de forma vertical com uma câmera GoPro Hero 10 Black com resolução de 1.920 x 1.080 *pixels* acoplada na parte traseira de um veículo, possibilitando a

visualização do pavimento, estando perpendicular a ele. Dessa forma, a imagem apresenta exclusivamente trechos do pavimento e, a uma altura e ângulo fixo, permite aperfeiçoar a visualização e o dimensionamento das patologias. A Figura 4 exemplifica o processo de desenho dos *labels* e a definição manual das categorias.

Os grupos demarcados para treinamento em cada modelo estão representados na Tabela 1, assim como o percentual de imagens por categoria. Nas tabelas, estão representadas apenas as siglas das patologias para melhorar a visualização, porém o descritivo é dado a seguir: D – Desgastes; FI – Fissuras; J – Trincas Interligadas Jacaré sem Erosão; JE – Trincas Interligadas Jacaré com Erosão; P – Painéis; R – Remendos; TTC – Trincas Transversais Curtas; TTL – Trincas Transversais Longas; TLC – Trincas Longitudinais Curtas; TLL – Trincas Longitudinais Longas; TB – Trincas Interligadas em Bloco sem Erosão; TBE – Trincas Interligadas em Bloco com Erosão; O – Ondulação; E – Escorregamento; EX – Exsudação; ALC – Afundamento de Consolidação Local; ATC – Afundamento de Consolidação da Trilha. Uma observação importante para a compreensão dos tipos de defeitos é que as patologias nomeadas fissuras são fendas de espessuras capilares, perceptíveis à vista desarmada a uma distância igual ou inferior a 1,50 m do pavimento. Já as trincas são fendas com espessuras superiores às das fissuras, logo, facilmente visíveis à vista desarmada. As trincas, por sua vez, possuem 3 classificações, com relação à sua espessura e à condição de erosão, sendo elas FC-1, FC-2 e FC-3, que se referem, respectivamente, a trincas com aberturas apenas superiores às das fissuras, como citado anteriormente, e menores que 1 mm; trincas com aberturas superiores a 1 mm e sem condição de erosão nas bordas; e trincas com aberturas superiores a 1 mm e com condição de erosão nas bordas. Ademais, a classificação de trincas de classe FC-1 se aplica apenas a trincas isoladas, sejam elas longitudinais, transversais ou de retração [8]. É importante ressaltar que, no modelo agregado, além da união de

algumas categorias conforme explicitado na Tabela 1, também foram retiradas categorias com baixa ocorrência, de modo a verificar a influência dessas categorias na precisão da separação de classes.

**Fig. 4** - Demarcação dos *labels* no *dataset*.



**Fonte:** Autores.

**Tab. 1** - Resumo dos dados de treinamento dos modelos agregado (a) e desagregado (b)

Modelo agregado	Imagens	Proporção
D	120	3,1%
FI	341	8,8%
J	496	12,8%
JE	61	1,6%
P	304	7,8%
R	619	15,9%
TTC	790	20,3%
TTL	751	19,3%
TLC	369	9,5%
TLL	35	0,9%

Modelo Desagregado	Imagens	Proporção
D	120	3,1%
FI	338	8,7%
J	496	12,7%
JE	61	1,6%

continua

Modelo Desagregado	Imagens	Proporção
P	304	7,8%
R	619	15,8%
TTC-FC1	416	10,6%
TTC-FC2	348	8,9%
TTC-FC3	26	0,7%
TTL-FC1	399	10,2
TTL-FC2	312	8,0%
TTL-FC3	40	1,0%
TLC-FC1	120	3,1%
TLC-FC2	239	6,1%
TLC-FC3	10	0,3%
TLL-FC1	4	0,1%
TLL-FC2	24	0,6%
TLL-FC3	7	0,2%
TB	2	0,1%
TBE	-	-
O	1	0,0%
E	11	0,3%
EX	5	0,1%
ALC	1	0,0%
ATC	4	0,1%

**Fonte:** Autores.

### 3.2. Treinamento da rede neural

O treinamento da rede neural convolucional inclui a otimização matemática, utilizando uma função de custo (*loss function*), para que os enviesamentos e os pesos da rede neural possam ser ajustados automaticamente. Nesse procedimento, o conjunto de dados de treino com rótulos esperados é apresentado ao procedimento de otimização para encontrar uma função de perda mínima global.

O treino dessa CNN consumiu muito tempo computacional, sendo de suma importância a utilização de

pesos iniciais não aleatórios para dar agilidade ao processo. Uma alternativa para a utilização de GPUs são as matrizes de portas programáveis em campo ou os circuitos integrados específicos de aplicação. Quanto aos hiperparâmetros dos modelos, optou-se por mantê-los em ambos, com a finalidade de avaliar a influência dos dados de treinamento sem fatores externos. Dessa forma, definiu-se um lote igual a 4 e 350 épocas.

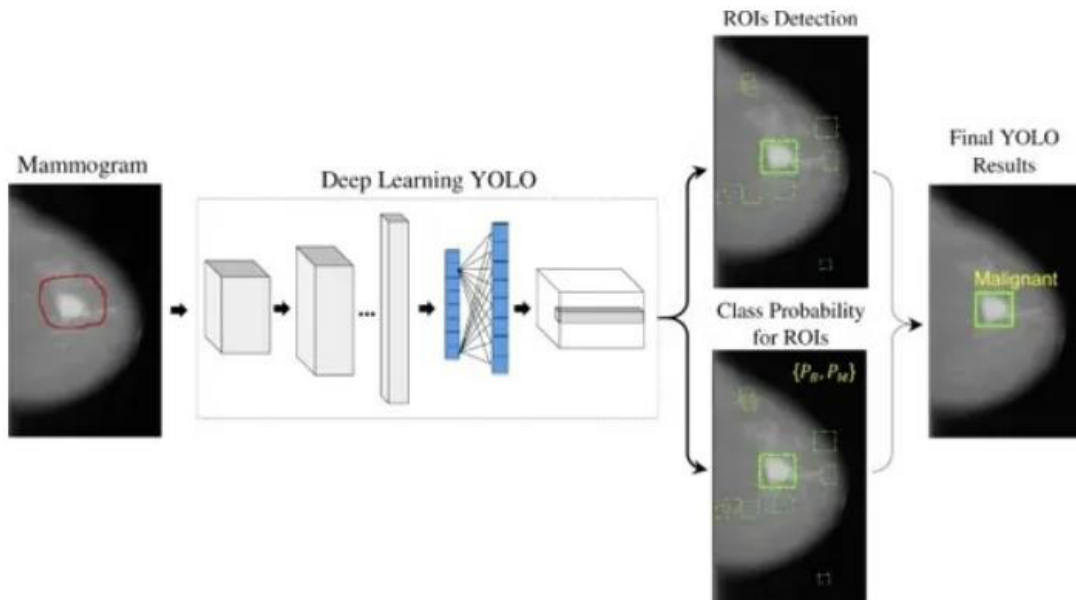
### 3.3. Algoritmo em detalhes

Primeiramente, o algoritmo converte as imagens em um grid delimitado de  $S \times S$ . Para este estufo foi utilizado um grid de  $19 \times 19$ , conforme especificado em [9]. Cada uma das células é responsável por fazer a predição de 5 caixas delimitadoras, para caso haja mais de um objeto naquela célula. Também é retomada a pontuação de confiança, que indica o quanto de acurácia o algoritmo tem de que existe um objeto em determinada caixa delimitadora.

Para cada caixa, a célula também faz a previsão de uma classe, funcionando assim como um classificador: é fornecido um valor de probabilidade para cada uma das classes possíveis. O valor de confiança para a caixa delimitadora e a predição das classes são combinados em uma pontuação final, que informa a probabilidade dessa caixa conter um objeto específico. Neste trabalho, o grid utilizado de  $19 \times 19$  resulta em 361 células. Para cada uma das células, são detectadas 5 caixas delimitadoras, resultando em 1.805 caixas. Contudo, a maioria dessas caixas terá um valor de confiança extremamente baixo, então considerou-se apenas as caixas com pontuação igual ou superior a 50%. Esse limiar de classificação é chamado de *threshold* e pode ser manipulado para testes nos modelos, mas neste trabalho foi considerado apenas um limiar.

A utilização do Yolo aqui se deve ao fato da sua eficácia em realizar predições em uma única passada na rede (Figura 5). Antes dessa versão, seria necessário detectar através da divisão de uma imagem em várias partes e, depois, em cada pedaço da imagem, executava-se um classificador. Isso significa que seria necessário rodar o mesmo classificador milhares de vezes sobre a mesma imagem [19].

**Fig. 5** - Exemplo de detecção em uma passagem única com o Yolo.



**Fonte:** [19].

A construção de uma CNN com um modelo de pré-treino tem-se revelado uma forma adequada de identificação de problemas no pavimento [18]. Dessa maneira, as últimas camadas da rede necessitam frequentemente de enormes alterações nos parâmetros, enquanto os níveis mais profundos que já estão bem treinados na detecção de características básicas (como arestas e contornos) necessitam de pequenas modificações. Uma vez que a aprendizagem por transferência é utilizada na arquitetura da rede, a CNN é ajustada em duas etapas. A primeira etapa congela o primeiro grupo de camadas para que todos os parâmetros não sejam atualizados. No segundo passo, o grupo da primeira camada é descongelado. O treino é continuado a partir do estado de treino anterior.

### 3.4. Indicadores

Após a aplicação da rede neural, os modelos foram comparados, avaliando-se a capacidade preditiva dos modelos de classificação com os dados de teste, verificando se os modelos realmente “aprenderam”, ou seja, conseguiram expandir aceitavelmente seus resultados de predição para conjuntos de dados desconhecidos. Os indicadores utilizados para avaliar o

nível de previsão dos modelos de classificação foram o *precision*, *recall*, MAP (*mean Average Precision*) e a acurácia. O *recall* mede a capacidade do modelo de encontrar todos os exemplos positivos. É calculado como a proporção de previsões positivas corretas em relação ao número total de exemplos positivos no conjunto de dados. É a métrica a ser usada quando é importante minimizar falsos negativos. A precisão mede a capacidade do modelo de não rotular como positivo um exemplo negativo. Então, é calculada como a proporção de previsões positivas corretas em relação ao número total de previsões positivas. Como diferentes classes de objetos podem ter diferentes níveis de dificuldade na detecção, o MAP calcula a média dos APs para todas as classes presentes no conjunto de dados. Isso dá uma visão geral do desempenho do modelo em todas as classes. Além dos indicadores citados, também foi verificada a precisão dos modelos em relação à identificação manual para cada categoria [21].

## 4. Resultados

Na Tabela 1, estão expostos os dados utilizados para o treinamento de cada um dos modelos e, na Tabela 2, os resultados da contagem do modelo com

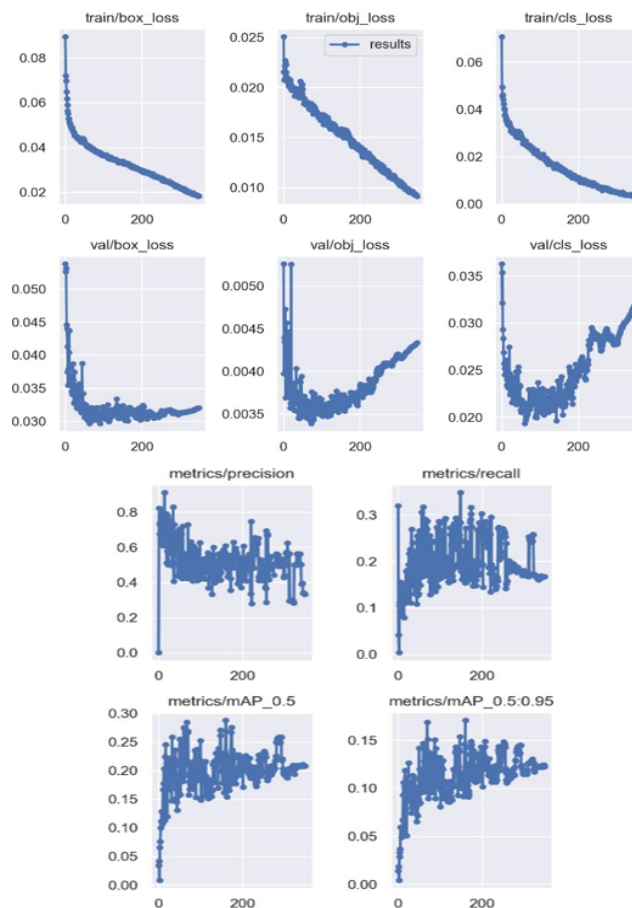
as classes agregadas, do modelo com as classes desagregadas e da contagem manual. Vale destacar que o processo foi delimitado para um trecho total de 80,5 km. Por fim, os resultados extraídos foram comparados entre si, validando-os com o controle e analisando o erro de mensuração da detecção das patologias.

#### 4.1. Resultados dos treinamentos

As figuras a seguir, referem-se aos modelos desagregado e agregado, respectivamente. Elas foram geradas durante o processo de treinamento e expressam as métricas para avaliação da qualidade em identificar as patologias. Nota-se que, reforçando a hipótese de melhoria do modelo com classes agregadas, as métricas, em geral, se mostraram superiores neste em comparação ao de classes desagregadas. Após 300 épocas, o *recall*

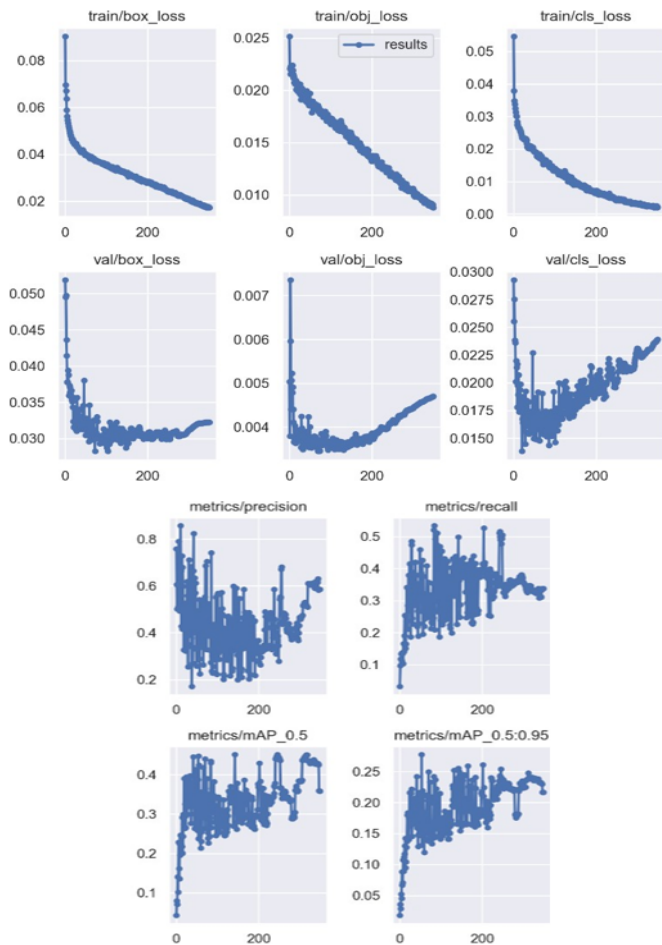
começa a estabilizar em torno de 0,18 para o modelo desagregado e 0,34 para o agregado, indicando uma melhora de 88%. A MAP consolida-se em torno de 0,12 para o primeiro e em torno de 0,23 para o segundo, indicando uma melhora de 91%, ou seja, a capacidade de eventos positivos aumenta quando existe menor possibilidade de uma mesma classe ocorrer devido a suas subclasses. Este modelo sendo aplicado, na prática, implica em uma necessidade de separar manualmente as devidas categorias, porém com foco em uma determinada classe por vez, diminuindo o erro de percepção por desgaste. Quanto à precisão, o número de épocas não foi suficiente para gerar uma estabilização dessa métrica em nenhum dos casos, ainda assim, o gráfico do modelo agregado indica uma tendência de melhoria em sua parcela final.

Fig. 6 - Resultado do treinamento – modelo desagregado.



Fonte: Autores.

**Fig. 7 - Resultado do treinamento – modelo agregado.**



**Fonte:** Autores.

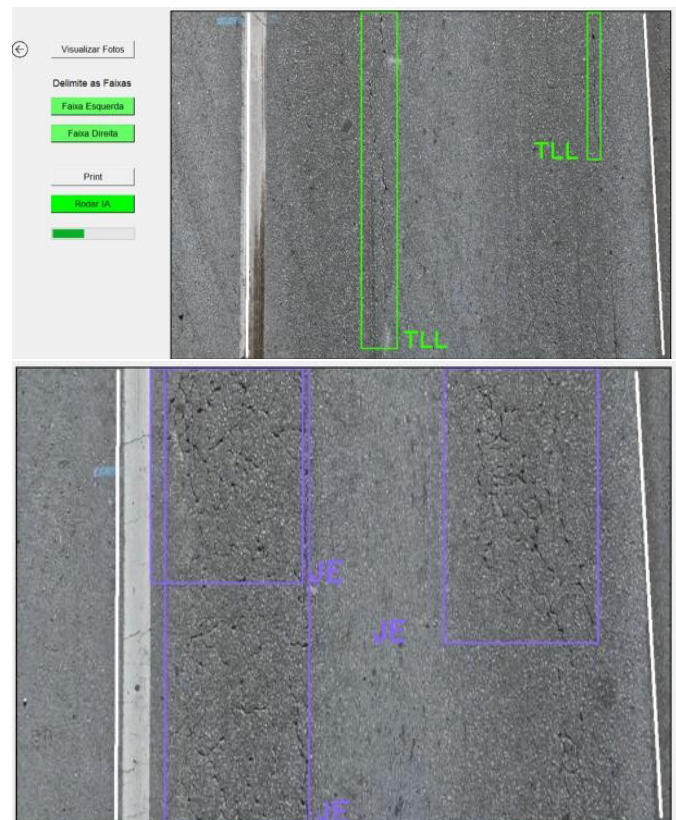
## 4.2. Aplicações dos modelos

A Figura 8 apresenta um exemplo dos resultados práticos de identificação de patologias conforme explicado no método. Vale destacar que a precisão de identificação para categorias agregadas foi superior em nível de precisão para todas as classes, excetuando-se defeitos de trinca interligadas de jacaré com erosão. O modelo desagregado, nesses casos específicos, apresentou 38% menor taxa de erro em relação ao controle. As categorias de Trincas Transversais e Trinca Longitudinais obtiveram uma taxa de acerto de 57% e 62%, respectivamente.

Na Tabela 2, é delimitado o reflexo das diferenças nas métricas nas aplicações práticas dos modelos, comparando seus resultados com o grupo de controle fei-

to manualmente. É válido destacar que há evidências para validar a hipótese de que a agregação de categorias melhora a acurácia dos modelos, uma vez que o erro médio no modelo agregado foi de apenas 7%, enquanto no modelo desagregado foi de 407%, tornando-o inviável de ser aplicado. Para a hipótese 2, sobre a relação de dados na amostra e a melhora dos modelos, não tiveram aumento perceptível nos indicadores e nas identificações, necessitando de novas análises.

**Fig. 8 - Aplicação dos modelos (a) agregado e (b) desagregado.**



**Fonte:** Autores.

**Tab. 2 - Resultados comparativos das predições**

Patologias	Modelo Agregado	Manual
D	1	2
FI	2	2
J	230	404

continua

Patologias	Modelo Agregado	Manual
JE	58	10
P	26	4
R	116	81
TTC	9	3
TTL	3	4
TLC	66	105
TLL	125	67

Patologias	Modelo Desagregado	Manual
D	415	2
FI	13	2
J	343	404
JE	36	10
P	43	4
R	1447	81
TTC – FC1	4	1
TTC – FC2	10	1
TTC - FC3	1	1
TTL – FC1	13	2
TTL – FC2	0	1
TTL - FC3	4	1
TLC – FC1	218	94
TLC – FC2	48	10
TLC – FC3	1	1
TLL – FC1	100	55
TLL – FC2	65	11
TLL – FC3	1	1
TB	0	1
TBE	0	1
O	0	1
E	1	0
EX	6	1
ALC	0	0
ATC	0	0

Fonte: Autores.

Em suma, identifica-se uma significativa melhora no modelo com classes agregadas em relação ao modelo com classes desagregadas, utilizando o número total de patologias e excluindo aquelas que estão presentes apenas no modelo desagregado para 682 contadas manualmente. Destacando-se o desvio entre a identificação do modelo e a contagem manual, soma-se 384 (agregado) e 2.213 (desagregado).

## 5. Considerações finais

Em resumo, o modelo agregado apresentou um erro médio de apenas 7%, acompanhado de um *recall* de 0,34 e uma MAP de 0,23. Em contraste, o modelo desagregado registrou um erro médio alarmante de 407%, com um *recall* de 0,18 e uma MAP de 0,12. Portanto, a hipótese de que a agregação de classes e a remoção daquelas pouco representadas poderia melhorar a precisão de um modelo foi validada, visto que, apenas com esses métodos, os resultados do modelo agregado treinado com as mesmas fotos do desagregado se mostraram superiores.

Possivelmente, a influência da arquitetura da rede e dos hiperparâmetros deve influenciar tanto quanto a quantidade de dados para treinamento, uma vez que a variação das funções de ativação, função de perda e taxa de aprendizado podem impactar diretamente na identificação de bordas, silhuetas e formas, mas essa hipótese ainda deve ser verificada.

Em trabalhos futuros, pretende-se utilizar um banco de dados mais robusto, contemplando as principais rodovias a nível nacional, com melhor distribuição de classes de patologia e em trechos com diferentes tipos de pavimento, já que as patologias podem ter aparências completamente diferentes nos diferentes cenários. É de grande importância para a academia e para o mercado apresentar os diferentes modelos de identificação por intermédio de visão computacional às diferentes rodovias do país, uma vez que as rodovias localizadas próximas ao Norte e ao Nordeste costumam apresentar mais desgastes.

## Referências

- [1] ABDEL-QADER, I.; ABUDAYYEH, O.; KELLY, M. E. Analysis of Edge-Detection Techniques for Crack Identification in Bridges. *Journal of Computing in Civil Engineering*, v. 17, p. 255-263, 2003.
- [2] Academy, D. S. Deep learning book. [S. l.]: [S. n.], 2019.
- [3] ALI, L.; ALNAJJAR, F.; JASSMI, H. A.; GOCHO, M.; KHAN, W.; SERHANI, M. A. Performance evaluation of deep cnn-based crack detection and localization techniques for concrete structures. *Sensors*, v. 21, n. 5, 2021.
- [4] CAGLE, R. F. *Infrastructure Asset Management: An Emerging Direction*; AACE International Transactions: Morgantown, WV, USA, 2003.
- [5] CHA, Y. J.; CHOI, W.; SUH, G.; MAHMOUDKHANI, S.; BUYUKOZTUK, O. Autonomous Structural Visual Inspection Using Region-Based Deep Learning for Detecting Multiple Damage Types. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, v. 33, p. 731-747, 2017.
- [6] CNT - CONFEDERAÇÃO NACIONAL DO TRANSPORTE. Pesquisa CNT de Rodovias 2019. Brasília, DF: CNT, 2019.
- [7] CORD, A.; CHAMBON, S. Automatic Road Defect Detection by Textural Pattern Recognition Based on Ada-Boost. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, v. 27, p. 244-259, 2011.
- [8] DNIT - DEPARTAMENTO NACIONAL DE INFRAESTRUTURA DE TRANSPORTES. Norma DNIT 005/2003 - TER. Defeitos nos pavimentos flexíveis e semirrígidos Terminologia. Rio de Janeiro: DNIT, 2003.
- [9] GÉRON, A. *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and Tensorflow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems*. O'Reilly Media, v. 1. p. 856, 2019.
- [10] GOPALAKRISHANAN, K.; KHAITAN, S. K.; CHOUDHARY, A.; AGRAWAL A. Deep Convolutional Neural Networks with transfer learning for computer vision-based data-driven pavement distress detection. *Constr-Build Mater*, v. 157, p. 322-330, 2017.
- [11] GOPALAKRISHANAN, K. Deep learning in data-driven pavement image analysis and automated distress detection: A review. *Data*, v. 3, n. 3, 2018.
- [12] HSIEH, Y. A.; TSAI, Y. J. Machine Learning for Crack Detection: Review and Model Performance Comparison. *Journal of Computing in Civil Engineering*, v. 34, 04020038, 2020.
- [13] JAHANSHAH, M. R.; KELLY, J. S.; MASRI, S. F.; SUKHATME, G. S. A survey and evaluation of promising approaches for automatic image-based defect detection of bridge structures. *Structure and Infrastructure Engineering*, v. 5, p. 455-486, 2009.
- [14] KHANDELWAL, R. Computer vision: Instance segmentation with maskr-cnn. [S. l.]: [S. n.], 2019. Disponível em: [https://towardsdatascience.com/computer-visioninstance-segmentation-with-mask-r-cnn\\_7983502fca11](https://towardsdatascience.com/computer-visioninstance-segmentation-with-mask-r-cnn_7983502fca11). Acesso em: 14 jul. 2023.
- [15] BRASIL. Lei nº 13.709, de 14 de agosto de 2018. Lei Geral de Proteção de Dados Pessoais (LGPD). Brasília, DF: Presidência da República, 2020. Disponível em: [https://www.planalto.gov.br/ccivil\\_03/\\_ato2019-2022/2020/lei/l14020.htm](https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_ato2019-2022/2020/lei/l14020.htm). Acesso em: 11 ago. 2023.
- [16] MASSUCATTO, J. D. P. Aplicação de conceitos de redes neurais convolucionais na classificação de imagens de folhas. Dissertação (Mestrado) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2019.
- [17] MURPHY, K. P. *Machine Learning: A Probabilistic Perspective*. [S. l.]: [S. n.], 2012.
- [18] NIE, K.; WANG, Pavement Distress Detection Based on Transfer Learning, 2018 5th Int Conf Syst Informatics, ICSAI 2018, no. Icsai, p. 435-439, 2018.
- [19] REDMON, J. *You Only Look Once Unified Real Time Object Detection*. Washington, D.C.: University of Washington, 2016.
- [20] SMITH, L. N. Cyclical learning rates for training neural networks. *Proc - 2017 IEEE Winter Conf Appl Comput Vision, WACV 2017*, no. April, p. 464-472, 2017.
- [21] SOKOLOVA, M.; LAPALME, G. A systematic analysis of performance measures for classification tasks. *Information Processing & Management*, v. 45, n. 4, p. 427-437, 2009.
- [22] TAJBAKSH N.; SHINA, J. Y.; GURUDU, S. R.; HURST, R. T.; KENDALL, C. B.; GOTWAY, M. B.; JIANMIN, L. Convolutional Neural Networks for Medical Image Analysis: Full Training or Fine Tuning? *Computer Vision and Pattern Recognition*, v. 35, n. 5, p. 1299-1312, 2016.

- [23] YANG, F.; ZHANG, L.; YU, S.; PROKHOROV, D.; MEI, X.; LING, H. Feature Pyramid and Hierarchical Boosting Network for Pavement Crack Detection. *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, v. 21, p. 1525-1535, 2020.

# Uma metodologia estatística para redução do desgaste em trilhos ferroviários e sua comparação com o desgaste real

Larissa Fernandes Nunes<sup>1</sup>, larissa.nunes@mrs.com.br, Orcid 0000-0001-9337-9408

Luiz Antônio Silveira Lopes<sup>1</sup>, laslopes@ime.eb.br laslopes@ime.eb.br, Orcid 0000-0002-2163-9204

Luiz Paulo Brandao<sup>1</sup>, brandao@ime.eb.br, Orcid 0000-0002-2623-648X

Wellington Luiz Pereira<sup>2</sup>, wellington.pereira@mrs.com.br, Orcid 0009-0000-6867-6822

João Carlos De Serpa<sup>2</sup>, joao.serpa@mrs.com.br, Orcid 0009-0004-0110-698X

<sup>1</sup> Instituto Militar de Engenharia

<sup>2</sup> MRS Logística

**RESUMO:** Os trilhos ferroviários representam um dos ativos mais dispendiosos para as ferrovias, e constantes estudos visam prolongar sua vida útil. Este trabalho propôs equações para  $W_1$ ,  $W_2$  e  $W_3$  (variação de dimensões do boleto do trilho na vertical, horizontal e com inclinação de 45°) para entender o desgaste. Usando dados reais, as equações foram desenvolvidas e aplicadas a um trilho com oito anos de uso, revelando diferenças significativas entre os valores medidos e esperados. Essa discrepância pode ser atribuída às variações entre os trechos ferroviários e ao modelo estatístico utilizado. Sugere-se que uma abordagem mais detalhada considere características individuais de cada trecho e variáveis adicionais. Isso destaca a necessidade de uma análise personalizada do desgaste dos trilhos, levando em conta a diversidade das condições ao longo da ferrovia.

**PALAVRAS-CHAVE:** Trilho ferroviário. Projeção de vida útil. Regressão linear simples. Vida útil em serviço. Posições de desgaste.

**ABSTRACT:** Railway tracks represent one of the most expensive assets for railways, and constant studies aim to extend their useful life. This work proposed equations for  $W_1$ ,  $W_2$ , and  $W_3$  (variation of rail billet dimensions vertically, horizontally, and with an inclination of 45°) to understand wear and tear. Using real data, the equations were developed and applied to an eight-year-old rail, revealing significant differences between measured and expected values. This discrepancy can be attributed to variations between railway sections and the statistical model used. It is suggested that a more detailed approach consider individual characteristics of each section and additional variables. This highlights the need for personalized analysis of track wear, considering the diversity of conditions along the railway.

**KEYWORDS:** Railway track. Useful life projection. Simple linear regression. Service life. Wear and tear positions.

## 1. Introdução

Os trilhos representam um dos componentes de maior valor no setor ferroviário brasileiro, atribuído principalmente à natureza de seu material, ao complexo processo de fabricação e à falta de produção nacional. Consequentemente, estender a vida útil desse ativo é uma prioridade para as empresas ferroviárias, visando minimizar e adiar custos adicionais. Para atingir esse objetivo, práticas de manutenção preventiva são empregadas com o intuito de diminuir o desgaste e prevenir o aparecimento de *Rolling Contact Fatigue* (RCF).

O desgaste dos trilhos é definido pela redução da área da seção transversal ao longo de seu período de utilização, o que gera um efeito direto no contato

roda-trilho. Esse processo resulta na alteração das propriedades mecânicas do material, o que pode afetar adversamente a dinâmica veicular ferroviária, comprometendo a confiabilidade e segurança da via permanente [1-3].

O desgaste dos trilhos ferroviários é influenciado por uma variedade de fatores, entre eles:

1. Carga por eixo: Estudos demonstram a relevância da carga por eixo na taxa de desgaste dos trilhos [4; 5; 6];
2. Localização do trilho: A posição do trilho, como em túneis e curvas, impacta seu desgaste [6];
3. Raio de curvatura da via: O raio de curvatura influencia diretamente o desgaste dos trilhos [7];
4. Geometria da via: A configuração da via ferroviária é um fator crítico [8];

5. Velocidade das composições: A velocidade com que os trens operam afeta o desgaste dos trilhos [3];
6. Propriedades metalúrgicas do trilho: As características do material do trilho são determinantes [6];
7. Dinâmica do contato roda-trilho: A interação entre a roda e o trilho é crucial para entender o desgaste [9];
8. Coeficiente de atrito: Este fator é essencial para compreender as forças em jogo [9];
9. Perfil da roda e do trilho: A interação do perfil do trilho e da roda influencia diretamente no desgaste devido à elipse de contato [10].

Esses estudos realçam a complexidade e a multidimensionalidade do fenômeno de desgaste em trilhos ferroviários, sublinhando a importância de uma abordagem holística na manutenção e no traçado das ferrovias para minimizar tais efeitos.

O desgaste dos trilhos ferroviários geralmente se manifesta de duas formas principais: vertical e horizontal/lateral. O desgaste vertical é um fenômeno amplamente observado, resultante do atrito, da abrasão e da carga imposta pelas rodas de vagões e locomotivas. Esse tipo de desgaste leva à redução progressiva da altura do trilho, comprometendo potencialmente a estabilidade da via ferroviária [11].

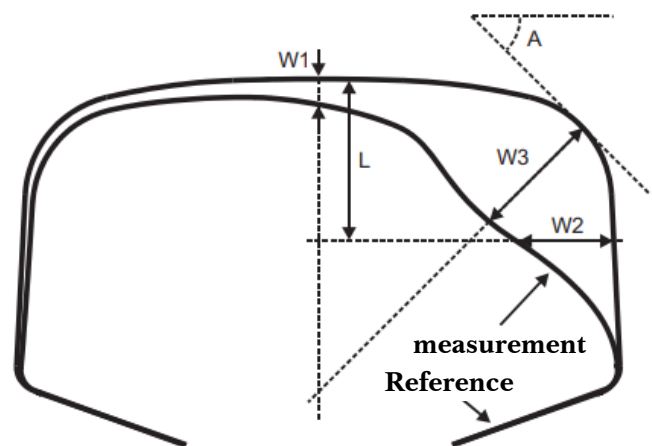
Por outro lado, o desgaste horizontal, ou lateral, afeta as faces laterais dos trilhos, particularmente na parte superior e na base. Esse desgaste é induzido principalmente por forças horizontais geradas, por exemplo, quando os trens circulam em curvas [11].

Para a análise detalhada do desgaste em trilhos, um estudo propôs um método de medição que identifica três áreas críticas, denominadas **W1**, **W2** e **W3**. **W1** corresponde à alteração do perfil vertical na parte superior do trilho. **W2** refere-se à variação horizontal, enquanto **W3** indica a mudança medida em um ângulo de 45° [12]. A ilustração de um trilho, conforme apresentada na Figura 1, esclarece a localização exata de cada um desses parâmetros de medição, oferecendo uma visão clara dos pontos críticos para a avaliação do desgaste.

Os defeitos de RCF surgem de interações cíclicas entre as rodas dos trens e os trilhos durante o transporte. Essas interações resultam em forças de cisalhamento que criam defeitos superficiais tanto

nos trilhos quanto nas rodas. A camada superficial afetada por esses esforços sofre uma deformação plástica, resultando em um aumento de dureza e alterações na microestrutura do material, devido ao encruamento. Esse processo pode levar ao surgimento de trincas superficiais que, se não forem devidamente tratadas, podem evoluir e causar a falha do componente.

**Figura 1** - Parâmetros de análise do desgaste.



**Fonte:** Adaptado [13].

O RCF é caracterizado por padrões específicos de falhas que se manifestam como não conformidades na superfície dos trilhos. Entre as falhas típicas associadas à fadiga de contato, destacam-se:

- *Head checks*: Essas são pequenas trincas que aparecem no canto da bitola do trilho, dispostas aproximadamente a 45° em relação à direção de rolamento, resultantes da tensão cíclica na superfície [14];
- *Shelling*: Conforme descrito por Rice [apud 15], este fenômeno ocorre quando trincas do tipo *head check* se aprofundam e se expandem no interior do trilho, alcançando dimensões significativas. Isso pode levar à escamação do material do trilho, um processo conhecido como *shelling*;
- *Squats*: São caracterizados pelo desprendimento de material da superfície do trilho, formando cavidades. Este tipo de defeito é frequentemente associado ao estresse localizado e ao desgaste acelerado [14].

Essas falhas evidenciam a importância de práticas de manutenção preventiva e monitoramento contínuo da infraestrutura ferroviária, visando mitigar os efeitos prejudiciais do RCF e assegurar a segurança e a longevidade do sistema ferroviário.

A adoção de estratégias como lubrificação no ponto de contato entre roda e trilho e o esmerilhamento representam métodos eficazes na prevenção e atenuação dos efeitos do desgaste e do RCF [16].

A aplicação de lubrificantes desempenha um papel crucial na redução e otimização do atrito no contato roda-trilho, contribuindo significativamente para a diminuição do desgaste desses componentes críticos. Existem principalmente dois tipos de lubrificantes empregados para esse fim, sendo eles:

- Modificadores de atrito: São aplicados na parte superior do trilho com o objetivo de ajustar o nível de atrito entre a roda e o trilho, minimizando assim o desgaste vertical. A utilização de modificadores de atrito ajuda a equilibrar a interação entre as rodas e os trilhos, prolongando a vida útil deles [17];
- Graxa: É aplicada nas laterais dos trilhos, particularmente em curvas de raio apertado. Sua função é mitigar o desgaste horizontal ou lateral, protegendo os trilhos contra os efeitos abrasivos das forças laterais exercidas durante a passagem dos trens [18].

Estudos e práticas no campo demonstram a eficácia dessas abordagens na manutenção da integridade dos sistemas ferroviários [19; 20]. A escolha apropriada e a aplicação cuidadosa de lubrificantes são fundamentais para garantir a eficiência dessas medidas preventivas, destacando-se como componentes vitais na gestão da manutenção ferroviária.

O esmerilhamento de trilhos é uma técnica de manutenção preventiva crucial, destinada à remoção de camadas superficiais que foram deformadas devido ao tráfego constante de trens. Este procedimento é essencial para restaurar a geometria ideal do trilho e melhorar a interação entre a roda e o trilho, eliminando defeitos como o RCF que podem comprometer a estabilidade dos trens durante a circulação [21; 22].

Além do esmerilhamento e da lubrificação, a prática de projetar e estimar o momento adequado para a substituição dos trilhos em serviço emerge como uma estratégia proativa significativa. Esta abordagem visa prever a vida útil restante dos trilhos, permitindo planejar com antecedência as substituições necessárias para manter a segurança e eficiência operacional da via férrea. Tal estimativa é fundamental para a gestão de ativos ferroviários, assegurando que as operações sejam conduzidas de forma segura e econômica, minimizando interrupções e maximizando a longevidade da infraestrutura.

Este estudo teve como objetivo comparar a durabilidade do trilho ferroviário TR-68 em termos de desgaste, utilizando tanto a projeção baseada em métodos estatísticos – especificamente a correlação linear de Pearson e a regressão linear simples – com base em dados concretos, quanto a análise da seção transversal de um trilho retirado de operação após oito anos devido a uma fratura. Os resultados revelaram que não é viável definir uma equação única para cada posição de desgaste, capaz de determinar a vida útil do trilho em toda a extensão de uma ferrovia. Isso se deve à presença de variáveis significativas, como as características do terreno, o volume e tipo de carga transportada – e a velocidade das composições ferroviárias que são específicas para cada trecho e impactam de maneira significativa a previsão da durabilidade do ativo. Além disso, o estudo sugere que a realidade complexa dos trilhos exige a consideração de um conjunto mais amplo de variáveis, indicando que a regressão linear simples pode não ser a metodologia mais precisa para essa finalidade.

## 2. Metodologia estatística para previsão de vida útil dos trilhos

Inicialmente, este estudo focou a análise do nível de correlação entre o desgaste dos trilhos e o volume de carga transportada, expresso em Milhões de Toneladas Brutas Transportadas (MTBT). Para tal, utilizou-se o coeficiente de correlação de Pearson ( $r$ ), determinado conforme a Equação 1, visando quantificar o grau de associação entre essas duas variáveis.

$$r = \frac{n \cdot \sum x_i y_i - (\sum x_i) \cdot (\sum y_i)}{\sqrt{[n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2][n(\sum y_i^2) - \sum y_i^2]}} \quad (1)$$

Neste contexto:

**n** representa o número total de pares de dados analisados;

**x<sub>i</sub>** e **y<sub>i</sub>** correspondem, respectivamente, às variáveis em estudo.

O propósito de examinar o coeficiente de correlação de Pearson (**r**) é determinar o nível de relação linear entre as duas variáveis em questão, **x<sub>i</sub>** e **y<sub>i</sub>** [23].

Ao interpretar o valor de **r** calculado pela Equação 1, é possível extrair diversas inferências, as quais são detalhadamente apresentadas na Tabela 1.

**Tabela 1** - Interpretação do valor obtido para o coeficiente de Pearson (**r**).

Coeficiente de correlação de Pearson ( <b>r</b> )	Correlação linear
$r = 1$	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:** adaptado [14].

Quando o coeficiente de correlação de Pearson (**r**) é igual a 0, isso indica uma ausência de correlação linear entre as variáveis analisadas. Por outro lado, valores de **r** próximos a 1 ou -1 sugerem uma correlação linear forte entre as variáveis, seja ela positiva ou negativa, respectivamente. Uma correlação positi-

va implica que, à medida que uma variável aumenta, a outra também aumenta, enquanto uma correlação negativa indica que o aumento de uma variável resulta na diminuição da outra. Um valor de **r** igual a 1 ou -1 denota uma correlação linear perfeita, seja ela totalmente direta ou inversa.

Além da análise numérica, a relação entre as variáveis pode ser visualizada graficamente por meio de um gráfico de dispersão. Uma disposição das variáveis que se alinhe estreitamente com uma linha reta no gráfico indica uma correlação linear forte (com o coeficiente de Pearson próximo de 1). Em contraste, uma distribuição aleatória das variáveis no gráfico sinaliza uma correlação linear fraca (coeficiente de Pearson próximo de 0) [23].

Com base no coeficiente de Pearson e na observação do gráfico de dispersão, o modelo de regressão linear simples é empregado para elucidar a relação entre as duas variáveis em foco. Este modelo também foi utilizado, neste trabalho, para fazer projeções sobre a vida útil dos trilhos, buscando fornecer uma ferramenta simples para previsões futuras baseadas em dados históricos.

A regressão linear simples é um método estatístico que visa estabelecer uma equação matemática para descrever a relação entre duas variáveis específicas [25; 26]. Essas variáveis são classificadas como:

- Variável dependente (**Y**), também conhecida como variável resposta, que é a variável cujo comportamento se deseja prever ou entender melhor;
- Variável independente (**X**), também chamada de variável explicativa, que é a variável utilizada para fazer as previsões ou explicar as variações na variável dependente.

O modelo teórico para construir essa equação linear simples é delineado conforme a Equação 2 [27]. Este modelo fornece a base para calcular a relação linear entre as variáveis, permitindo previsões e análises fundamentadas sobre como uma variável pode afetar a outra.

$$Y = \alpha X + \beta + \epsilon_i \quad (2)$$

Em que:

**X, Y:** variáveis em análise;

$\alpha$  e  $\beta$ : parâmetros desconhecidos;

$\epsilon_i$ : erro aleatório.

Os valores de  $\alpha$  e  $\beta$  podem ser obtidos utilizando as equações 3 e 4 [27].

$$\beta = \frac{n \cdot \sum xi \cdot yi - (\sum xi) \cdot \sum yi}{n \cdot (\sum xi^2) - (\sum yi)^2} \quad (3)$$

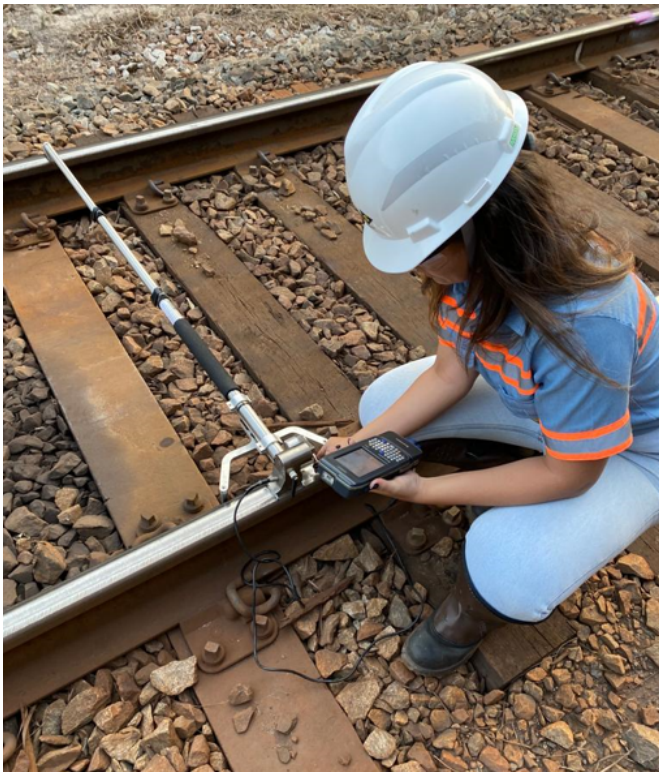
$$\alpha = \bar{y} - \beta \cdot \bar{x} \quad (4)$$

Em que,  $\bar{x}$  é a média dos valores de  $\mathbf{x_i}$  e  $\bar{y}$  é a média dos valores de  $\mathbf{y_i}$ .

### 3. Coleta de dados

Os dados empregados nesta análise estatística, abrangendo correlação linear e regressão linear simples, foram coletados no período entre 2019 e 2022. A pesquisa focou o trilho de perfil Vignole TR-68, utilizando medidas de desgaste específicas (**W1**, **W2** e **W3**). Para a mensuração do desgaste, foi empregado o equipamento MiniProf, conforme demonstrado na Figura 2.

**Figura 2** - Medição em campo com o equipamento mini prof.



Fonte: Autor.

Os dados compilados para esta pesquisa refletem características específicas do sistema ferroviário estudado, incluindo:

- MTBT anual estimado: ~ 150;
- Carga por eixo transportado: 32 toneladas;
- Fluxo: *Heavy Haul* carregado;
- Posição de instalação: Trilho externo em curva de raio médio.

Adicionalmente, a investigação contemplou a análise de uma amostra de trilho que foi substituída devido a uma fratura após oito anos de uso contínuo. A Figura 3 ilustra a seção transversal do trilho afetado, exibindo sinais iniciais de trinca por *shelling* e subsequente progressão por fadiga.

**Figura 3** - Seção transversal da amostra de trilho utilizada nesta pesquisa.



Fonte: Autor.

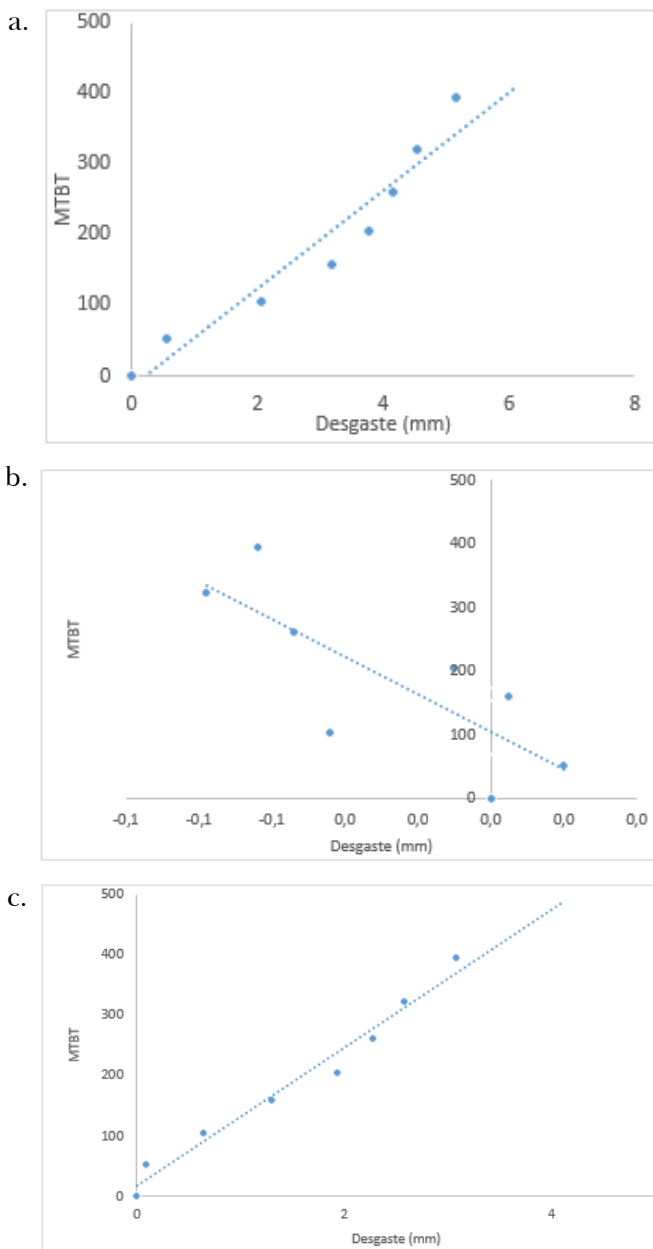
A seguir, encontram-se os dados dessa amostra:

- MTBT anual estimado: ~ 50;
- Carga por eixo transportado: 32 toneladas;
- Fluxo: *Heavy Haul* carregado;
- Posição de instalação: Trilho externo em curva de raio apertado.

### 4. Resultados e discussão

Os gráficos de dispersão foram plotados utilizando o Excel, incluindo linhas de tendência, para examinar possíveis relações visuais entre o MTBT e o desgaste nos trilhos ferroviários, considerando cada posição de desgaste avaliada, conforme ilustrado na Figura 4.

**Figura 4** - gráficos de dispersão com linhas de tendência para as posições (a) w1, (b) w2 e (c) w3.



Fonte: Autor.

Nota-se que, nas posições **W1** e **W3** (Figuras 4a e 4c), há claramente uma relação linear entre as duas variáveis. Em contraste, para a posição **W2** (Figura 4b), conforme os dados coletados em campo, o desgaste observado foi quase inexistente, resultando em valores negativos no MiniProf. Estudos demonstraram que a aplicação do terceiro corpo no contato

roda trilha pode chegar a eliminar o desgaste lateral gerado em curvas com raios entre 437 e 159 m [16].

Posteriormente, calculou-se o grau de associação entre as variáveis, determinando-se o valor do coeficiente de correlação de Pearson ( $r$ ), o coeficiente de determinação ( $r^2$ ) e o coeficiente de determinação ajustado, como demonstrado na Tabela 2.

**Tabela 2** - Valores dos coeficientes de Person ( $r$ ), determinação ( $r^2$ ) e determinação ajustado para as três posições de desgaste.

Posição	$r^2$	$r$	$r^2$ ajustado
<b>W1</b>	0,9287035	0,9636926	0,916820753
<b>W2</b>	0,624447	0,7902196	0,561854795
<b>W3</b>	0,9746352	0,9872361	0,970407679

Fonte: Autor.

Ao analisar os coeficientes de correlação de Pearson ( $r$ ), de determinação ( $r^2$ ) e de determinação ajustado apresentados na Tabela 2, nota-se que os valores para **W1** e **W3** são muito próximos de 1, sugerindo uma forte e positiva correlação linear entre as variáveis (conforme Tabela 1). Por outro lado, para **W2**, observa-se uma correlação linear positiva de intensidade moderada (conforme Tabela 1), o que está em consonância com o padrão observado no gráfico de dispersão para essa posição (Figura 4b). Isso significa que, para a posição **W2**, aproximadamente 79% da variação na variável dependente pode ser explicada pelas variáveis independentes incluídas no modelo. Para as posições **W1** e **W3**, essa explicabilidade é superior, ultrapassando 90%.

Os valores estimados para os parâmetros  $\alpha$  e  $\lambda$  obtidos com apoio do Excel, derivados do modelo de regressão linear, bem como o erro padrão associado, estão detalhadamente descritos na Tabela 3.

As equações associadas ao modelo de regressão ajustado, obtidas com apoio do Excel, conforme especificado na Tabela 3, são as seguintes:

$$W1, MTBT = 69,279Desgaste - 15,485 \quad (5)$$

$$W2, MTBT = -2941,5Desgaste + 104,32 \quad (6)$$

$$W3, MTBT = 114,67Desgaste + 16,545 \quad (7)$$

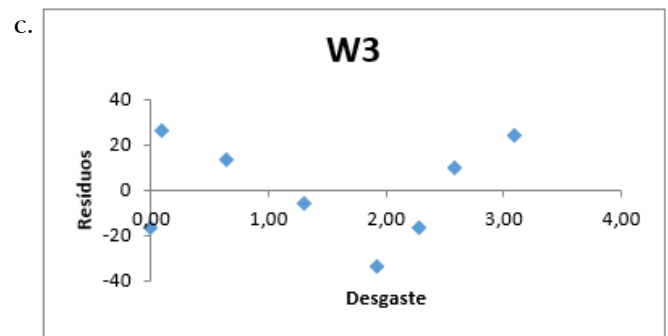
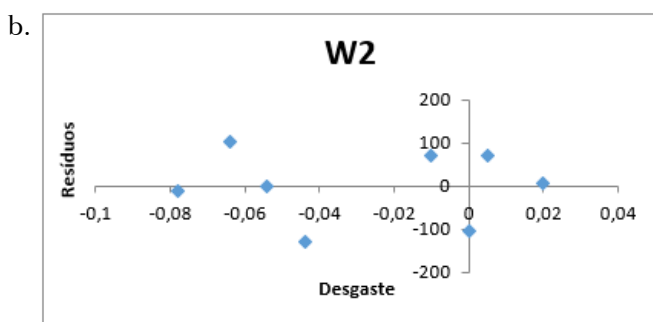
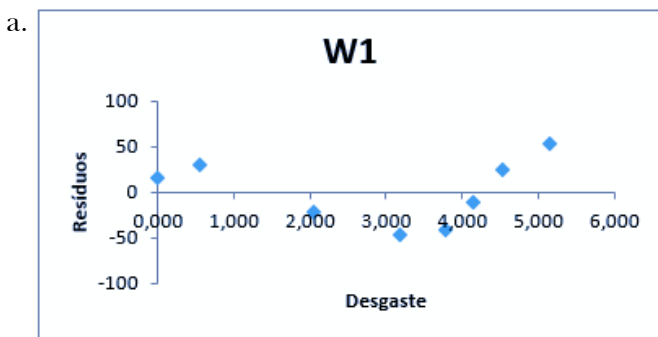
**Tabela 3 -** Coeficientes de regressão linear.

	Modelo	Coeficientes	Erro padrão
W1	MTBT	-15,485	26,736
	Desgaste	69,279	7,8365
W2	MTBT	104,32	41,068
	Desgaste	-2941,5	931,29
W3	MTBT	16,545	41,068
	Desgaste	114,675	931,29

Fonte: Autor.

A Figura 5 exibe os gráficos de resíduos em relação ao desgaste do trilho. Resíduos são as diferenças entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo de regressão. A análise desses resultados pode fornecer insights valiosos sobre a adequação do modelo aos dados reais [28].

**Figura 5 -** Gráficos de resíduos das três posições de desgaste em análise, sendo (a) referente a W1, (b) referente a W2 e (c) referente a W3.



Fonte: Autor.

Analisando os gráficos dos resíduos, verifica-se que eles têm uma distribuição assimétrica. Sendo que os gráficos referentes às posições W1 e W3 (Figuras 5a e 5c, respectivamente) apresentam uma assimetria positiva, enquanto o gráfico para a posição W2 (Figura 5b) tem uma assimetria negativa.

A presença de assimetria nos resíduos pode indicar que o modelo de regressão linear não é ideal para descrever a relação entre as variáveis ou que não há uma linearidade ou heterocedasticidade não capturada pelo modelo. Isso pode apontar para a necessidade de ajustes no modelo, como a inclusão de termos não lineares, transformações de variáveis ou consideração de outras formas de modelagem [28].

Após a análise dos resíduos, verificou-se os resultados da ANOVA (p-valor) para cada uma das posições, sendo eles apresentados na Tabela 4.

**Tabela 4 -** Resultados da ANOVA.

Variável	p-valor
W1	0,0001
W2	0,0196
W3	5,15E-06

Fonte: Autor.

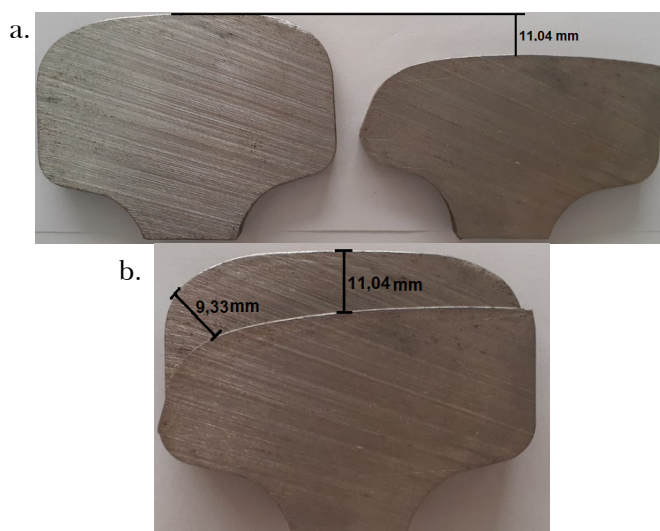
Para valores de p-valor acima de 0,050, não dispomos de evidências que sustentem a afirmação de que o modelo de regressão linear seja significativo para explicar a variável de interesse, indicando que as variáveis independentes não exercem influência sobre a variável dependente. No entanto, se o p-valor for

$\leq 0,050$ , podemos inferir que pelo menos uma das variáveis do modelo é relevante para explicar a variável dependente, ou seja, há influência de pelo menos uma variável independente na variável dependente [28]. Nesse contexto, ao examinar a Tabela 4, observamos que todos os p-valores são inferiores a 0,05. Logo, concluímos que a regressão é estatisticamente significativa, indicando a importância do modelo de regressão linear para explicar a variável dependente.

Utilizando as Equações 5 e 7 e excluindo os dados referentes à posição **W2** devido à baixa taxa de desgaste observada durante o período de análise – conforme evidenciado na Figura 4b –, realizou-se o cálculo estimado para o perfil de desgaste do trilho ferroviário que esteve em operação por um período de oito anos (Figura 3). Os resultados indicaram um desgaste estimado de 5,82 mm na posição **W1** e 3,24 mm na posição **W3**.

Posteriormente, procedeu-se à medição do desgaste real experimentado por esse trilho utilizando um paquímetro e um transferidor para a obtenção dos valores de **W1** e **W3**, conforme ilustrado na Figura 6.

**Figura 6** - (a) Perfil do trilho novo e usado lado a lado e (b) perfil do trilho novo e usado sobrepostos com as devidas medidas de **W1** e **W3**.



**Fonte:** Autor.

Ao avaliar os valores calculados para **W1** (5,82 mm) e **W3** (3,24 mm) usando as Equações 5 e 7 e compará-los com os valores reais registrados para o trilho em

serviço (**W1** = 11,04 mm e **W3** = 9,33 mm), é possível observar uma considerável discrepância. Essa disparidade pode ser atribuída à localização específica de cada trilho na via férrea. O trecho utilizado para derivar a equação apresenta uma curva com raio médio superior a 900 m e aproximadamente 12 MTBT mensais. Em contraste, a amostra que forneceu os valores reais de **W1** e **W3** (Figura 3) estava instalada em um trecho com curva de raio mais apertado, inferior a 250 m e aproximadamente 4 MTBT mensais. Além das divergências no projeto geométrico da via, existe uma significativa disparidade no volume de carga transportada.

No entanto, apesar da discrepância nos valores absolutos encontrados, os valores relativos mantiveram-se consistentes com os dados reais, ou seja, **W1** > **W3**.

Assim, constata-se que, nesse caso, uma única equação baseada na regressão linear simples para cada posição de análise (**W1**, **W2** e **W3**) é inadequada para descrever o comportamento de toda a ferrovia em estudo. O mais indicado seria obtermos equações utilizando a metodologia de regressão multivariável que levasse em consideração diversos parâmetros, como raio de curvatura, MTBT, rampa, lubrificação. Adicionalmente, devido às particularidades presentes em cada seção da ferrovia, seria aconselhável apresentar equações específicas para cada região, considerando suas características individuais.

É relevante destacar que as metodologias relacionadas a modificações no contato roda-trilho como alterações nos perfis da roda e do trilho, a aplicação de modificadores de atrito e o uso de graxa não foram incluídos nos cálculos estatísticos.

## 5. Conclusão

- Os valores medidos de desgaste do trilho que apresentou fratura foram superiores aos calculados para o mesmo trilho usando as equações desenvolvidas neste estudo. No entanto, a correlação indicando que **W1** é maior que **W3** foi consistentemente observada;
- A abordagem de regressão linear simples adotada não conseguiu capturar integralmente todos os fatores presentes na infraestrutura ferroviária

que afetam o desgaste do trilho. Portanto, há uma necessidade de refinamento do modelo por meio da inclusão de outras variáveis que sejam significativas para explicar o fenômeno observado;

- O desgaste está intrinsecamente vinculado às condições do meio em que o ativo está inserido. Logo, a discrepância entre os valores medidos no trilho fraturado e aqueles obtidos pela equação

pode ser atribuída, em parte, à localização dos trilhos. O trilho fraturado encontrava-se em um ambiente com condições completamente distintas daquelas do trilho utilizado como referência para a formulação das equações. Isso pode indicar que uma mesma equação, para cada uma das posições de desgaste (**W1**, **W2** e **W3**), não é adequada para descrever toda uma ferrovia de forma detalhada.

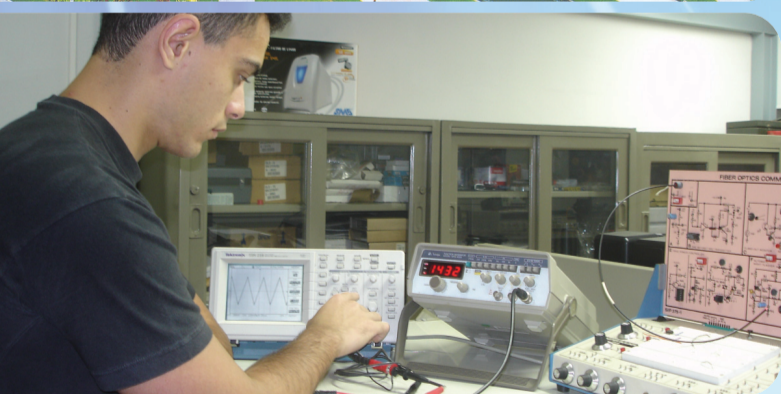
## Referências

- [1] Butini, E. *et al.* Development and validation of wear models by using innovative three-dimensional laser scanners. **Advances in Mechanical Engineering**, Thousand Oaks, v. 11, n. 8, p. 1687814019870402, 2019.
- [2] Jin X. *et al.* A numerical method for prediction of curved rail wear. **Multibody Syst Dyn**, Berlin, v. 18, p. 531-557, 2007.
- [3] Meghoo A.; Loendersloot R.; Tinga T. Rail wear and remaining life prediction using meta-models. **International Journal of Rail Transportation**, Abingdon, v. 8, n. 1, p. 1-26, 2019.
- [4] Westgeest F. P.; Dekker R.; Fischer R. H. Predicting rail geometry deterioration by regression models. *In*: Berenguer C.; Grall A.; Soares, C. G. (Eds.). **Advances in safety, reliability and risk management**. London: CRC Press. p. 926-933.
- [5] Wang J. *et al.* Study on rail profile optimization based on the nonlinear relationship between profile and wear rate. **Mathematical Problems in Engineering**, [s. l.], 2017.
- [6] AL-Juboori, A. *et al.* Evolution of rail surface degradation in the tunnel: the role of water on squat growth under service conditions. **Engineering fracture mechanics**, Amsterdam, v. 209, p. 32-47, 2019.
- [7] Ahac M.; Lakus´ic´ S. Track gauge degradation modelling on small urban rail networks: zagreb tram system case study. *In*: Yaghoubi, H. (Ed.). **Urban transport systems**. Rijeka: InTech, 2017. p. 1-20.
- [8] Soleimani H.; Moavenian M. Tribological aspects of wheel–rail contact: a review of wear mechanisms and effective factors on rolling contact fatigue. **Urban Rail Transit**, Berlin, v. 3, n. 4, p. 227-237, 2017.
- [9] Li, Z. *et al.* An investigation into the causes of squats – correlation analysis and numerical modeling. **Wear**, Amsterdam, v. 265, n. 9-10, p. 1349-1355, 2008.
- [10] Zoeteman, A.; Dollevoet, R.; Li, Z. Dutch research results on wheel/rail interface management: 2001–2013 and beyond. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part F: Journal of Rail and Rapid Transit**, Thousand Oaks, v. 228, n. 6, p. 642-651, 2014.
- [11] Sadeghi J.; Akbari B. Field investigation on effects of railway track geometric parameters on rail wear. **Journal of Zhejiang University-SCIENCE A**, Berlin, v. 7, n. 11, p. 1846-1855, 2006.
- [12] Olofsson, U.; Telliskivi, T. Wear, plastic deformation and friction of two rail steels – a full-scale test and a laboratory study. **Wear**, Amsterdam, v. 254, n. 1-2, p. 80-93, 2003.
- [13] Stock, R.; Pippin, R. RCF and wear in theory and practice—The influence of rail grade on wear and RCF. **Wear**, Amsterdam, v. 271, n. 1-2, p. 125-133, 2011.
- [14] Grassie, S. Fatigue failure is often the hidden hazard. **International Railway Journal**, Falmouth, v. 37, n. 2, 1997.
- [15] Porcaro, R. R. Efeito da soldagem elétrica por centelhamento na microestrutura, propriedades mecânicas e resistência à fadiga de um aço para trilhos ferroviários - análise experimental e numérica. 2019. Tese (Doutorado em Engenharia de Materiais) – REDEMAT, Ouro Preto, 2019.
- [16] Sroba, P. *et al.* The evolution of rail grinding on Canadian Pacific Railway to address deep seated shells in 100% effective lubrication territories. *In*: World Congress on Railway Research, Montreal, Quebec, Canada. 2006, Paris. **Anais [...]**. Paris: International Union of Railways, 2006.
- [17] Jakob Oertli, S. B. B. **Combating Curve Squeal Phase II**. Paris: International Union of Railways, 2005.
- [18] Hardwick, C.; Lewis, R.; Eadie, D. T. Wheel and rail wear—Understanding the effects of water and grease. **Wear**, Amsterdam, v. 314, n. 1-2, p. 198-204, 2014.

- [19] Ferrer, B. P. Avaliação em laboratório do efeito da formulação e das propriedades de graxas lubrificantes no desempenho tribológico do contato roda-trilho. 2020. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica e de Materiais) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2020.
- [20] Hutchings, I.; Shipway, P. **Tribology: friction and wear of engineering materials**. Cambridge: Butterworth-Heinemann, 2017.
- [21] Stock, R.; Schwarzenberger, R.; Kubin, W. Rail milling as an integrated strategy for modern rail asset management. *In: CORE 2018: Rail: Smart, Automated, Sustainable, Conference on Railway Excellence*, 30 April-2 May 2018, Sydney, NSW, Australia. [s.n.], 2018.
- [22] Steyn, E. **Rail surface treatment–grinding and milling–competing or complementary technologies**. 2019. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) – Chalmers University Of Technology, Gothenburg, 2019.
- [23] Rodrigues, S. C. A. **Modelo de regressão linear e suas aplicações**. 2012. Relatório de Estágio – Universidade da Beira Interior, Covilhã, 2012.
- [24] Santos, C. M. A. **Estatística Descritiva – Manual de auto-aprendizagem**. Lisboa: Edições Sílabo, 2007.
- [25] Curral, J. **Statistics Packages: A General Overview**. Glasgow: Universidade de Glasgow, 1994.
- [26] Barbetta, P. A. **Estatística aplicada às Ciências Sociais**. 5. ed. Florianópolis: UFSC, 2003.
- [27] Yamauti, M. M. **Regressão linear simples nos livros de estatística para cursos de Administração: um estudo didático**. 2013. Dissertação (Mestrado em Educação Matemática) – Pontifícia Universidade Católica de São Paulo, São Paulo, 2013.
- [28] Moreira, M. S. *et al.* **Regressão linear simples e múltipla**. Bioestatística quantitativa aplicada. Porto Alegre: UFRGS, 2020.







# PÓS-GRADUAÇÃO NO IME

Bolsas: CAPES, CNPq e FAPERJ

## Mestrado

- Sistemas e Computação
- Engenharia Mecânica

## Mestrado e Doutorado

- Química
- Ciência dos Materiais
- Engenharia de Defesa
- Engenharia Nuclear
- Engenharia Elétrica
- Engenharia de Transportes



Matrículas: Semestral

Tel.: (21) 2546-7114 – Fax: (21) 2546-7089 – [www.ime.eb.br](http://www.ime.eb.br) – [sd1@ime.eb.br](mailto:sd1@ime.eb.br)