

**Universidade Federal de Juiz de Fora
Instituto de Ciências Exatas
Bacharelado em Sistemas de Informação**

Lucas Paiva dos Santos

**Otimização multiobjetivo de concretos geopoliméricos ácidos apoiada por
aprendizado de máquina**

Juiz de Fora
2026

Lucas Paiva dos Santos

**Otimização multiobjetivo de concretos geopoliméricos ácidos apoiada por
aprendizado de máquina**

Trabalho de conclusão de curso apresentado
ao Bacharelado em Sistemas de Informação da
Universidade Federal de Juiz de Fora como re-
quisito parcial à obtenção do título de Bacharel
em Sistemas de Informação.

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Luciana Conceição Dias Campos

Coorientadora: Prof.^a Dr.^a Julia Castro Mendes

Coorientador: Prof. Dr. Aldo Ribeiro de Carvalho

Juiz de Fora

2026

dos Santos, Lucas Paiva.

Otimização multiobjetivo de concretos geopoliméricos ácidos apoiada por aprendizado de máquina / Lucas Paiva dos Santos. – Juiz de Fora, 2026.

61 f. : il.

Orientadora: Luciana Conceição Dias Campos

Coorientadora: Julia Castro Mendes

Coorientador: Aldo Ribeiro de Carvalho

Trabalho de Conclusão de Curso (bacharelado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Bacharelado em Sistemas de Informação, 2026.

1. Concreto Geopolimérico Ácido. 2. Aprendizado de Máquina. 3. Dosagem. 4. Otimização Multiobjetivo. I. Campos, Luciana Conceição Dias, orient. II. Mendes, Julia Castro, coorient. III. de Carvalho, Aldo Ribeiro, coorient. IV. Instituto de Ciências Exatas. V. Título.

Lucas Paiva dos Santos

**Otimização multiobjetivo de concretos geopoliméricos ácidos apoiada por
aprendizado de máquina**

Trabalho de conclusão de curso apresentado
ao Bacharelado em Sistemas de Informação da
Universidade Federal de Juiz de Fora como re-
quisito parcial à obtenção do título de Bacharel
em Sistemas de Informação.

Aprovado em 16 de julho de 2026

BANCA EXAMINADORA

Prof.^a Dr.^a Luciana Conceição Dias Campos – Orientadora
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof.^a Dr.^a Julia Castro Mendes – Coorientadora
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Aldo Ribeiro de Carvalho – Coorientador
Universidade Federal de Ouro Preto

Prof. Dr. Marcelo Caniato Renhe
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Carlos Cristiano Hasenclever Borges
Universidade Federal de Juiz de Fora

AGRADECIMENTOS

Sou imensamente grato a todos os professores e demais servidores da Universidade Federal de Juiz de Fora, que contribuíram, direta ou indiretamente, para minha formação acadêmica e pessoal ao longo da graduação.

De modo especial, agradeço ao Prof. Dr. Igor Knop, ao Prof. Dr. Stênio de Sã e ao Prof. Dr. Marcelo Caniato pela atuação e presença no Grupo de Educação Tutorial em Sistemas de Informação (GetSi), grupo do qual fiz parte durante grande parte da minha trajetória acadêmica e que contribuiu vigorosamente para meu crescimento profissional, científico e humano.

Agradeço também, com veemência e profunda consideração, à Prof.^a Dr.^a Luciana Conceição Dias Campos, à Prof.^a Dr.^a Júlia Castro Mendes e ao Prof. Dr. Aldo Ribeiro de Carvalho pela orientação, paciência, dedicação e apoio no desenvolvimento deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Luciano Jerez, que, no exercício da coordenação do Bacharelado em Sistemas de Informação, não mediu esforços para que eu pudesse lograr a conquista da conclusão desta etapa, registro minha sincera gratidão.

Agradeço ao meu colega e amigo Gabriel Malosto, com quem compartilhei, quase integralmente, a jornada da graduação, tanto nos momentos de dificuldade quanto nas conquistas.

Especialmente, agradeço à minha mãe, Denise dos Reis Paiva, por tudo aquilo que se pode agradecer a quem me deu a vida e, comigo, a enfrenta sem hesitação.

RESUMO

A dosagem de concretos geopoliméricos consiste na definição das proporções adequadas entre precursor, ativador, agregados e aditivos, de modo que o material produzido atenda a requisitos de desempenho, como resistência mecânica, custo e menor impacto ambiental. Como ainda não há métodos consolidados para a dosagem desse tipo de concreto, este estudo propõe uma abordagem baseada em aprendizado de máquina e otimização evolutiva para auxiliar na definição de traços mais eficientes. Foram produzidos 44 traços utilizando metacaulim como precursor e ácido fosfórico como ativador, cujos resultados de resistência à compressão foram empregados no treinamento de três modelos preditivos: *rede neural multicamadas (MLP)*, *random forest (RF)* e *extreme gradient boosting (XGBoost)*. Os modelos foram avaliados por validação cruzada *leave-one-out*, sendo a *MLP* o modelo com melhor desempenho. Em seguida, esse modelo foi integrado ao algoritmo genético *non-dominated sorting genetic algorithm II (NSGA-II)* para realizar uma otimização multiobjetivo, considerando simultaneamente a maximização da resistência à compressão e a minimização do custo e das emissões de CO_2 . A abordagem orientou a seleção de um traço com custo de $19,70 \frac{R\$}{kg}$, emissão de $0,62 \frac{kgCO_2}{kg}$ e resistência à compressão prevista de 32,41 MPa. Esse traço foi posteriormente produzido em laboratório, alcançando resistência de 32,8 MPa no melhor resultado experimental. Os resultados indicam que a abordagem proposta pode reduzir a dependência de ensaios laboratoriais extensivos e orientar a seleção de traços com melhor equilíbrio entre desempenho mecânico, viabilidade econômica e impacto ambiental. Dessa forma, o uso combinado de aprendizado de máquina e otimização evolutiva mostra-se promissor para acelerar o desenvolvimento de concretos geopoliméricos ácidos, economizando tempo, recursos financeiros e materiais.

Palavras-chave: Concreto Geopolimérico Ácido; Aprendizado de Máquina; Dosagem; Otimização Multiobjetivo.

ABSTRACT

The mix design of geopolymer concretes consists of defining the appropriate proportions of precursor, activator, aggregates, and admixtures so that the produced material meets performance requirements, such as mechanical strength, cost, and reduced environmental impact. Since there are still no consolidated mix design methods for this type of concrete, this study proposes an approach based on machine learning and evolutionary optimization to support the definition of more efficient mixtures. A total of 44 mixtures were produced using metakaolin as the precursor and phosphoric acid as the activator, and their compressive strength results were used to train three predictive models: **MLP**, **RF**, and **XGBoost**. The models were evaluated using **leave-one-out** cross-validation, with **MLP** achieving the best performance. This model was then integrated with the **NSGA-II** genetic algorithm to perform multi-objective optimization, simultaneously considering the maximization of compressive strength and the minimization of cost and CO_2 emissions. The approach guided the selection of a mixture with a cost of $19.70 \frac{BRL}{kg}$, emissions of $0.62 \frac{kgCO_2}{kg}$, and a predicted compressive strength of 32.41 MPa. This mixture was subsequently produced in laboratory, reaching a compressive strength of 32.8 MPa in the best experimental result. The results indicate that the proposed approach can reduce dependence on extensive laboratory testing and guide the selection of mixtures with a better balance between mechanical performance, economic feasibility, and environmental impact. Thus, the combined use of machine learning and evolutionary optimization shows promise for accelerating the development of acid geopolymer concretes, saving time, financial resources, and materials.

Keywords: Acid Geopolymer Concrete; Machine Learning; Mix Design; Multi-objective Optimization.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	— Funcionamento do random forest (RF)	20
Figura 2	— Funcionamento do extreme gradient boosting (XGBoost)	22
Figura 3	— Neurônio artificial	23
Figura 4	— Rede neural artificial perceptron multicamadas	24
Figura 5	— Fronteira de Pareto	26
Figura 6	— Ordenação não dominada	27
Figura 7	— Distância de aglomeração	28
Figura 8	— Funcionamento do NSGA-II	30
Figura 9	— Validação cruzada <i>k-fold</i>	33
Figura 10	— Fluxograma geral da pesquisa	35
Figura 11	— Corpos de prova	37
Figura 12	— Fluxo das etapas computacionais	40
Figura 13	— Fluxo das etapas computacionais	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 — Traços de concreto geopolimérico avaliados experimentalmente	38
Tabela 2 — Estatísticas dos modelos de aprendizado de máquina	44
Tabela 3 — Fronteira gerada pela associação com extreme gradient boosting (XG-Boost)	46
Tabela 4 — Exemplo de fronteira gerada pela associação com rede neural multicamadas (MLP)	47
Tabela 5 — Traços mais frequentes encontrados na associação com rede neural multicamadas (MLP).	48

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	10
1.1 MOTIVAÇÃO	10
1.2 OBJETIVOS	12
1.2.1 Objetivo geral	12
1.2.2 Objetivos específicos	12
1.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	12
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	14
2.1 GEOPOLÍMEROS	14
2.1.1 Propriedades e aplicações dos geopolímeros ácidos	16
2.1.2 Dosagem de concretos	17
2.2 APRENDIZADO DE MÁQUINA	19
2.2.1 Random Forest (RF)	20
2.2.2 Extreme Gradient Boosting (XGBoost)	21
2.2.3 Redes Neurais Perceptron Multicamadas (MLP)	23
2.3 COMPUTAÇÃO EVOLUCIONISTA	25
2.3.1 Otimização multiobjetivo	25
2.3.2 Algoritmos genéticos	26
2.3.2.1 Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II)	26
2.4 AVALIAÇÃO DOS MODELOS	30
2.4.1 Coeficiente de determinação (R^2)	30
2.4.2 Raiz do erro quadrático médio (RMSE)	31
2.5 TREINAMENTO DOS MODELOS DE APRENDIZADO DE MÁQUINA	32
3 METODOLOGIA	35
3.1 MATERIAIS	36
3.2 MOLDAGEM E CARACTERIZAÇÃO DOS CORPOS DE PROVA	37
3.3 FASE COMPUTACIONAL	39

3.3.1 Treinamento dos modelos de aprendizado de máquina	40
3.3.2 Estratégia de validação	41
3.3.3 Critério aplicado aos modelos de aprendizado de máquina	41
3.3.4 Otimização com NSGA-II	42
3.3.5 Análise das fronteiras obtidas	43
3.4 VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL	43
4 RESULTADOS	44
4.1 MODELOS DE APRENDIZADO DE MÁQUINA	44
4.2 OTIMIZAÇÃO	46
4.3 VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DO TRAÇO SELECIONADO	49
5 CONCLUSÃO	51
REFERÊNCIAS	53
GLOSSÁRIO	61

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

A construção civil desempenha papel fundamental no desenvolvimento econômico e social do país, sendo responsável pela produção da infraestrutura necessária para o crescimento urbano, industrial e habitacional. Entretanto, o setor também figura entre os maiores consumidores de recursos naturais e geradores de impactos ambientais em escala global. Entre esses impactos, destaca-se a produção do cimento Portland, principal ligante empregado na fabricação de concretos e argamassas. O processo de fabricação do cimento envolve elevada emissão de dióxido de carbono (CO_2), associada tanto à queima de combustíveis fósseis quanto à decomposição térmica do calcário durante a produção do clínquer (Liu *et al.*, 2021). Estima-se que a produção e o uso do cimento Portland sejam responsáveis por aproximadamente 8% das emissões globais de CO_2 (Provis; Bernal, 2014).

Diante desse cenário, cresce o interesse pelo desenvolvimento de materiais cimentícios alternativos capazes de reduzir os impactos ambientais associados ao cimento Portland sem comprometer o desempenho mecânico e a segurança estrutural das edificações. Nesse contexto, os geopolímeros surgem como uma alternativa promissora, destacando-se pelo menor potencial de emissão de carbono e pela possibilidade de utilização de resíduos industriais e materiais ricos em aluminossilicatos em sua composição (Carvalho *et al.*, 2023a). Esses materiais são produzidos a partir da combinação de substâncias ricas em alumínio e silício com agentes ativadores químicos, formando um material cimentício capaz de substituir parcial ou totalmente o cimento convencional. Diferentemente do cimento Portland, os geopolímeros não necessitam da etapa de produção do clínquer, reduzindo significativamente a demanda energética e o impacto ambiental do processo produtivo (Carvalho *et al.*, 2023a).

Os geopolímeros podem ser classificados em dois grupos principais: básicos e ácidos. Os geopolímeros de ativação básica, também denominados álcalis-ativados, representam a categoria mais consolidada na literatura científica (Davidovits, 2020). Nesse tipo de material, utilizam-se ativadores alcalinos, como hidróxido de sódio e silicato de sódio, responsáveis pela formação de uma estrutura ligante com elevada resistência mecânica e durabilidade (Davidovits, 2020; Kaze *et al.*, 2021). Por outro lado, os geopolímeros ácidos representam uma linha de pesquisa mais recente e ainda pouco explorada. Sua produção geralmente utiliza ácido fosfórico como agente ativador, permitindo a formação de materiais com propriedades promissoras para aplicações estruturais e industriais (Kaze *et al.*, 2021). Estudos indicam que essa classe de materiais pode apresentar elevada resistência à compressão, estabilidade térmica e resistência a ambientes agressivos, como exposição a altas temperaturas e agentes corrosivos (Chen *et al.*, 2021a; Gao *et al.*, 2017). Apesar desse potencial, os geopolímeros ácidos ainda apresentam lacunas significativas na literatura científica, especialmente no que se refere ao desenvolvimento de concretos geopoliméricos. Os estudos existentes concentram-se principalmente na formulação de pastas e argamassas geopoliméricas, havendo escassez de pesquisas relacionadas ao comportamento mecânico, à durabilidade e à formulação otimizada de concretos geopoliméricos ácidos (Chen *et al.*, 2021b).

A dosagem do concreto constitui uma etapa essencial para garantir o desempenho adequado das estruturas, pois define as proporções entre os materiais que compõem a mistura, como ligante, agregados, água, aditivos. Essa composição proporcional é conhecida como traço de concreto e pode ser compreendida como a “receita” do material, isto é, a indicação das quantidades relativas de cada componente utilizadas na mistura. Dessa forma, um traço não representa apenas a escolha dos materiais empregados, mas também a relação entre eles, determinando, por exemplo, quanto de agregado, ligante e ativador será utilizado em comparação aos demais constituintes. A definição adequada do traço influencia diretamente as propriedades do concreto no estado fresco e endurecido, como trabalhabilidade, resistência à compressão, durabilidade, custo e impacto ambiental (Carvalho *et al.*, 2023b). Historicamente, os métodos de dosagem foram desenvolvidos com base em relações empíricas, apoiando-se em tabelas, ábacos e extensa experimentação laboratorial (Paixão *et al.*, 2022). Entretanto, a crescente demanda por estruturas mais resistentes e duráveis impulsionou o desenvolvimento de métodos mais precisos e científicos.

Embora os métodos tradicionais de dosagem sejam amplamente utilizados e validados, sua principal limitação reside na dependência de grande quantidade de ensaios experimentais. Cada novo traço exige diversos testes laboratoriais para ajustar variáveis como proporção dos materiais, tipo de precursor, quantidade de ativador e utilização de aditivos, tornando o processo custoso, demorado e intensivo em consumo de materiais. Essa limitação é ainda mais evidente no caso dos concretos geopoliméricos ácidos, para os quais não existem normas técnicas consolidadas nem metodologias de dosagem amplamente estabelecidas. Essa ausência de métodos consolidados também impossibilita a formulação de equações capazes de representar adequadamente a relação complexa e não linear entre as proporções dos componentes e a resistência à compressão do material. Diante dessa limitação, o aprendizado de máquina apresenta-se como uma alternativa para identificar tais relações a partir de dados experimentais, permitindo estimar o desempenho de novas composições sem depender exclusivamente de formulações analíticas ou da realização de ensaios para cada traço.

Nesse contexto, técnicas de inteligência artificial, especialmente aprendizado de máquina e algoritmos genéticos, têm se mostrado alternativas promissoras para auxiliar a modelagem e otimização de materiais cimentícios. Esses modelos podem ser utilizados para relacionar diferentes composições de traços às propriedades mecânicas resultantes, como resistência à compressão e durabilidade (Paixão *et al.*, 2022; Penido *et al.*, 2022).

Os algoritmos genéticos utilizam mecanismos semelhantes aos processos evolutivos para buscar combinações capazes de otimizar simultaneamente diferentes objetivos, como resistência mecânica, custo e emissão de CO_2 (Lambora; Gupta; Chopra, 2019; Schmitt, 2001). Em geral, esses objetivos apresentam natureza conflitante, pois o aumento da resistência à compressão pode exigir maiores teores de materiais ligantes ou ativadores, o que tende a elevar tanto o custo quanto as emissões de CO_2 associadas ao traço. Em problemas de engenharia envolvendo múltiplas variáveis e relações complexas, como ocorre na dosagem de concretos geopoliméricos, essa abordagem permite explorar diferentes soluções de maneira eficaz. Espera-se que essa abordagem permita reduzir a dependência de experimentação extensiva, acelerar o

desenvolvimento de novos materiais cimentícios e contribuir para a criação de soluções mais sustentáveis e eficientes para a construção civil.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo geral

Desenvolver e avaliar uma abordagem integrada baseada em aprendizado de máquina e otimização por algoritmos genéticos para apoiar o processo de dosagem de concretos geopoliméricos ácidos, permitindo a predição de propriedades mecânicas e a identificação de composições otimizadas que equilibrem resistência à compressão, custo de produção e emissões de dióxido de carbono.

1.2.2 Objetivos específicos

- a) Desenvolver e avaliar modelos de aprendizado de máquina capazes de prever a resistência à compressão dos concretos geopoliméricos ácidos a partir das proporções dos materiais constituintes;
- b) Comparar o desempenho dos modelos **MLP**, **RF** e **XGBoost** artificial, utilizando métricas de avaliação e estratégias de validação adequadas ao tamanho reduzido da base experimental;
- c) Integrar o modelo preditivo selecionado ao algoritmo **NSGA-II**, visando maximizar a resistência à compressão e minimizar simultaneamente o custo e as emissões de CO_2 dos traços;
- d) Analisar as soluções obtidas nas fronteiras de Pareto, identificando os traços com melhor equilíbrio entre desempenho mecânico, viabilidade econômica e impacto ambiental;
- e) Validar experimentalmente o algoritmo desenvolvido, verificando a compatibilidade entre os resultados previstos pelo modelo e os valores obtidos nos ensaios de resistência à compressão.

1.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

Este trabalho está organizado em cinco capítulos. O primeiro capítulo apresenta a introdução, na qual são contextualizados o tema da pesquisa, a motivação do estudo e os objetivos geral e específicos.

O segundo capítulo corresponde à fundamentação teórica, reunindo os principais conceitos necessários para o entendimento do desenvolvimento da pesquisa. Nesse capítulo, são abordados aspectos relacionados aos geopolímeros, com ênfase nos sistemas de ativação ácida, além dos fundamentos sobre dosagem de concreto, aprendizado de máquina e algoritmos de otimização multiobjetivo.

O terceiro capítulo descreve os materiais e métodos utilizados no estudo. São apresentados os materiais empregados na produção dos traços, os procedimentos laboratoriais adotados para moldagem e caracterização dos corpos de prova, bem como a estruturação da base de dados, o treinamento dos modelos preditivos e a aplicação do algoritmo de otimização.

O quarto capítulo apresenta e discute os resultados obtidos. Inicialmente, são analisados os desempenhos dos modelos de aprendizado de máquina na previsão da resistência à compressão. Em seguida, são discutidos os resultados da otimização multiobjetivo, considerando simultaneamente resistência mecânica, custo e emissões de CO_2 .

Por fim, o quinto capítulo reúne as conclusões do trabalho, destacando as principais contribuições da abordagem proposta, suas limitações e possíveis direcionamentos para pesquisas futuras.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A fundamentação teórica deste trabalho apresenta os principais conceitos relacionados aos geopolímeros, com ênfase nos sistemas ativados em meio ácido, e discute a aplicação de técnicas de aprendizado de máquina e otimização multiobjetivo na dosagem de materiais cimentícios.

2.1 GEOPOLÍMEROS

O desenvolvimento dos geopolímeros está relacionado a uma trajetória de pesquisas sobre materiais aluminossilicatados que antecede a própria criação do termo. Entre os estudos iniciais, destacam-se publicações reunidas no Journal of Research of the National Bureau of Standards, que investigaram processos envolvendo argilas e bauxitas voltados à extração de alumina de minérios (Standards, 1946). Embora esses estudos ainda não tratassem dos geopolímeros como uma classe de materiais, eles contribuíram para o entendimento de processos envolvendo matérias-primas minerais ricas em alumínio e silício.

A consolidação desse campo ocorreu principalmente a partir das pesquisas conduzidas por Joseph Davidovits na década de 1970. Em 1972, Davidovits e Latapie investigaram a reação da caulinita, componente presente em argilas, com soda cáustica a 150 °C, no contexto do desenvolvimento de materiais resistentes ao fogo (Davidovits, 2020). Poucos anos depois, Davidovits e Legrand (1977) desenvolveram uma mistura de caulinita/quartzo combinada com NaOH sólido e água, originando uma tecnologia denominada “Processo Siliface”. Esse processo, baseado na geossíntese, consistia na aglomeração de partículas ou fibras minerais submetidas à pressão e ao aquecimento (Davidovits; Legrand, 1977).

Posteriormente, Davidovits (1976) avançou nesses estudos ao observar que materiais de aluminossilicato, como a caulinita, poderiam ser transformados em produtos inorgânicos tridimensionais por meio de técnicas semelhantes às empregadas na policondensação de resinas orgânicas. Como resultado, foram obtidas rochas artificiais porosas, com características zeolíticas, consideradas a primeira geração de materiais Siliface.

O surgimento dos geopolímeros, propriamente dito, é associado ao ano de 1979, quando Davidovits apresentou a segunda geração de Siliface. Nesse momento, foi descrito um material não inflamável, não combustível e capaz de atuar como ligante, obtido a partir da ativação alcalina da caulinita (Davidovits, 2020). A partir desse trabalho, o termo “geopolímero” passou a ser empregado para designar essa nova classe de materiais. A palavra combina o prefixo “geo”, em referência à origem mineral e à presença de óxidos de alumínio e silício abundantes na superfície terrestre, com o sufixo “polímero”, relacionado ao processo de polimerização envolvido na formação do material (Davidovits, 2020).

Assim, historicamente, os geopolímeros podem ser compreendidos como uma classe de ligantes inorgânicos desenvolvida a partir da busca por materiais minerais de alto desempenho, especialmente resistentes ao fogo e capazes de substituir ligantes convencionais em determinadas aplicações. Do ponto de vista conceitual, são definidos como polímeros minerais tridimensionais de aluminossilicatos, com fases amorfas ou semicristalinas (Cui *et al.*, 2011).

Os geopolímeros são formados pela reação entre um material precursor sólido e um agente ativador. O precursor trata-se de um material sólido, de granulometria fina, e composto de alumínio e silício, podendo também conter ferro em quantidades relevantes, enquanto o ativador pode apresentar natureza alcalina ou ácida (Carvalho *et al.*, 2023a; Kaze *et al.*, 2021). A interação entre esses componentes promove a formação de uma matriz inorgânica com estrutura tridimensional, capaz de conferir resistência mecânica ao material.

Entre os precursores geopoliméricos mais estudados, destacam-se o metacaulim (Guo *et al.*, 2021), as cinzas volantes (Guo *et al.*, 2021), a escória de alto-forno (Li *et al.*, 2023), as cinzas de biomassa (Somna *et al.*, 2022), as argilas naturais (Li *et al.*, 2023), a lama vermelha (Muraleedharan; Nadir, 2021) e rejeitos provenientes da mineração (Carvalho *et al.*, 2023a). Esses materiais são de interesse porque apresentam teores significativos de SiO_2 , Al_2O_3 e, em alguns casos, Fe_2O_3 , óxidos que participam das reações de formação da matriz geopolimérica (Carvalho *et al.*, 2023a; Li *et al.*, 2023; Zhang *et al.*, 2016).

A composição química e a granulometria do precursor são fatores determinantes para o desempenho do geopolímero. Partículas menores tendem a apresentar maior área superficial, o que favorece a dissolução do precursor e acelera as reações de geopolimerização (Carvalho *et al.*, 2023a). (Carvalho *et al.*, 2023a; Gao *et al.*, 2020; Kaze *et al.*, 2021).

A escolha do precursor também envolve aspectos econômicos e ambientais. Materiais residuais apresentam potencial para reduzir impactos ambientais, pois permitem a reinserção de subprodutos industriais na cadeia produtiva e se alinham aos princípios da economia circular (Konduru; Karthiyaini, 2024). Contudo, resíduos frequentemente apresentam variabilidade química e física entre lotes, o que dificulta a padronização do material final e exige caracterização rigorosa (Carvalho *et al.*, 2025; Lopes; Lopes; Fernandes, 2023). Precursores oriundos de processos industriais, como o metacaulim, possuem composição mais controlada e maior uniformidade, embora geralmente apresentem custo mais elevado.

Além do precursor, o agente ativador exerce papel central na formação do geopolímero. Em sistemas alcalinos, são comuns soluções de hidróxido de sódio, hidróxido de potássio, silicato de sódio e outros silicatos alcalinos (Davidovits, 2008). Esses ativadores promovem um meio de pH elevado, favorecendo a dissolução de espécies de silício e alumínio e a posterior formação da rede geopolimérica (Provis; Bernal, 2014; Sotelo-Piña; Aguilera-González; Martínez-Luévanos, 2019; Torres-Carrasco, 2017). Em sistemas ácidos, o ácido fosfórico é o ativador mais recorrente, especialmente em estudos envolvendo metacaulim e outros precursores ricos em alumínio (Liu *et al.*, 2021; Provis; Bernal, 2014; Zhang *et al.*, 2016).

Os geopolímeros de ativação alcalina, também chamados de geopolímeros básicos, constituem a classe mais consolidada na literatura. Nesse tipo de material, o ativador alcalino promove a dissolução ou despolimerização parcial do precursor, liberando compostos de silício e alumínio em solução (Davidovits, 2020). Posteriormente, essas espécies passam por etapas de reorganização, condensação e endurecimento, formando uma rede tridimensional de aluminossilicatos frequentemente associada à elevada resistência à compressão, baixa permeabilidade e boa durabilidade (Carvalho *et al.*, 2025; Provis; Bernal, 2014; Sotelo-Piña; Aguilera-González; Martínez-Luévanos, 2019; Torres-Carrasco, 2017).

A literatura sobre geopolímeros alcalinos já apresenta estudos envolvendo pastas, argamassas e concretos. Isso demonstra um estágio de maior maturidade científica e tecnológica, no qual a discussão não se limita apenas à viabilidade química do material, mas também inclui aspectos de dosagem, desempenho mecânico, durabilidade, custo e emissões de carbono (Huynh *et al.*, 2020; Le-ping *et al.*, 2010; Louati; Baklouti; Samet, 2016). Apesar disso, a adoção desses materiais em larga escala ainda enfrenta desafios, como a variabilidade dos precursores, a falta de normatização consolidada e os cuidados necessários no manuseio de soluções alcalinas concentradas (Carvalho *et al.*, 2025).

Os geopolímeros ácidos representam uma linha de pesquisa mais recente e menos consolidada quando comparada aos geopolímeros alcalinos. Em geral, esses materiais são sintetizados pela combinação de um precursor rico em alumínio, silício e, em alguns casos, ferro, com uma solução ácida, sendo o ácido fosfórico o ativador mais utilizado (Carvalho *et al.*, 2023a).

A formação de geopolímeros em meio ácido ocorre por mecanismos diferentes daqueles observados em sistemas alcalinos. Nos geopolímeros à base de ácido fosfórico, os sítios ativos de Al–O presentes no precursor, como o metacaulim, interagem com unidades tetraédricas de PO_4 provenientes da solução ácida (Louati *et al.*, 2014). As cargas associadas às espécies reativas de fosfato são equilibradas pelas cargas dos tetraedros de alumínio, favorecendo a formação de fases fosfatadas (Wang; Provis; Dai, 2018).

Além do alumínio, estudos recentes indicam que o ferro pode desempenhar papel relevante em geopolímeros ácidos. Em precursores com teor significativo de ferro, pode ocorrer a formação de fases fosfatadas associadas ao Fe , como estruturas de fosfato férrico, que contribuem para a formação da matriz e para o ganho de resistência (Carvalho *et al.*, 2023a; Kaze *et al.*, 2021). Essas estruturas comportam-se de maneira semelhante à berlinita ($AlPO_4$), porém formada a partir da interação do Fe , resultando em $FePO_4$. Essa possibilidade é particularmente importante para o aproveitamento de rejeitos de minério de ferro e outros resíduos ricos em Fe_2O_3 como precursores geopoliméricos.

As propriedades dos geopolímeros ácidos dependem de variáveis como tipo de precursor, concentração do ácido fosfórico, relação solução/precursor, razão molar P/Al , granulometria, temperatura e tempo de cura (Carvalho *et al.*, 2023a; Louati *et al.*, 2014; Tang *et al.*, 2022). A concentração molar do ativador é especialmente importante, pois concentrações insuficientes podem limitar a dissolução do precursor e a formação dos produtos de geopolimerização, enquanto concentrações excessivas podem comprometer o equilíbrio das reações e a formação da matriz (Majdoubi *et al.*, 2023; Tchakouté; Rüschler, 2017).

2.1.1 Propriedades e aplicações dos geopolímeros ácidos

Os geopolímeros ácidos têm sido investigados em razão de propriedades como resistência mecânica, estabilidade térmica, resistência química e potencial de aplicação em ambientes agressivos. Sistemas à base de ácido fosfórico podem formar fases fosfáticas estáveis, como $AlPO_4$, inclusive com transformação para berlinita em temperaturas elevadas, o que contribui para a manutenção ou o aumento da resistência em condições nas quais materiais cimentícios convencionais tendem a perder desempenho (Carvalho *et al.*, 2023a; Wang; Provis; Dai, 2018).

Essa estabilidade torna os geopolímeros ácidos promissores para aplicações sujeitas a altas temperaturas, materiais refratários, componentes expostos ao fogo e elementos submetidos a condições químicas agressivas (Carvalho *et al.*, 2023a). Em comparação, concretos convencionais à base de cimento Portland podem sofrer degradação em ambientes ácidos, pois seus produtos de hidratação, especialmente fases ricas em cálcio, são vulneráveis à dissolução e à formação de compostos expansivos (Damion; Chaunsali, 2022).

Como os geopolímeros apresentam matrizes químicas distintas e, em alguns casos, menor teor de cálcio, podem apresentar maior resistência a determinados agentes agressivos (Carvalho *et al.*, 2023a; Kaze *et al.*, 2021). Outra propriedade de interesse é o potencial de isolamento térmico. Lassinantti Gualtieri *et al.* (2012) produziram geopolímeros de fosfato celular utilizando metacaulim e calcário como agente formador de poros, obtendo materiais com alta porosidade e baixa condutividade térmica.

(Morsy *et al.*, 2019) também demonstraram que materiais à base de ácido fosfórico podem ser empregados como isolantes térmicos. En-naji *et al.* (2023) obtiveram materiais porosos com condutividade térmica de 0,08 W/mK, indicando potencial para aplicações não estruturais, como painéis, elementos de vedação, proteção térmica e materiais leves. Apesar desses avanços, a maior parte dos estudos sobre geopolímeros ácidos ainda se concentra em pastas (Carvalho *et al.*, 2023a). A literatura indica que geopolímeros alcalinos já foram estudados em pastas (Ahmad *et al.*, 2021), argamassas (Zhang *et al.*, 2020) e concretos (Huynh *et al.*, 2020), enquanto os geopolímeros à base de fosfato permanecem pouco explorados e aparecem principalmente no formato de pasta (Kaze *et al.*, 2021), com precursores como caulim, metacaulim, caulinita, cinza volante, argilas naturais e argilas ricas em ferro (Kaze *et al.*, 2021; Le-ping *et al.*, 2010; Louati; Baklouti; Samet, 2016). Essa limitação evidencia uma lacuna relevante para o desenvolvimento de concretos geopoliméricos ácidos, pois a transição de pasta para concreto introduz maior complexidade ao sistema.

Em um concreto, além da matriz ligante, há agregados miúdos e graúdos, interfaces pasta-agregado, vazios, necessidade de trabalhabilidade, risco de segregação, empacotamento granulométrico e compatibilidade entre materiais. Portanto, ainda que os resultados obtidos em pastas geopoliméricas ácidas sejam promissores, eles não podem ser automaticamente extrapolados para concretos. O desenvolvimento de concretos geopoliméricos ácidos deve ser compreendido como uma fronteira de pesquisa que exige validação experimental cuidadosa, especialmente quanto à resistência à compressão, absorção de água, porosidade, durabilidade, estabilidade térmica, compatibilidade com agregados e comportamento em longo prazo.

2.1.2 Dosagem de concretos

A dosagem de concretos consiste na definição das proporções entre ligante, agregados, água, aditivos e demais componentes, de modo a atender requisitos de resistência, durabilidade, trabalhabilidade, custo e impacto ambiental. Em concretos de cimento Portland, esse processo é apoiado por décadas de experiência, normas técnicas, métodos empíricos e bases de dados experimentais. No caso dos geopolímeros, sobretudo dos geopolímeros ácidos, a ausência de metodologias consolidadas torna a formulação mais dependente de tentativa e erro.

Essa dificuldade decorre da grande quantidade de variáveis envolvidas. O desempenho final de um geopolímero depende da composição química do precursor, da granulometria, da relação entre precursor e ativador, da molaridade do ativador, das condições de cura e da interação entre matriz e agregados (Carvalho *et al.*, 2023a; Louati *et al.*, 2014; Tang *et al.*, 2022). Em concretos geopoliméricos ácidos, a complexidade é ainda maior, pois a literatura disponível é limitada e ainda não há uma base robusta de resultados experimentais capaz de orientar, com segurança, a escolha de traços.

Modelos preditivos podem identificar relações não lineares entre variáveis de entrada, como teores de precursor, ativador e agregados, e variáveis de saída, como resistência à compressão (Li *et al.*, 2023). Uma vez treinados com dados experimentais, esses modelos podem estimar o desempenho de novas composições e reduzir a necessidade de ensaios laboratoriais extensivos (Carvalho *et al.*, 2025; Mohtasham Moein *et al.*, 2023).

A literatura recente demonstra o interesse crescente na aplicação de inteligência artificial a materiais geopoliméricos. Carvalho *et al.* (2025) identificaram que técnicas de IA têm sido aplicadas principalmente para previsão de resistência à compressão e trabalhabilidade, embora ainda existam lacunas importantes, especialmente em geopolímeros sintetizados em meio ácido. Li *et al.* (2023) desenvolveram um modelo de otimização para concreto geopolimérico alcalino de escória e cinza volante considerando resistência à compressão, custo e emissões de carbono, demonstrando que a combinação entre aprendizado de máquina e algoritmos de otimização pode apoiar a definição de traços mais eficientes.

Para fundamentar essa abordagem, as próximas subseções apresentam os conceitos de aprendizado de máquina e de otimização multiobjetivo, destacando como essas técnicas podem ser aplicadas à previsão de propriedades mecânicas e à busca por composições que equilibrem desempenho técnico, custo e impacto ambiental.

No caso específico dos concretos geopoliméricos ácidos, a integração entre aprendizado de máquina e otimização multiobjetivo é especialmente relevante. A escassez de dados experimentais e a ausência de métodos de dosagem consolidados tornam pouco eficiente a busca puramente empírica por traços adequados. Assim, modelos computacionais podem direcionar os ensaios laboratoriais para composições mais promissoras, reduzindo consumo de materiais, tempo de pesquisa e custos operacionais. Essa abordagem também permite avaliar simultaneamente critérios técnicos, econômicos e ambientais, contribuindo para o desenvolvimento de materiais cimentícios mais eficientes e sustentáveis.

Dessa forma, a presente pesquisa se insere em uma lacuna ainda pouco explorada: a dosagem de concretos geopoliméricos ácidos com apoio de aprendizado de máquina e otimização multiobjetivo. Embora existam estudos sobre IA aplicada a concretos geopoliméricos convencionais (Huynh *et al.*, 2020), ainda são escassas as investigações voltadas especificamente a sistemas ativados em meio ácido. Portanto, o uso de modelos preditivos integrados a algoritmos genéticos representa uma estratégia promissora para acelerar o desenvolvimento desses materiais e ampliar a compreensão sobre sua formulação.

Para a etapa de modelagem preditiva, foram selecionados três algoritmos: RF, XGBoost e MLP. A escolha desses modelos se justifica pelo fato de Carvalho *et al.* (2025) indicarem que essas técnicas estão entre os mais recorrentes em estudos voltados à previsão de proprie-

dades de materiais geopoliméricos, frequentemente apresentando bons resultados na estimativa de resistência à compressão. Além disso, os três algoritmos permitem construir modelos com desempenho satisfatório mesmo com parametrização relativamente simples, característica importante para esta pesquisa, uma vez que o objetivo não foi realizar uma busca exaustiva por hiperparâmetros, mas comparar abordagens preditivas consolidadas.

2.2 APRENDIZADO DE MÁQUINA

O [aprendizado de máquina](#) constitui uma das principais áreas da inteligência artificial contemporânea. Em termos gerais, a inteligência artificial pode ser compreendida como o conjunto de técnicas que permite a sistemas computacionais realizar tarefas associadas à inteligência humana, como reconhecer padrões, tomar decisões, produzir previsões e resolver problemas com algum grau de autonomia ([Haenlein; Kaplan, 2019](#)).

Historicamente, os primeiros sistemas inteligentes eram baseados, sobretudo, na exploração de regras previamente definidas por especialistas. Nesses sistemas, o conhecimento humano precisava ser convertido em instruções formais para que o computador pudesse executar uma tarefa específica. Embora essa abordagem tenha sido importante para o desenvolvimento inicial da área, ela apresentava limitações em problemas complexos, nos quais as relações entre variáveis não são facilmente descritas por regras fixas ([Janiesch; Zschech; Heinrich, 2021](#)).

O aprendizado de máquina surge como uma alternativa a essa limitação, deslocando o foco da programação explícita de regras para a construção de modelos a partir de dados. Nesse paradigma, o computador não recebe todas as instruções necessárias para resolver um problema, mas aprende relações, regularidades e padrões a partir de exemplos. Assim, um algoritmo de aprendizado de máquina utiliza dados de treinamento para ajustar um modelo matemático capaz de produzir previsões, classificações ou recomendações diante de novas entradas. Essa característica torna o aprendizado de máquina especialmente adequado para problemas nos quais há grande quantidade de dados ou relações não lineares entre as variáveis envolvidas ([Bishop, 2006; Janiesch; Zschech; Heinrich, 2021](#)).

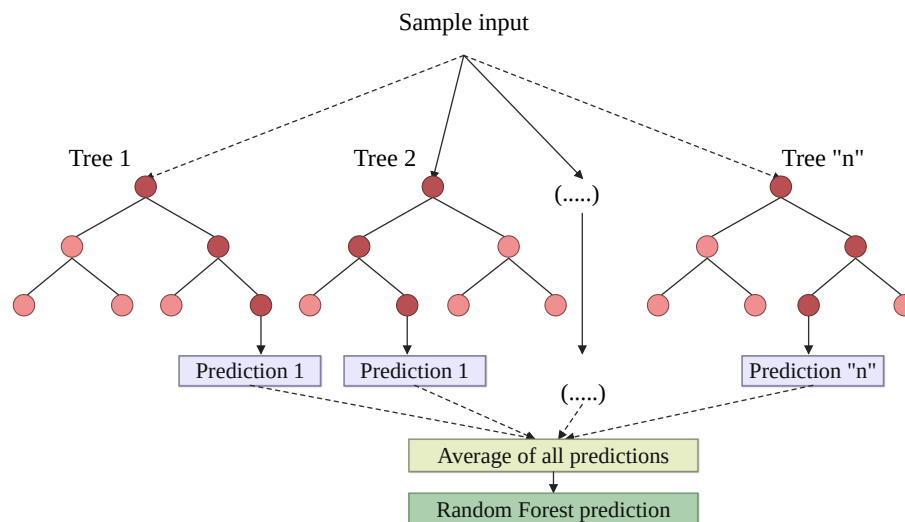
No contexto dos concretos, o aprendizado de máquina tem sido empregado principalmente para prever propriedades mecânicas, com destaque para a resistência à compressão. Essa aplicação é relevante porque a determinação experimental da resistência exige tempo, materiais, mão de obra e repetição de ensaios. Além disso, o projeto de traços de concreto envolve objetivos frequentemente conflitantes, como maximizar resistência, reduzir custo, diminuir emissões de CO_2 e garantir desempenho adequado em estado fresco e endurecido. Por esse motivo, estudos recentes têm combinado modelos preditivos de aprendizado de máquina com algoritmos de otimização, permitindo avaliar um grande número de combinações de traços antes da realização de ensaios laboratoriais ([Ji et al., 2024; Li et al., 2023](#)). Entretanto, as previsões produzidas por esses modelos estão sujeitas a erros, uma vez que dependem da quantidade e da qualidade dos dados utilizados no treinamento, da capacidade de generalização do algoritmo e da variabilidade inerente aos procedimentos experimentais. Portanto, o aprendizado de máquina deve ser utilizado como ferramenta de apoio à seleção de traços, e não como substituto integral dos ensaios

laboratoriais, sendo indispensável realizar a validação experimental das soluções indicadas pelo modelo.

2.2.1 Random Forest (RF)

O RF é um algoritmo de aprendizado de máquina baseado em *ensemble learning*, isto é, em uma estratégia que combina múltiplos modelos individuais para formar um modelo final mais robusto e com maior capacidade de generalização. No caso do RF, os modelos base são árvores de decisão, geralmente do tipo *Classification and Regression Trees (CART)*, que são treinadas de forma independente e posteriormente combinadas para gerar uma única predição (Ho, 1995; Sun *et al.*, 2024). Essa abordagem busca reduzir limitações comuns de árvores de decisão individuais, especialmente a tendência ao *overfitting*, uma vez que uma única árvore pode se ajustar excessivamente aos dados de treinamento e apresentar baixo desempenho diante de novos dados (Breiman, 2001; Ho, 1995; Sun *et al.*, 2024). A Figura 1 mostra de forma esquemática o funcionamento deste algoritmo para o caso de uma regressão.

Figura 1 — Funcionamento do random forest (RF)



Fonte: Wahba *et al.* (2024).

Historicamente, o desenvolvimento do RF está associado à convergência de três ideias principais: florestas de decisão aleatórias, *bagging* e subespaços aleatórios. Em 1995, Ho (1995) propôs o conceito de *random decision forest*, no qual múltiplas árvores de decisão são combinadas para formar um classificador mais estável do que uma árvore isolada (Ho, 1995). Posteriormente, Ho introduziu o método de subespaços aleatórios, baseado no treinamento de diferentes classificadores a partir de subconjuntos do espaço de atributos, com o objetivo de aumentar a diversidade entre os modelos (Ho, 1998). Em seguida, Breiman (2001) apresentou o algoritmo *bagging*, que utiliza amostragem *bootstrap*, isto é, sorteio com reposição a partir do conjunto original, para gerar diferentes subconjuntos de dados e combinar os resultados de classificadores treinados separadamente (Breiman, 2001). Por fim, Breiman integrou essas contribuições ao uso de árvores *CART*, consolidando o algoritmo RF em sua forma tradicional (Breiman, 2001; Sun *et al.*, 2024).

O funcionamento do RF ocorre em etapas. Inicialmente, o algoritmo gera diversos subconjuntos de treinamento a partir da base de dados original por meio do *bootstrap sampling*

(Ditzler *et al.*, 2017). Como a amostragem é feita com reposição, cada subconjunto pode conter exemplos repetidos, enquanto parte dos dados originais pode não ser selecionada. Esses dados não selecionados, chamados de *out-of-bag*, podem ser usados posteriormente para avaliar o desempenho do modelo sem a necessidade de uma separação adicional entre treino e teste (Martínez-Muñoz; Suárez, 2010). Em seguida, para cada subconjunto de dados, é construída uma árvore *CART*. Durante a construção de cada árvore, em vez de avaliar todos os atributos disponíveis a cada divisão do nó, o algoritmo seleciona aleatoriamente apenas uma parte das variáveis de entrada. Essa aleatoriedade adicional reduz a correlação entre as árvores e aumenta a diversidade do conjunto, o que contribui para melhorar a generalização do modelo final (Breiman, 2001; Sun *et al.*, 2024).

Diferentemente de problemas de classificação, em que as árvores procuram separar os dados em classes, na regressão o objetivo é dividir o conjunto de dados em subconjuntos com valores de saída mais homogêneos. Assim, durante a construção de cada árvore, são avaliadas diferentes variáveis de entrada e diferentes pontos de divisão, escolhendo-se aqueles que reduzem a variação dos valores de resistência dentro dos nós resultantes (Breiman, 2001; Sun *et al.*, 2024).

A previsão final do RF é obtida pela média das previsões geradas por todas as árvores. Dessa forma, o modelo reduz a dependência de uma única árvore de decisão e tende a produzir estimativas mais estáveis, pois combina diferentes modelos treinados a partir de subconjuntos aleatórios dos dados e das variáveis disponíveis (Breiman, 2001; 2001; Sun *et al.*, 2024).

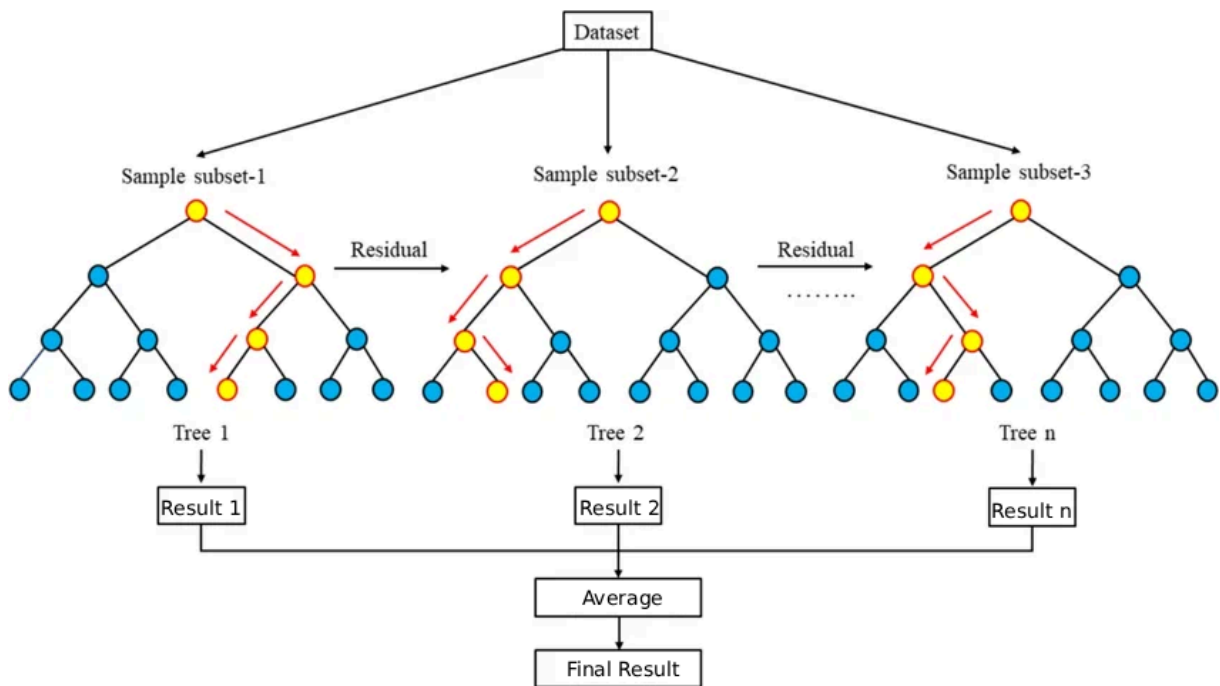
Apesar de suas vantagens, o RF também apresenta limitações. O aumento do número de árvores tende a tornar as decisões mais confiáveis, mas eleva o custo computacional, ampliando o tempo e o espaço necessários para treinamento. Além disso, como os subconjuntos de treinamento são gerados aleatoriamente, algumas árvores podem ser treinadas com dados de menor qualidade ou com amostras muito semelhantes, o que pode reduzir sua contribuição para o desempenho final e aumentar a redundância das decisões (Sun *et al.*, 2024). Ainda assim, o RF permanece como um dos algoritmos de aprendizado de máquina mais utilizados em problemas de classificação e regressão, devido à sua robustez, à capacidade de lidar com relações não lineares e à boa performance em diferentes domínios de aplicação (Breiman, 2001; Carvalho *et al.*, 2025; Sun *et al.*, 2024).

2.2.2 Extreme Gradient Boosting (XGBoost)

O XGBoost também é um algoritmo de aprendizado supervisionado baseado em métodos de *ensemble*, isto é, na combinação de múltiplos modelos mais simples para formar um modelo preditivo mais robusto. Seu desenvolvimento está associado à evolução dos métodos de *boosting*, especialmente ao *gradient boosting* proposto por Friedman (2000), no qual modelos fracos são adicionados de forma sequencial, de modo que cada novo modelo busca corrigir os erros cometidos pelos anteriores. Posteriormente, Chen e Guestrin (2016) apresentaram o XGBoost como uma implementação otimizada e regularizada dessa abordagem, voltada para maior desempenho computacional, escalabilidade e capacidade de generalização.

O princípio do *boosting* consiste em construir um modelo forte a partir da combinação de vários modelos fracos. Diferente do RF, em que diversas árvores são treinadas de forma independente e suas previsões são combinadas ao final, no *gradient boosting* as árvores são construídas de maneira sequencial (Friedman, 2000). Assim, cada nova árvore é treinada considerando os resíduos, ou seja, os erros deixados pelo modelo anterior. O algoritmo ajusta sucessivamente novas árvores aos gradientes negativos da função de perda, buscando reduzir o erro global do modelo a cada iteração (Friedman, 2000; Li *et al.*, 2023). A Figura 2 mostra de forma esquemática o funcionamento deste algoritmo para o caso de uma regressão.

Figura 2 — Funcionamento do **extreme gradient boosting (XGBoost)**



Fonte: Adaptado de Patel *et al.* (2025).

Para além deste funcionamento, o **XGBoost** introduz melhorias importantes em relação ao *gradient boosting* tradicional. Entre essas melhorias destacam-se o uso de regularização para controlar a complexidade das árvores, a paralelização de etapas do treinamento e recursos que reduzem o risco de sobreajuste (*overfitting*) (Chen; Guestrin, 2016). A função objetivo do **XGBoost** combina dois termos principais: um termo de perda, que mede a diferença entre os valores observados e os valores previstos, e um termo de regularização, que penaliza modelos excessivamente complexos (Chen; Guestrin, 2016). Dessa forma, o algoritmo não busca apenas minimizar o erro de treinamento, mas também produzir modelos com melhor capacidade de generalização (Chen; Guestrin, 2016).

No funcionamento do algoritmo, parte-se de uma predição inicial para a variável de interesse. Em seguida, uma árvore de decisão é ajustada para reduzir o erro dessa predição. A cada nova iteração, outra árvore é adicionada ao conjunto, considerando as informações de erro acumuladas nas etapas anteriores (Friedman, 2000). A predição final é obtida pela soma das contribuições de todas as árvores, ponderadas por uma taxa de aprendizado. Essa taxa controla a intensidade com que cada nova árvore influencia o modelo final, contribuindo para evitar que o algoritmo se ajuste excessivamente aos dados de treinamento (Chen; Guestrin, 2016). Além

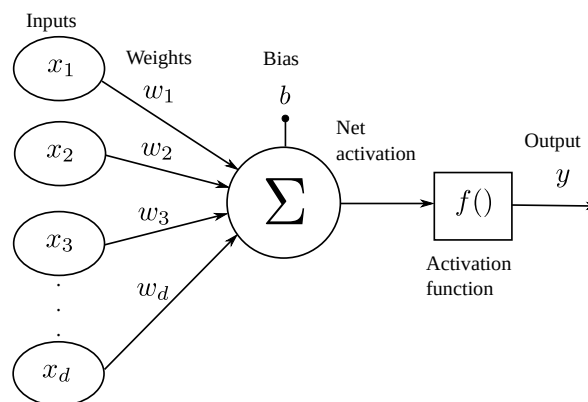
disso, parâmetros como profundidade máxima das árvores, número de estimadores, taxa de amostragem de linhas e colunas e intensidade da regularização permitem controlar o equilíbrio entre precisão e complexidade do modelo (Chen; Guestrin, 2016).

2.2.3 Redes Neurais Perceptron Multicamadas (MLP)

As redes neurais perceptron multicamadas (MLP) constituem uma classe de modelos de aprendizado de máquina inspirada no funcionamento do cérebro (Krotoy; Hopfield, 2018). Seu desenvolvimento está associado à busca por modelos computacionais capazes de aprender padrões a partir de dados e representar relações complexas entre variáveis de entrada e saída. Na literatura, seu uso ganhou destaque principalmente pela capacidade de modelar fenômenos não lineares, nos quais métodos estatísticos tradicionais podem apresentar limitações quando há muitas variáveis independentes ou quando a forma da relação entre elas não é previamente conhecida (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Carvalho *et al.*, 2025).

Uma rede neural artificial é constituída pelo agrupamento de unidades simples chamadas neurônios, agrupados em camadas. Cada neurônio pode receber várias entradas, porém produz somente uma saída por sua vez, cada uma das entradas possui um coeficiente denominado peso sináptico (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Bal; DEMIR, 2025). Dessa forma o funcionamento de um neurônio ocorre assim: as entradas são multiplicadas pelos pesos correspondentes em seguida esses produtos são somados ao valor de viés e submetidos a uma função de ativação que introduz não linearidade ao modelo e permite que a rede represente comportamentos mais complexos, formando a saída (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Bal; DEMIR, 2025). Segundo Wang, Zhou e Bilmes (2019) viés é o termo adicional da função de um neurônio que não depende diretamente das entradas, permitindo a função ser deslocada conferindo maior flexibilidade ao modelo. O funcionamento do neurônio está expresso na Figura 3.

Figura 3 — Neurônio artificial



Fonte: Garpelli *et al.* (2023).

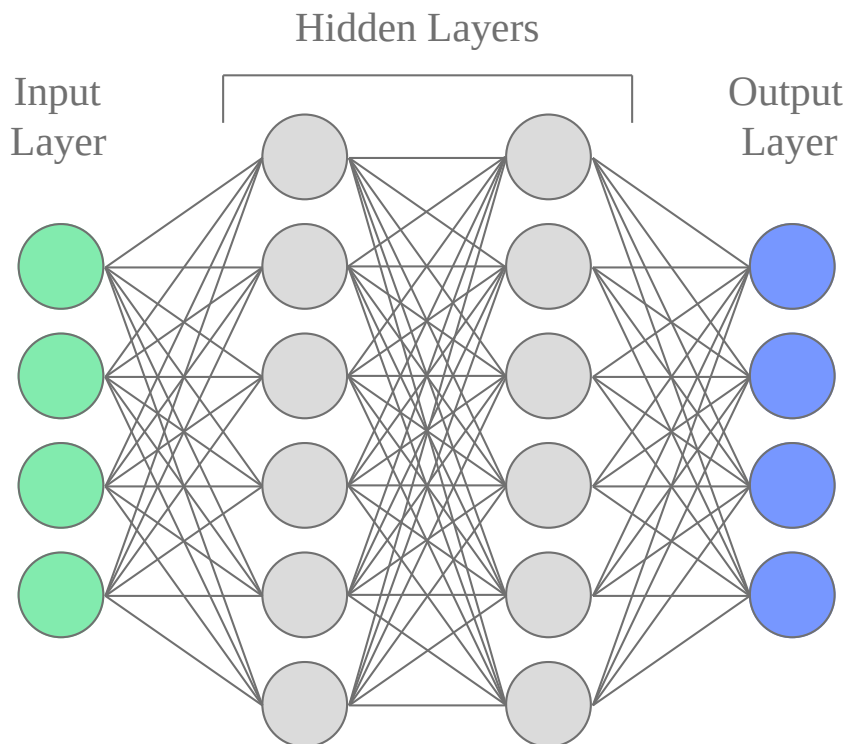
A Equação 1 representa matematicamente como a saída de um neurônio é gerada.

$$y = f\left(\sum_{i=1}^n w_i x_i + b\right) \quad (1)$$

Em que y é a saída do neurônio; $x_1, x_2, \dots, x_n$ são os valores de entrada; $w_1, w_2, \dots, w_n$ são os valores dos pesos das conexões; b é o valor do viés e f é a função de ativação (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009).

Uma arquitetura amplamente empregada em problemas de regressão é a rede do tipo perceptron multicamadas (MLP) (Bishop, 2006). Nesse tipo de estrutura, os dados percorrem a rede em uma única direção: da camada de entrada para uma ou mais camadas ocultas e, por fim, para a camada de saída (Aladag; Egrioglu; Yolcu, 2014; Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009). A camada de entrada contém as variáveis que descrevem o problema. As camadas ocultas são responsáveis por identificar combinações e padrões entre essas variáveis, enquanto a camada de saída fornece o valor previsto (Carvalho *et al.*, 2025; Guo *et al.*, 2026; Li *et al.*, 2023). Em MLP, a saída de uma camada torna-se a entrada da camada seguinte, permitindo que o modelo construa representações progressivamente mais complexas do fenômeno analisado (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Carvalho *et al.*, 2025; Guo *et al.*, 2026; Wang; Provis; Dai, 2018). Este processo está representado na Figura 4.

Figura 4 — Rede neural artificial perceptron multicamadas



Fonte: Rosa (2024).

O treinamento de uma rede neural consiste no ajuste dos pesos e vieses de suas conexões, de modo que a diferença entre os valores previstos e os valores observados seja minimizada (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Bal; DEMIR, 2025). Inicialmente, esses parâmetros são definidos de forma aleatória. Em seguida, a rede realiza previsões a partir dos dados de treinamento e calcula o erro entre a saída estimada e a saída real. Um dos métodos mais utilizados para esse ajuste é o algoritmo de retropropagação do erro, ou *backpropagation*, no qual o erro calculado

na camada de saída é propagado no sentido inverso, permitindo atualizar os pesos das camadas anteriores (Bal; DEMIR, 2025; Hinton; Rumelhart; Williams, 2002). Esse processo ocorre de forma iterativa, até que o erro seja reduzido a um nível aceitável ou que a rede atinja um critério de parada definido (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Bal; DEMIR, 2025; Hinton; Rumelhart; Williams, 2002).

2.3 COMPUTAÇÃO EVOLUCIONISTA

A computação evolucionista é uma área da computação inspirada em processos naturais de evolução, adaptação e seleção. Em vez de buscar uma solução por meio de regras determinísticas fixas, esses métodos trabalham com um conjunto de soluções candidatas, denominado população, que é modificado ao longo de sucessivas gerações (Lambora; Gupta; Chopra, 2019; Schmitt, 2001). O princípio central é que soluções com melhor desempenho em relação ao problema analisado tenham maior probabilidade de permanecer no processo de busca e de gerar novas soluções, de forma semelhante ao princípio de seleção natural (Schmitt, 2001).

2.3.1 Otimização multiobjetivo

A otimização multiobjetivo é empregada em problemas nos quais diferentes critérios devem ser considerados simultaneamente. Diferentemente da otimização de objetivo único, em que se busca uma única solução ótima, problemas multiobjetivo frequentemente envolvem objetivos conflitantes entre si, como maximizar desempenho mecânico e, ao mesmo tempo, minimizar custo e impacto ambiental. Nesses casos, não há necessariamente uma solução superior em todos os critérios, mas sim um conjunto de soluções consideradas igualmente ótimas, conhecidas como fronteira de Pareto (Deb *et al.*, 2002). Nesta abordagem uma solução é considerada não dominada quando não existe outra solução que melhore um objetivo sem piorar pelo menos um dos demais e, dessa forma, participa da fronteira representando uma alternativa para a tomada de decisão (Deb, 2001; Lin; Yang; Zhang, 2022).

Sejam x_1 e x_2 duas soluções viáveis do problema de minimização multiobjetivo. A solução x_1 pode ser considerada melhor que x_2 se as condições da Equação 2 e da Equação 3 forem satisfeitas simultaneamente (Verma; Pant; Snášel, 2021).

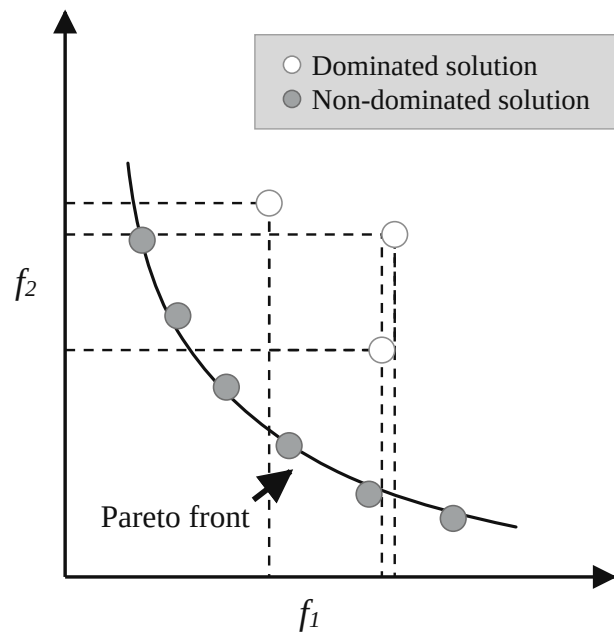
$$f_{j(x_1)} \leq f_{j(x_2)}, \quad \forall j = \{1, 2, \dots, k\}, \quad (2)$$

$$f_{j(x_1)} < f_{j(x_2)}, \quad \exists j = \{1, 2, \dots, k\} \quad (3)$$

Onde k é o número de funções objetivo e $f_{j(x)}$ representa o valor da j -ésima função objetivo para a decisão x . Nesse caso, diz-se que x_1 domina x_2 (ou que x_2 é dominada por x_1), isto é, x_1 é melhor que x_2 (Verma; Pant; Snášel, 2021).

Quando uma solução x da Equação 2 não é dominada por nenhuma outra solução viável, ela é chamada de solução ótima de Pareto. O conjunto de todas as soluções ótimas de Pareto é denominado fronteira de Pareto, como representado na Figura 5, onde procura-se minimizar ambas as funções f_1 e f_2 .

Figura 5 — Fronteira de Pareto



Fonte: Verma, Pant e Snášel (2021).

2.3.2 Algoritmos genéticos

Os algoritmos genéticos são aqueles capazes de representar soluções como indivíduos ou cromossomos e aplicar operadores inspirados na genética, como seleção, cruzamento e mutação (Schmitt, 2001). Assim, cada indivíduo representa uma possível solução para o problema, enquanto a função de aptidão avalia o quanto essa solução atende aos objetivos definidos (Schmitt, 2001). A partir dessa avaliação, os indivíduos mais aptos são selecionados para gerar descendentes com maior probabilidade, combinando características das soluções anteriores e introduzindo pequenas alterações aleatórias para ampliar a exploração do espaço de busca (Lambora; Gupta; Chopra, 2019; Schmitt, 2001). Essa abordagem é particularmente adequada a problemas nos quais há muitas variáveis e grande número de combinações possíveis, tornando inviável testar todas as alternativas de forma exaustiva.

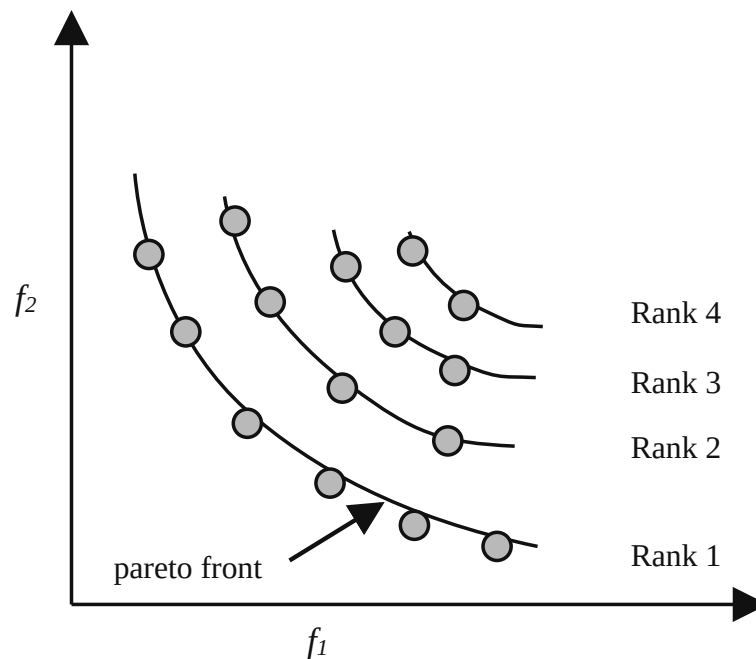
2.3.2.1 Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II)

O **NSGA-II** é uma versão moderna e aprimorada do *Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA)* proposto por Srinivas e Deb (1994). A segunda versão do algoritmo supre as limitações do predecessor, como a ausência de elitismo, a necessidade de definir um parâmetro de compartilhamento para preservação da diversidade e sua elevada complexidade computacional (Deb, 2001; Verma; Pant; Snášel, 2021). Além da adição do elitismo, a versão moderna usa aglomeração (*crowding distance*) como mecanismo de preservação da diversidade e possui menor complexidade computacional. Neste caso a complexidade do **NSGA-II** é, no máximo, $O(MN^2)$, onde M é o número de funções objetivo e N é o tamanho da população (Deb, 2001; Deb et al., 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021).

A estrutura do **NSGA-II** é baseada em quatro princípios fundamentais: ordenação não dominada, preservação de elite, distância de aglomeração e operador de seleção (Verma; Pant; Snášel, 2021). Esses mecanismos atuam de forma integrada para conduzir a população em direção à fronteira de Pareto e, ao mesmo tempo, preservar a diversidade entre as soluções encontradas (Deb *et al.*, 2002). Cada um dos princípios são explicados a seguir.

A ordenação não dominada é o procedimento responsável por classificar as soluções da população de acordo com o conceito de dominância de Pareto. Inicialmente, identificam-se as soluções que não são dominadas por nenhuma outra solução da população; essas soluções passam a elencar o primeiro nível formando a primeira fronteira, a de melhor desempenho (Deb *et al.*, 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021). Em seguida, essas soluções são, temporariamente, removidas da população, para que o mesmo processo seja aplicado às soluções restantes, formando a segunda fronteira. Então, o processo é repetido até que todos os indivíduos sejam distribuídos em diferentes níveis de não dominância como representado na Figura 6. Dessa forma, soluções localizadas em fronteiras de menor nível são preferidas, pois representam melhores desempenhos entre os objetivos avaliados (Deb *et al.*, 2002).

Figura 6 — Ordenação não dominada



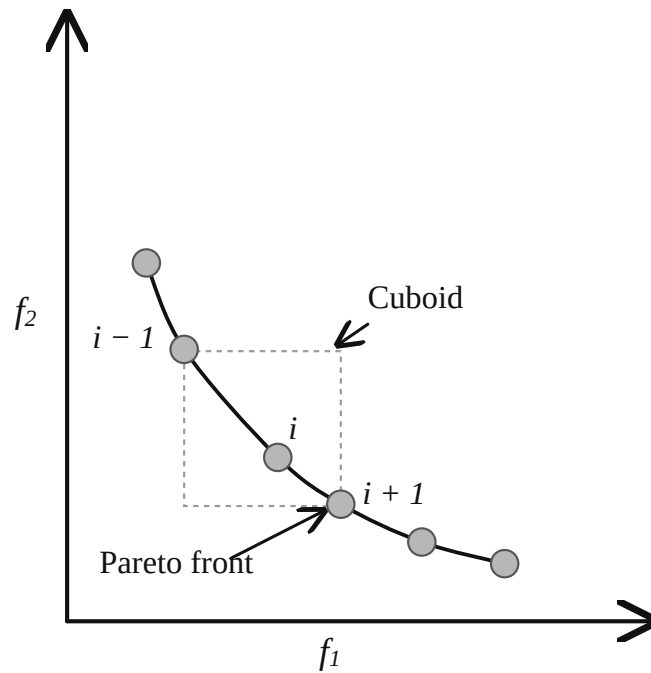
Fonte: Verma, Pant e Snášel (2021).

O segundo princípio é a preservação da elite, que tem como objetivo evitar que boas soluções sejam perdidas ao longo das gerações. No **NSGA-II**, isso é feito por meio da combinação da população de pais com a população de descendentes, formando uma população temporária maior. Em seguida, essa população combinada é ordenada de acordo com a não dominância, e os melhores indivíduos são selecionados para compor a próxima geração. (Deb *et al.*, 2002)

A distância de aglomeração, ou *crowding distance*, é utilizada para preservar a diversidade das soluções pertencentes a uma mesma fronteira. Como diferentes indivíduos podem apresentar o mesmo nível de não dominância, apenas o nível da fronteira não é suficiente para

decidir quais soluções devem ser mantidas na população (Deb *et al.*, 2002). Por isso, o algoritmo calcula uma estimativa da densidade de soluções ao redor de cada indivíduo, considerando a distância média entre seus vizinhos mais próximos em cada função objetivo, conforme representado na Figura 7 (Deb *et al.*, 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021). Essa medida corresponde ao espaço disponível ao redor de uma solução na fronteira: quanto maior a distância de aglomeração, mais isolada ela está em relação às demais soluções.

Figura 7 — Distância de aglomeração



Fonte: Verma, Pant e Snášel (2021).

Dessa forma, quando duas soluções pertencem à mesma fronteira não dominada, o NSGA-II favorece aquela que possui maior distância de aglomeração, pois ela se encontra em uma região menos povoada do espaço de busca (Deb *et al.*, 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021). Esse critério evita que o algoritmo concentre muitos indivíduos em uma pequena região da fronteira de Pareto e contribui para manter uma distribuição mais ampla das soluções. Assim, a distância de aglomeração atua como um mecanismo de preservação da diversidade, permitindo que o conjunto final de soluções represente diferentes possibilidades entre os objetivos analisados, em vez de convergir para apenas uma parte da fronteira (Deb *et al.*, 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021).

Conforme Verma, Pant e Snášel (2021), matematicamente, a distância de aglomeração do indivíduo i é calculada a partir da soma das distâncias normalizadas entre seus vizinhos adjacentes em cada função objetivo. Considerando f_j^i como o valor da j -ésima função objetivo para o i -ésimo indivíduo, e $f_j^{\max}$ e $f_j^{\min}$ como os valores máximo e mínimo dessa mesma função objetivo entre os indivíduos da fronteira analisada, a distância de aglomeração pode ser expressa conforme a Equação 4.

$$cd(j) = \sum_{i=1}^k \frac{f_j^{i+1} - f_j^{i-1}}{f_j^{\max} - f_j^{\min}} \quad (4)$$

Onde k é o número de funções objetivo.

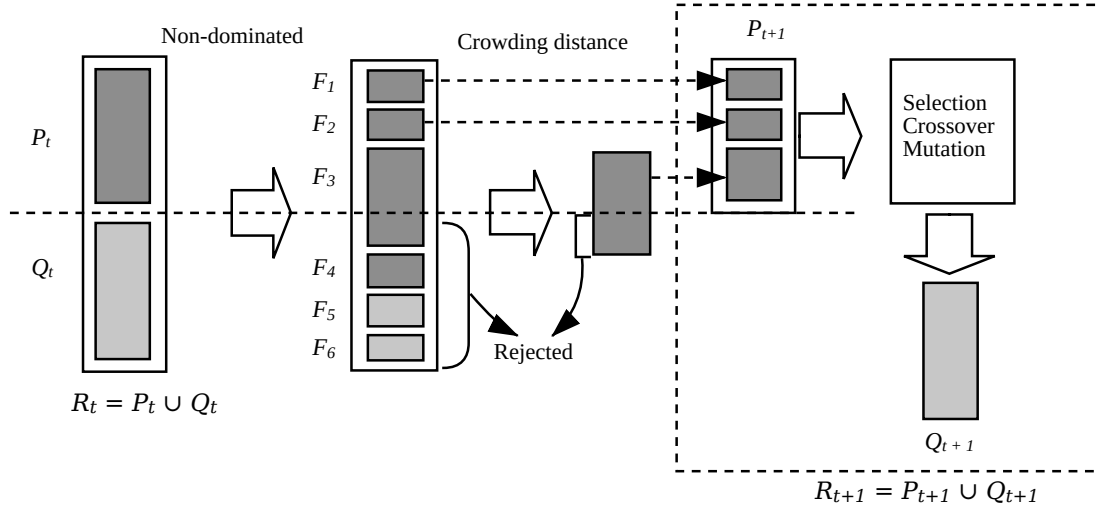
A seleção do **NSGA-II** utiliza simultaneamente o nível de não dominância e a distância de aglomeração para escolher os indivíduos que participarão da reprodução. Quando duas soluções pertencem a fronteiras diferentes, é selecionada aquela com melhor nível de não dominância (o menor) (Deb *et al.*, 2002). Quando ambas pertencem à mesma fronteira, é escolhida aquela com maior distância de aglomeração, pois representa uma região menos explorada do espaço de objetivos (Deb *et al.*, 2002). Dessa forma, o operador de seleção equilibra dois critérios essenciais da otimização multiobjetivo: a convergência para soluções de melhor qualidade e a manutenção de uma distribuição ampla e diversa ao longo da fronteira de Pareto (Deb *et al.*, 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021).

O funcionamento do **NSGA-II** inicia-se com a geração de uma população inicial P_t , de tamanho N . Em seguida, uma nova população Q_t é criada após a aplicação das operações de cruzamento e mutação sobre a população P_t . Depois disso, as populações P_t e Q_t são combinadas para formar uma nova população R_t , sobre a qual é aplicado o procedimento de ordenação não dominada. Assim, os membros de R_t são classificados em diferentes fronteiras, de acordo com seus níveis de não dominância (fronteiras ranqueadas) (Deb *et al.*, 2002; Verma; Pant; Snášel, 2021).

O processo seguinte consiste em selecionar N membros de R_t para formar a próxima população P_{t+1} . Se o tamanho da primeira fronteira for maior ou igual a N , então apenas N membros são selecionados a partir das regiões menos povoadas da primeira fronteira para compor P_{t+1} . Por outro lado, se o tamanho da primeira fronteira for menor que N , todos os seus membros são transferidos diretamente para a próxima geração, e os membros restantes são escolhidos a partir das regiões menos povoadas da segunda fronteira e adicionados a P_{t+1} . Caso o tamanho de P_{t+1} ainda seja menor que N , o mesmo procedimento é repetido para as fronteiras seguintes, até que P_{t+1} contenha exatamente N indivíduos.

As populações das gerações seguintes, P_{t+2} , P_{t+3} , P_{t+4} , e assim por diante, são construídas utilizando o mesmo procedimento, até que os critérios de parada sejam satisfeitos. O funcionamento geral do **NSGA-II** é apresentado na Figura 8.

Figura 8 — Funcionamento do NSGA-II



Fonte: Adaptado de Verma, Pant e Snášel (2021); Yusoff, Zain e Haron (2016).

2.4 AVALIAÇÃO DOS MODELOS

A avaliação de modelos preditivos em problemas de regressão é realizada por meio de métricas que quantificam a diferença entre os valores estimados pelo modelo e os valores observados experimentalmente. Entre as métricas frequentemente empregadas, destaca-se o coeficiente de determinação (R^2) e a raiz do erro quadrático médio, ou *Root Mean Squared Error* (RMSE), utilizados em estudos com modelos de aprendizado de máquina aplicados à previsão da resistência à compressão (Alshihri; Azmy; El-Bisy, 2009; Li *et al.*, 2023).

O erro individual de uma previsão pode ser definido como a diferença entre o valor observado experimentalmente e o valor previsto pelo modelo, apresentado na Equação 5:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i \quad (5)$$

em que: e_i representa o erro da observação i ; y_i corresponde ao valor real observado; e $\hat{y}_i$ corresponde ao valor previsto pelo modelo.

2.4.1 Coeficiente de determinação (R^2)

O coeficiente de determinação, representado por R^2 , é uma métrica amplamente utilizada na avaliação de modelos de regressão. Essa métrica indica o quanto as previsões realizadas pelo modelo se aproximam dos valores observados experimentalmente, permitindo avaliar a capacidade do modelo de representar a variabilidade dos dados analisados (Carvalho *et al.*, 2025; Guo *et al.*, 2026; Li *et al.*, 2023). Valores de R^2 mais próximos de 1 indicam melhor ajuste entre os valores previstos e os valores reais, enquanto valores mais baixos indicam menor capacidade preditiva (Pérez, 2024).

Diferentemente das métricas baseadas diretamente na magnitude do erro, como MSE e RMSE, o R^2 busca indicar a proporção da variabilidade dos dados observados que pode ser explicada pelo modelo de regressão (Carvalho *et al.*, 2025). Dessa forma, essa métrica permite

avaliar o quanto as previsões acompanham a tendência geral dos dados experimentais, sendo especialmente útil para comparar o desempenho global de diferentes modelos preditivos.

Matematicamente, o coeficiente de determinação pode ser calculado pela relação entre a soma dos quadrados dos resíduos e a soma total dos quadrados, conforme apresentado na Equação 6.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (6)$$

Em que: y_i representa o valor real observado na amostra i ; $\hat{y}_i$ representa o valor previsto pelo modelo; $\bar{y}$ corresponde à média dos valores observados; e n indica o número total de observações avaliadas (Carvalho *et al.*, 2025; Pérez, 2024).

O numerador da fração corresponde à soma dos erros quadráticos das previsões, isto é, às diferenças entre os valores experimentais e os valores estimados pelo modelo. Já o denominador representa a variabilidade total dos dados em relação à média observada. Assim, quanto menor for a soma dos erros em relação à variabilidade total dos dados, maior será o valor de R^2 e melhor será o ajuste do modelo (Carvalho *et al.*, 2025; Pérez, 2024). Dessa forma, o valor do R^2 pode variar de menos infinito até 1, quando $R^2 = 1$, as previsões coincidem perfeitamente com os valores observados. Por outro lado, valores próximos de 0 indicam que o modelo explica pouco da variabilidade dos dados, apresentando desempenho semelhante ao uso da média como estimativa (Carvalho *et al.*, 2025; Guo *et al.*, 2026; Li *et al.*, 2023; Pérez, 2024). Além disso, valores negativos podem ocorrer quando o modelo apresenta desempenho inferior ao de uma previsão baseada apenas na média dos valores observados (Carvalho *et al.*, 2025).

Apesar de sua importância, o coeficiente de determinação não deve ser utilizado de forma isolada. Um modelo pode apresentar valor elevado de R^2 e ainda assim produzir erros relevantes em determinadas regiões do conjunto de dados, especialmente quando há presença de valores discrepantes, baixa representatividade da base ou risco de **Sobreajuste (Overfitting)** (Carvalho *et al.*, 2025; Pérez, 2024). Por esse motivo, estudos de aprendizado supervisionado normalmente combinam o R^2 com métricas de erro, como RMSE, MAE, MAPE ou MSE, permitindo uma avaliação mais completa do desempenho preditivo (Carvalho *et al.*, 2025; Guo *et al.*, 2026; Li *et al.*, 2023).

2.4.2 Raiz do erro quadrático médio (RMSE)

Considerando a raiz do erro quadrático médio, parte-se inicialmente dos erros individuais para calcular o erro quadrático médio, ou Mean Squared Error (MSE), dado pela média dos quadrados das diferenças entre os valores observados e previstos (Hussain *et al.*, 2025), conforme representado matematicamente na Equação 7.

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (7)$$

Em que n representa o número total de observações avaliadas. O uso do termo quadrático impede que erros positivos e negativos se anulem e atribui maior penalização a previsões muito distantes dos valores reais. Dessa forma, o MSE é sensível a erros elevados, sendo útil para

evidenciar situações em que o modelo apresenta previsões muito discrepantes, podendo variar de 0 até infinito (Hussain *et al.*, 2025).

Por sua vez, o RMSE é obtido pela raiz quadrada do MSE, conforme apresentado na Equação 8:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (8)$$

Uma das principais vantagens do RMSE em relação ao MSE é que seu resultado é expresso na mesma unidade da variável prevista (Namoune *et al.*, 2022). Assim, se tratando de resistência à compressão, o RMSE também é expresso em MPa, facilitando a interpretação prática do erro cometido pelo modelo. Dessa forma, valores menores de MSE e RMSE indicam que, em média, as previsões estão mais próximas dos valores obtidos experimentalmente se tornando uma métrica bastante utilizada em estudos que avaliam diferentes modelos de aprendizado de máquina como Alshihri, Azmy e El-Bisy (2009); Guo *et al.* (2026).

2.5 TREINAMENTO DOS MODELOS DE APRENDIZADO DE MÁQUINA

O treinamento dos modelos é uma etapa essencial no desenvolvimento de algoritmos de aprendizado de máquina. Depois de treinar o modelo é preciso avaliar a sua capacidade de realizar previsões para dados que não foram utilizados diretamente em seu treinamento (Carvalho *et al.*, 2025; Paixão *et al.*, 2022).

Uma das estratégias mais simples de validação é a divisão dos dados em treinamento e teste, conhecida como *hold out*. Nesse procedimento, o conjunto de dados é separado uma única vez em duas partes: uma parcela é utilizada para treinar o modelo, enquanto a outra é reservada para avaliar seu desempenho. Apresentando baixo custo computacional, esta estratégia é bastante adequada para bases de dados volumosas como nos estudos de Guo *et al.* (2026) e Li *et al.* (2023), que dispunham de 292 e 600 pontos respectivamente. Apesar de simples e de baixo custo computacional, essa abordagem pode gerar resultados dependentes da forma como os dados são divididos, especialmente em bases pequenas ou pouco representativas. Nesses casos, a partição entre treino e teste pode introduzir viés de amostragem, caso uma das partes não represente adequadamente a variabilidade presente no conjunto de dados original.

Para reduzir essa dependência de uma única divisão, pode-se empregar a validação cruzada, ou *cross-validation*, uma técnica amplamente utilizada para auxiliar na avaliação de modelos de aprendizado de máquina (Santos *et al.*, 2018). Ela consiste em dividir aleatoriamente os dados em k conjuntos, sendo que cada um deles é utilizado uma vez para validar o modelo (Blockeel; Struyf, 2002; Rao; Wu, 2005). Essa estratégia fornece uma avaliação menos enviesada em comparação com a divisão dos dados uma única vez em treinamento e teste.

Na validação cruzada em k partes, ou *k-fold cross-validation*, o conjunto de dados é dividido em k subconjuntos de tamanho semelhante. Em cada iteração, um desses subconjuntos é separado para teste, enquanto os demais são utilizados para treinamento do modelo (Allgaier; Pryss, 2024; Paixão *et al.*, 2022). Esse processo é repetido até que todos os subconjuntos tenham sido utilizados uma vez como conjunto de teste. Ao final, o desempenho do modelo é obtido pela

média dos resultados das k iterações, permitindo uma estimativa mais estável do desempenho preditivo em comparação com uma única divisão entre treino e teste (Paixão *et al.*, 2022).

Um caso particular da validação cruzada é o método *leave-one-out cross-validation* (LOOCV). Nesse procedimento, o número de subconjuntos é igual ao número total de observações da base de dados, ou seja, $k = n$. Assim, em cada iteração, apenas uma observação é separada para teste, enquanto todas as demais são utilizadas para treinamento. O processo é repetido até que cada observação tenha sido utilizada uma vez como dado de teste (Allgaier; Pryss, 2024).

A principal vantagem do *leave-one-out* está no maior aproveitamento dos dados disponíveis para treinamento, pois, em uma base com n observações, o modelo é treinado com $n - 1$ amostras em cada iteração. Por esse motivo, essa estratégia é especialmente adequada para bases de dados reduzidas, nas quais a separação convencional entre treino e teste poderia diminuir excessivamente a quantidade de dados utilizada no ajuste do modelo (Allgaier; Pryss, 2024). Entretanto, como o procedimento exige o treinamento do modelo n vezes, seu custo computacional pode se tornar elevado em bases de dados grandes, tornando outras estratégias de validação cruzada, como o *k-fold*, mais viáveis nesses casos (Allgaier; Pryss, 2024; Stone, 1974).

A Figura 9 ilustra o princípio da validação cruzada a partir da divisão da base de dados em *folds*. No exemplo apresentado, a base original é dividida em 5 partes. Em cada iteração, uma dessas partes é separada para teste, destacada em azul, enquanto as demais são utilizadas para treinamento do modelo, destacadas em vermelho. Esse processo se repete até que todas as partes tenham sido utilizadas uma vez como conjunto de teste.

Dessa forma, o *leave-one-out* pode ser entendido como um caso particular da validação cruzada *k-fold*, no qual o número de *folds* é igual ao número total de registros na base de dados, isto é, $k = n$. Assim, cada observação é isolada uma vez para teste, enquanto todas as demais são utilizadas para treinamento.

Figura 9 — Validação cruzada *k-fold*

DATASET				
FOLD 1	FOLD 2	FOLD 3	FOLD 4	FOLD 5
TEST	TRAIN	TRAIN	TRAIN	TRAIN
TRAIN	TEST	TRAIN	TRAIN	TRAIN
TRAIN	TRAIN	TEST	TRAIN	TRAIN
TRAIN	TRAIN	TRAIN	TEST	TRAIN
TRAIN	TRAIN	TRAIN	TRAIN	TEST

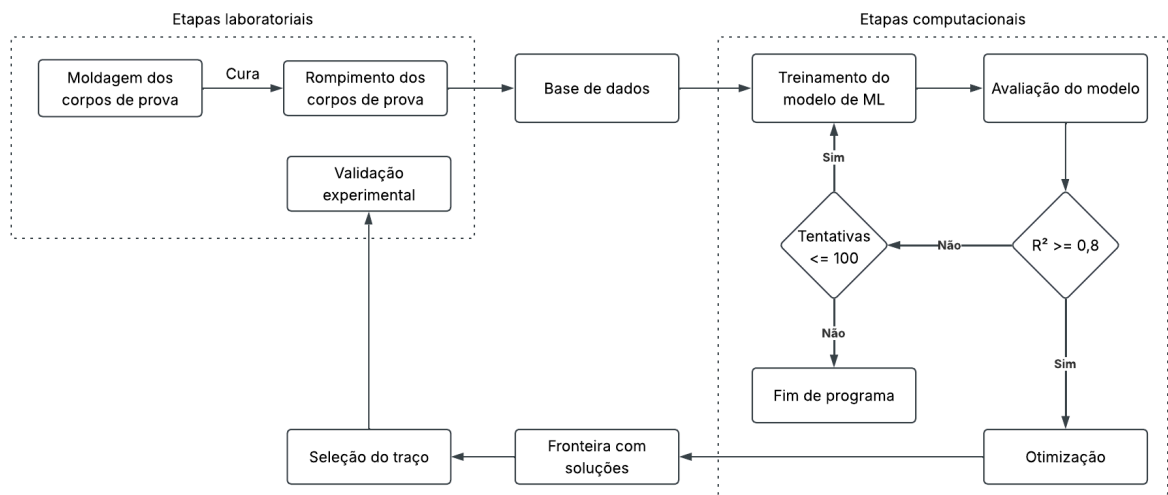
Fonte: Adaptado de Paixão *et al.* (2022).

Além das estratégias de validação estatística, em alguns casos a avaliação de modelos preditivos pode ser complementada por uma validação experimental. Esse procedimento é especialmente relevante em pesquisas aplicadas ao desenvolvimento de materiais, nas quais o modelo não é utilizado apenas para estimar valores em uma base de dados já existente, mas também para orientar a escolha de novas composições a serem produzidas. Nesses casos, após o treinamento e a avaliação computacional do modelo, soluções sugeridas pelo processo de otimização podem ser confeccionadas em laboratório e submetidas aos mesmos ensaios utilizados na construção da base original.

3 METODOLOGIA

Este capítulo descreve os procedimentos adotados para o desenvolvimento da pesquisa, abrangendo tanto as etapas experimentais quanto a etapa computacional. Inicialmente, são apresentados os materiais utilizados na produção dos concretos geopoliméricos ácidos, bem como os procedimentos de moldagem, cura e caracterização dos corpos de prova. Em seguida, descreve-se a organização da base de dados experimental, o treinamento e a validação dos modelos de aprendizado de máquina e a integração do modelo preditivo ao algoritmo *NSGA-II* para a otimização multiobjetivo dos traços. Por fim, são apresentados o critério utilizado para seleção dos modelos considerados válidos, o procedimento de análise das soluções obtidas e a etapa de validação experimental do traço selecionado. O esquema geral da pesquisa é apresentado na Figura 10.

Figura 10 — Fluxograma geral da pesquisa



Fonte: elaboração própria.

Embora os componentes do concreto geopolimérico ácido já sejam conhecidos, também é necessário compreender o conceito de traço de concreto. O traço corresponde à definição das proporções entre os materiais que compõem a mistura, indicando a quantidade relativa de cada constituinte utilizado na produção do concreto. Em concretos convencionais, essas proporções geralmente envolvem cimento, água, agregados miúdos, agregados graúdos e aditivos. No caso dos concretos geopoliméricos ácidos estudados neste trabalho, o traço é definido pelas proporções entre precursor, ativador ácido, agregado fino e agregado graúdo. Assim, cada traço representa uma formulação específica, capaz de influenciar diretamente propriedades avaliadas.

- Na 1ª etapa, de caráter laboratorial, foram moldados 88 corpos de prova correspondentes a 44 traços de concreto geopolimérico ácido. Após 28 dias de cura, os corpos de prova foram submetidos ao ensaio de resistência à compressão em prensa hidráulica. Os resultados obtidos nos rompimentos foram registrados e organizados em uma base de dados, posteriormente utilizada nas etapas computacionais da pesquisa.

- Na 2ª etapa, primeira etapa computacional, o banco de dados foi utilizado para o treinamento e a validação dos modelos de aprendizado de máquina. As variáveis de entrada corresponderam às quantidades relativas de ativador, precursor, agregado fino e agregado graúdo, enquanto a variável de saída foi a resistência à compressão. Foram avaliados os modelos **RF**, **XGBoost** e **MLP**, com o objetivo de identificar aquele com melhor capacidade de estimar a resistência à compressão a partir das proporções dos materiais. O desempenho dos modelos foi avaliado por meio das métricas R^2 e RMSE, com a utilização da validação cruzada *leave-one-out*, escolhida em razão do tamanho reduzido da base experimental.
- Na 3ª etapa, os modelos foram avaliados com base no critério mínimo de desempenho definido para a pesquisa. Esse critério foi estabelecido a partir da análise da literatura realizada por [Carvalho et al. \(2023a\)](#), que identifica trabalhos com resultados satisfatórios quando o coeficiente de determinação apresenta valores iguais ou superiores a $R^2 = 0,8$. Assim, somente os modelos que atingiram $R^2 \geq 0,8$ foram considerados suficientemente adequados para seguir para a etapa de otimização.
- Na 4ª etapa, os modelos preditivos validados foram integrados ao algoritmo **NSGA-II**, empregado na otimização multiobjetivo dos traços. Nessa etapa, a resistência à compressão prevista pelo modelo foi considerada como objetivo a ser maximizado, enquanto o custo e as emissões de CO_2 associadas às misturas foram considerados como objetivos a serem minimizados. Assim, o algoritmo buscou identificar composições capazes de equilibrar desempenho mecânico, viabilidade econômica e impacto ambiental.
- Na 5ª etapa, as fronteiras de Pareto geradas nas execuções do experimento foram analisadas de forma conjunta. Como os modelos de aprendizado de máquina e o **NSGA-II** apresentam natureza estocástica, diferentes execuções podem resultar em soluções ligeiramente distintas. Por esse motivo, os traços obtidos foram agrupados e avaliados quanto à sua recorrência, permitindo identificar composições mais consistentes entre as diferentes execuções.
- Por fim, na 6ª etapa, a equipe selecionou, manualmente, um traço entre as soluções obtidas pela otimização multiobjetivo, considerando o equilíbrio entre resistência à compressão, custo e emissões de CO_2 . Além desses critérios, também foi priorizada a frequência com que esse traço apareceu nas fronteiras de Pareto geradas ao longo das execuções, indicando maior estabilidade da solução. O traço selecionado foi, então, destinado à validação experimental em laboratório, com o objetivo de verificar se o desempenho previsto pelo modelo computacional era compatível com os resultados obtidos nos ensaios de compressão.

3.1 MATERIAIS

Os materiais utilizados na confecção dos concretos geopoliméricos são areia natural de Rio Preto, em Minas Gerais, brita 0, metacaulim, ácido fosfórico 85% e um aditivo incorporador de ar baseado em linear alquil benzeno sulfonato de sódio (LAS). O ácido fosfórico é adotado

como ativador geopolimérico e é preciso ser atenuado para a concentração de 10 mol/L com auxílio de um balão volumétrico e água deionizada. Por sua vez, o aditivo incorporador de ar foi adotado para aumentar a trabalhabilidade do material e evitar segregação (Mendes *et al.*, 2017).

O metacaulim passa por processos industriais em sua produção, entre eles, a etapa de calcinação, que emite CO_2 em função da energia demandada. Para considerar essa etapa na análise do processo, foi usada a base EcoInvent e observado que a cada quilograma de metacaulim se emite 0,265 kg de CO_2 equivalente. A partir dessa mesma base foram obtidos os valores de emissão de CO_2 equivalentes por kg da areia natural (0,00524 kg), da brita (0,00533 kg) e do ácido fosfórico (1,39 kg). Os custos associados à unidade funcional de 1 kg foram obtidos por meio de sites de varejo com base no mês de março de 2026: o metacaulim custa R\$ 4,00 por kg; enquanto a areia de rio custa R\$ 0,15; a brita R\$ 0,15 e o ácido fosfórico R\$ 61,52.

3.2 MOLDAGEM E CARACTERIZAÇÃO DOS CORPOS DE PROVA

A produção e a caracterização dos corpos de prova da base de dados inicial e daqueles destinados à validação experimental, foram realizados no Laboratório de Resistência dos Materiais da Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF). Os corpos de prova usados para se montar o banco de dados inicial foram moldados em formas cilíndricas de PVC com dimensões de 5x10 cm. A escolha desse formato ocorreu devido à quantidade reduzida de materiais utilizados, o que poupa recursos. Além disso, foi observado por Felipe de Azevedo *et al.* (2020) que este formato também atende às condições do concreto, em relação ao formato normalizado de 10x20 cm. Em concretos de cimento Portland, geralmente, seriam utilizadas fôrmas metálicas. Entretanto, para evitar interferências da reação da solução ácida com o metal, optou-se por confeccionar fôrmas de PVC. A Figura 11 mostra os corpos de prova após a cura, no dia do rompimento.

Figura 11 — Corpos de prova



Fonte: elaboração própria.

Esses traços foram definidos como pontos de uma malha amostral, isto é, como combinações discretas e previamente estabelecidas das variáveis de dosagem, de modo a cobrir diferentes regiões do espaço experimental. Essa estratégia permite que, posteriormente, os algoritmos de otimização busquem traços intermediários, ou seja, composições localizadas entre os pontos

originalmente ensaiados. Mantendo-se o precursor, metacaulim, como referência unitária (1), variou-se a proporção relativa de ativador em 0,24, 0,32 e 0,40; de areia em 1, 2 e 3; e de brita 0 em 0,5, 1, 1,5, 2, 2,5 e 3. Na [Tabela 1](#), essas proporções são apresentadas sempre na ordem “ativador : precursor : areia : brita 0”. Os valores adotados foram definidos com base em protótipos testados anteriormente e resultaram em resistências à compressão variando entre 2,2 e 30,3 MPa. Assim, por exemplo, o traço identificado como T1 na [Tabela 1](#), representado por 0,24 : 1 : 1 : 0,5, indica que, para cada unidade de precursor, metacaulim, foram utilizadas uma relação ativador igual a 0,24; 1 unidade de areia; 0,5 unidade de brita 0

A [Tabela 1](#) apresenta os 44 traços avaliados neste trabalho, identificados como T_n , com n variando de 1 a 44. Para cada traço, foram produzidos dois corpos de prova, posteriormente ensaiados à compressão. A coluna “Resistências” da [Tabela 1](#) registra ambos os valores encontrados no rompimento. Como a norma [ABNT 5739 \(2018\)](#) permite considerar, nesse caso, o maior valor de resistência à compressão entre os resultados obtidos, a tabela destaca em negrito o maior resultado registrado para cada composição. Dessa forma, a base de dados utilizada no treinamento dos algoritmos de aprendizado de máquina foi composta pelo melhor resultado experimental de cada traço, isto é, pela maior resistência à compressão obtida em laboratório para cada uma das 44 formulações avaliadas.

Tabela 1 — Traços de concreto geopolimérico avaliados experimentalmente

Identificador	Ativador: Precursor: Areia : Brita 0	Resistências (MPa)	Identificador	Ativador: Precursor: Areia : Brita 0	Resistências (MPa)
T1	0,24:1:1:0,5	14,8 e 13,6	T23	0,32:1:1:2,5	13,38 e 14,3
T2	0,24:1:1:1	26,4 e 30,3	T24	0,32:1:1:3	15,94 e 13,6
T3	0,24:1:1:1,5	23,1 e 22,9	T25	0,32:1:2:0,5	11,86 e 15,33
T4	0,24:1:1:2	22,3 e 22,1	T26	0,32:1:2:1	20,14 e 16,55
T5	0,24:1:1:2,5	18 e 17,9	T27	0,32:1:2:1,5	14,51 e 18,61
T6	0,24:1:1:3	17,6 e 15,2	T28	0,32:1:2:2	15,02 e 15,33
T7	0,24:1:2:0,5	8 e 11,3	T29	0,32:1:2:2,5	15,02 e 15,22
T8	0,24:1:2:1	14 e 18	T30	0,32:1:2:3	14,1 e 13,9
T9	0,24:1:2:1,5	15,7 e 12,8	T31	0,32:1:3:0,5	10,78 e 13,35
T10	0,24:1:2:2	13,9 e 14,1	T32	0,32:1:3:1	17,17 e 17,07
T11	0,24:1:2:2,5	11,8 e 10,1	T33	0,32:1:3:1,5	14,98 e 12,22
T12	0,24:1:2:3	4 e 5,2	T34	0,32:1:3:2	13,27 e 13,45
T13	0,24:1:3:0,5	7,3 e 8,1	T35	0,32:1:3:2,5	8,26 e 6,63
T14	0,24:1:3:1	9,2 e 10,8	T36	0,32:1:3:3	3,82 e 4,96
T15	0,24:1:3:1,5	8,8 e 9,4	T37	4:1:1:0,5	9,3 e 8,6
T16	0,24:1:3:2	7,6 e 8,1	T38	4:1:1:1	9,2 e 9,9
T17	0,24:1:3:2,5	6 e 6,2	T39	4:1:1:1,5	7,4 e 7,7
T18	0,24:1:3:3	2,9 e 3,3	T40	4:1:1:2	7,2 e 7
T19	0,32:1:1:0,5	11,24 e 13,08	T41	4:1:1:2,5	4,3 e 5,1
T20	0,32:1:1:1	23,17 e 18,29	T42	4:1:1:3	4,5 e 4,8

Identificador	Ativador: Precursor: Areia : Brita 0	Resistências (MPa)	Identificador	Ativador: Precursor: Areia : Brita 0	Resistências (MPa)
T21	0,32:1:1:1,5	20,64 e 19,22	T43	4:1:2:0,5	2,2 e 2,9
T22	0,32:1:1:2	15,74 e 14,72	T44	4:1:2:1	5,3 e 6,2

Fonte: elaboração própria.

Neste preparo, foi inserido em um misturador mecânico, o metacaulim, seguido da areia, e então a brita e por último a solução ácida, com o LAS diluído na proporção de 0,1% de massa de metacaulim. Após o preparo da mistura, a mesma é colocada dentro dos corpos de prova de PVC em 3 camadas adensadas por 30 golpes com soquete metálico. Os corpos de prova foram desmoldados após 7 dias e caracterizados aos 28 dias. Para os ensaios de resistência à compressão foi utilizada uma prensa hidráulica e foram seguidas as diretrizes dispostas na [ABNT \(2005\)](#).

3.3 FASE COMPUTACIONAL

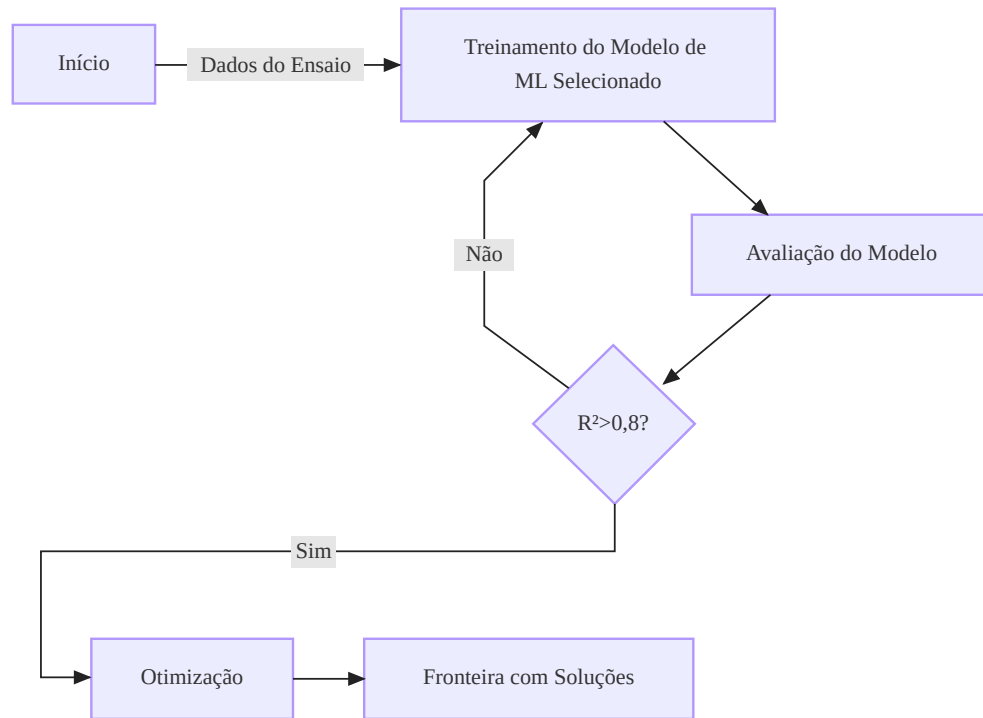
Para a condução dos experimentos computacionais, foi desenvolvido um programa principal em Python, versão 3.8.6. A manipulação e a análise dos dados experimentais foram realizadas com a biblioteca *Pandas*, enquanto os modelos preditivos foram implementados com o apoio das bibliotecas *scikit-learn* e *XGBoost*. A biblioteca *NumPy* foi empregada para operações numéricas e os procedimentos de otimização multiobjetivo foram conduzidos por meio da biblioteca *pymoo*. O código-fonte desenvolvido, juntamente com o histórico de versões do projeto, encontra-se disponível em um repositório público no GitHub¹.

Considerando a natureza estocástica dos modelos avaliados, um *script* de execução foi parametrizado para realizar 100 chamadas do programa para cada modelo de aprendizado de máquina analisado. Dessa forma, tornou-se possível avaliar a recorrência dos resultados obtidos e reduzir a influência de soluções ocasionais geradas por execuções isoladas.

Como mencionado anteriormente, o procedimento computacional foi organizado de forma sequencial. Os dados obtidos nos ensaios laboratoriais foram estruturados em uma base experimental, na qual cada traço foi descrito pelas proporções dos materiais constituintes e pelo respectivo resultado de resistência à compressão, conforme apresentado na [Tabela 1](#). Em seguida, foram realizadas as etapas de treinamento e validação dos modelos de aprendizado de máquina, seleção dos modelos com desempenho mínimo, otimização multiobjetivo e agregação dos resultados obtidos nas diferentes execuções. A [Figura 12](#) demonstra, de forma esquemática, os passos seguidos pela fase computacional do estudo, cada uma destas etapas é detalhada a seguir.

¹ Repositório do projeto: <https://github.com/LucasPaivaSantos/capstone>.

Figura 12 — Fluxo das etapas computacionais



Fonte: elaboração própria.

3.3.1 Treinamento dos modelos de aprendizado de máquina

Os modelos de aprendizado de máquina utilizados nesta pesquisa são amplamente empregados em estudos recentes voltados à previsão da resistência à compressão de materiais geopoliméricos, conforme discutido por [Carvalho *et al.* \(2025\)](#). Entretanto, considerando o escopo do trabalho, não se buscou a parametrização ótima de cada modelo. Em vez disso, optou-se por comparar os algoritmos a partir de configurações próximas aos parâmetros padrão recomendados pelas respectivas bibliotecas, com algumas adequações pontuais devido ao tamanho reduzido da base de dados.

Foram avaliados os modelos **RF**, **XGBoost** e **MLP**. Em todos os casos, as variáveis de entrada corresponderam às quantidades relativas de ativador, precursor, agregado fino e agregado graúdo, enquanto a variável de saída foi a resistência à compressão.

O modelo **RF** foi utilizado com os parâmetros padrão da biblioteca *scikit-learn*, com exceção do parâmetro responsável pela quantidade de estimadores, definido como 100. Esse parâmetro indica a quantidade de árvores de decisão construídas no conjunto do modelo. O valor adotado representa uma configuração usual para esse tipo de algoritmo, oferecendo equilíbrio entre desempenho preditivo, complexidade computacional e resistência a sobreajuste. Além disso, testes preliminares indicaram que a variação isolada desse parâmetro não resultou em ganhos relevantes de desempenho. Entre os demais valores padrão adotados, manteve-se o erro quadrático como critério de avaliação das divisões, não foi estabelecido limite máximo para a

profundidade das árvores e definiu-se o mínimo de uma amostra por folha e o mínimo de duas amostras para que um nó pudesse ser dividido.

No modelo **XGBoost**, foi utilizada a função objetivo de erro quadrático. Além disso, foram definidos os parâmetros responsáveis pela amostragem das observações e das variáveis, ambos com valor de 0,8, indicando que, a cada etapa de treinamento, o modelo utiliza 80% das amostras e 80% das variáveis disponíveis para a construção das árvores. Essa estratégia introduz aleatoriedade controlada no treinamento, contribuindo para reduzir o risco de sobreajuste, especialmente diante do tamanho reduzido da base de dados. Os demais parâmetros permaneceram os valores padrão da biblioteca **XGBoost**, mantendo-se a taxa de aprendizagem em 0,3, a profundidade máxima das árvores igual a 6, a redução mínima de perda para novas divisões igual a 0, o peso mínimo necessário em nós-filhos igual a 1 e os termos de regularização $L1$ e $L2$ iguais a 0 e 1, respectivamente.

Para a rede neural artificial, foram utilizadas duas camadas ocultas, a primeira com 100 neurônios e a segunda com 50 neurônios. A função de ativação adotada foi a unidade linear retificada, responsável por introduzir não linearidade ao modelo e permitir a aprendizagem de relações mais complexas entre as proporções dos materiais e a resistência à compressão (Banerjee; Mukherjee; Pasilliao, 2019). Também foi escolhido o otimizador *lbfgs* pela literatura aponta-lo como adequado para base de dados pequenas (Basavaraju *et al.*, 2020). O número máximo de iterações foi definido como 4000, a fim de permitir tempo suficiente para o ajuste dos pesos da rede. Os demais parâmetros permaneceram os valores padrão da biblioteca *scikit-learn*, mantendo-se a regularização $L2$ em 0,0001, a tolerância para convergência em 0,0001 e o número máximo de avaliações da função em 15000.

3.3.2 Estratégia de validação

Devido ao tamanho reduzido da base de dados, verificou-se que a estratégia de validação cruzada *leave-one-out* poderia ser aplicada sem exceder os recursos computacionais disponíveis. Por esse motivo, essa abordagem foi escolhida para a execução dos testes, nos quais o desempenho dos modelos foi avaliado por meio das métricas R^2 e $RMSE$.

3.3.3 Critério aplicado aos modelos de aprendizado de máquina

Devido à natureza estocástica dos algoritmos de aprendizado de máquina empregados e do processo de otimização evolutiva, o experimento não resulta em uma única fronteira de Pareto definitiva. Em vez disso, cada execução pode produzir modelos com desempenhos distintos e, conseqüentemente, fronteiras de Pareto ligeiramente diferentes. Assim, tornou-se necessária a aplicação de um critério de restrição para selecionar apenas os modelos com desempenho mínimo adequado para a etapa de otimização e para as análises posteriores.

O critério adotado foi o desempenho mínimo do modelo de aprendizado de máquina. Dessa forma, foram considerados válidos apenas os modelos que atingiram coeficiente de determinação R^2 mínimo de 0,8. Assim, o programa treina um modelo utilizando uma semente aleatória, caso o modelo atinja o valor mínimo de R^2 estabelecido, o fluxo do programa segue para a etapa de otimização. Caso contrário, o modelo é descartado e uma nova semente é sorteada.

para que o processo seja repetido, até que o desempenho desejado seja alcançado ou até que seja atingido o limite de 100 tentativas. O valor mínimo de $R^2 = 0,8$ baseia-se na análise da literatura realizada por [Carvalho et al. \(2023a\)](#).

3.3.4 Otimização com NSGA-II

Na etapa de otimização multiobjetivo, apenas os modelos de aprendizado de máquina que atingiram o critério mínimo de desempenho preditivo definido para a pesquisa foram integrados ao [NSGA-II](#). Dessa forma, os modelos com $R^2 \geq 0,8$ passaram a ser utilizados como estimadores da resistência à compressão dos traços avaliados pelo algoritmo evolutivo figurando como função de aptidão para este objetivo.

Além da resistência à compressão, o [NSGA-II](#) também considerou os demais objetivos definidos para o problema de dosagem. Nesse caso, enquanto a resistência prevista pelo modelo era buscada em valores mais elevados, o custo e as emissões de CO_2 das misturas foram tratados como objetivos de minimização. Assim, cada indivíduo da população representava um traço candidato, descrito pelas proporções de ativador, precursor, agregado fino e agregado graúdo, sendo avaliado simultaneamente quanto ao desempenho mecânico, à viabilidade econômica e ao impacto ambiental.

As emissões de CO_2 e o custo de cada traço foram calculados por meio da soma das quantidades de seus componentes multiplicadas pelos respectivos fatores unitários. O cálculo das emissões é apresentado na [Equação 9](#), enquanto o cálculo do custo é apresentado na [Equação 10](#).

$$CO_2 = 1.39A + 0.265P + 0.00524A_f + 0.00533A_g \quad (9)$$

$$C = 61.52A + 4.0P + 0.15A_f + 0.15A_g \quad (10)$$

Nessas equações, A , P , A_f e A_g representam, respectivamente, as quantidades de ativador químico, precursor, agregado fino e agregado graúdo. Os coeficientes correspondem aos fatores unitários de emissão de CO_2 e de custo associados a cada material.

Foi observado que populações de 10 indivíduos eram suficientes para preservar a variabilidade genética e evitar a convergência prematura do algoritmo. Além disso, verificou-se experimentalmente que, neste caso, 100 gerações eram suficientes para que o [NSGA-II](#) convergisse para soluções sem ganhos adicionais. A população inicial foi gerada de forma aleatória dentro dos limites definidos para as variáveis do problema, enquanto os operadores evolutivos foram mantidos conforme os padrões da biblioteca *pymoo*. Dessa forma, a seleção dos indivíduos reprodutores foi realizada por torneio binário, e a recombinação entre soluções foi conduzida por cruzamento binário simulado, com probabilidade padrão de 0,9 e índice de distribuição igual a 15. Por sua vez, a introdução de variabilidade ocorreu por meio de mutação polinomial, com índice de distribuição igual a 20 e probabilidade de mutação por variável igual a 0,25. O número de gerações foi definido como 150, utilizado como critério de parada da otimização, a fim de fornecer uma margem adicional de segurança para confirmar a estabilidade das soluções encontradas.

3.3.5 Análise das fronteiras obtidas

A equipe optou por não aplicar uma etapa computacional adicional para selecionar, entre todas as soluções obtidas, aquela que seria submetida à validação experimental em laboratório. Em vez disso, privilegiou-se a avaliação técnica dos especialistas envolvidos na pesquisa.

Ao final da fase computacional, foi desenvolvido um programa auxiliar destinado ao agrupamento das fronteiras de Pareto geradas nas diferentes execuções. Esse procedimento foi necessário porque, embora algumas soluções apresentassem características aparentemente muito vantajosas, como alta resistência prevista, era importante identificar traços estáveis, isto é, composições encontradas com frequência pelo *NSGA-II* ao longo das execuções.

Dessa forma, a análise das fronteiras obtidas não se limitou à observação isolada dos melhores valores de cada objetivo. Também foi considerada a frequência com que determinadas soluções apareciam nas execuções do algoritmo, permitindo distinguir resultados pontuais de soluções mais recorrentes e consistentes. A discussão detalhada dessas fronteiras, bem como da frequência dos traços identificados, é apresentada no próximo capítulo, na Seção 4.2.

3.4 VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL

A validação experimental foi realizada a partir de um traço frequentemente identificado pelo melhor modelo obtido na fase computacional. A escolha considerou uma solução com resistência à compressão relativamente elevada e, ao mesmo tempo, com custos e emissões de CO_2 moderados.

Para essa etapa, foram moldados três novos corpos de prova, seguindo a mesma metodologia experimental adotada na produção dos corpos de prova que compuseram a base de dados inicial. Após 28 dias de cura, os corpos de prova foram submetidos ao ensaio de compressão, permitindo comparar os resultados experimentais obtidos com as previsões fornecidas pelo modelo. Os resultados dessa etapa, bem como das demais fases da pesquisa, são apresentados e discutidos no Capítulo 4.

4 RESULTADOS

Este capítulo apresenta e discute os resultados obtidos na pesquisa. Inicialmente, são analisados os desempenhos dos modelos de aprendizado de máquina na previsão da resistência à compressão, considerando as métricas R^2 e RMSE e o critério mínimo estabelecido para sua integração ao processo de otimização. Em seguida, são examinadas as fronteiras de Pareto geradas pelo NSGA-II, com ênfase no comportamento das soluções quanto à resistência mecânica, ao custo e às emissões de CO_2 . Por fim, são apresentados os resultados da validação experimental do traço selecionado, comparando-se a resistência prevista pelo modelo com os valores obtidos em laboratório, a fim de avaliar a aplicabilidade e a confiabilidade da abordagem proposta.

4.1 MODELOS DE APRENDIZADO DE MÁQUINA

Os resultados obtidos evidenciam diferenças entre os modelos avaliados. O RF apresentou o pior desempenho entre os algoritmos testados, atingindo no máximo $R^2 = 0,74$ e RMSE mínimo de 3,02 MPa. Como esse resultado ficou abaixo do critério mínimo de $R^2 \geq 0,8$ definido para a pesquisa, o modelo foi descartado da etapa de otimização. O XGBoost, por sua vez, atingiu $R^2 = 0,83$ e RMSE de 2,51 MPa como melhores métricas, atendendo ao critério estabelecido. Entretanto, apesar do desempenho preditivo satisfatório, sua fronteira de Pareto foi limitada, apresentando apenas duas soluções previamente conhecidas: uma associada ao extremo de maior resistência à compressão e outra ao extremo de minimização de custo e emissões de CO_2 . A MLP apresentou o melhor desempenho geral, com $R^2 = 0,86$ máximo e RMSE mínimo de 2,32 MPa, além de gerar uma fronteira de Pareto mais ampla, composta por dez soluções, incluindo algumas inéditas. A Tabela 2 mostra as melhores métricas obtidas por cada modelo e os pontos da fronteira de Pareto.

Tabela 2 — Estatísticas dos modelos de aprendizado de máquina

Nome	R^2 Máximo	RMSE Mínimo	Pontos na Fronteira de Pareto
Random Forest	0,74	3,02	Modelo Descartado
Xgboost	0,83	2,51	2
Rede Neural (MLP)	0,86	2,32	10

Fonte: elaboração própria.

A diferença de desempenho entre os modelos pode estar relacionada à forma como cada algoritmo representa as relações entre as variáveis de entrada e a resistência à compressão. O RF, embora robusto em muitas aplicações, depende da combinação de múltiplas árvores de decisão e pode ter apresentado dificuldade de generalização diante da base reduzida utilizada neste trabalho. Além disso, como cada árvore é treinada a partir de subconjuntos dos dados e das variáveis, o número efetivo de amostras utilizado na construção de cada árvore pode se tornar ainda menor.

Outra hipótese está relacionada à parametrização adotada. Neste trabalho, os modelos foram avaliados com configurações simples, sem uma busca exaustiva pela melhor combinação de hiperparâmetros. No caso do RF e do XGBoost, parâmetros como profundidade máxima das árvores, número mínimo de amostras por folha, taxa de aprendizado, número de estimadores e

intensidade de regularização podem alterar significativamente o equilíbrio entre ajuste aos dados de treinamento e capacidade de generalização. Assim, o desempenho inferior do **RF** e a limitação do **XGBoost** na etapa de otimização não indicam necessariamente que esses algoritmos sejam inadequados para trabalhos semelhantes, mas que, nas condições metodológicas adotadas, eles foram menos eficientes que a **MLP**, um algoritmo que depende menos de parametrização manual.

O **XGBoost** apresentou desempenho superior ao **RF**, atingindo o critério mínimo definido para a pesquisa, porém sua aplicação na etapa de otimização mostrou-se limitada. Esse comportamento pode estar relacionado à própria estrutura do algoritmo, uma vez que o **XGBoost** também é baseado em árvores de decisão. Modelos desse tipo dividem o espaço das variáveis de entrada em regiões discretas, nas quais as previsões tendem a assumir valores próximos ou constantes dentro de cada partição. Assim, mesmo quando o **NSGA-II** gera traços intermediários entre aqueles avaliados experimentalmente, o modelo pode atribuir a essas novas composições valores semelhantes aos de traços já conhecidos, em vez de representar uma variação contínua da resistência à compressão. Esse comportamento torna-se mais crítico quando a base experimental possui poucas amostras, como ocorre neste trabalho. Com poucos exemplos disponíveis, o modelo possui menor quantidade de informações para identificar tendências suaves entre as proporções dos materiais e a resistência resultante. Como consequência, o **XGBoost** tende a apresentar maior dificuldade para extrapolar ou interpolar soluções com comportamento realmente distinto dos pontos observados no treinamento. Dessa forma, essa característica pode ter feito com que a fronteira de Pareto gerada pelo modelo apresente baixa diversidade, permanecendo limitada a soluções próximas das composições já ensaiadas em laboratório.

A **MLP**, por outro lado, apresentou comportamento mais adequado aos objetivos deste trabalho. Esse resultado pode estar associado à sua capacidade de representar relações não lineares de maneira mais contínua, favorecendo a interpolação entre os traços avaliados experimentalmente. Nesse contexto, a **MLP** não apenas apresentou melhor desempenho estatístico, mas também forneceu uma superfície de resposta mais útil para o processo de otimização multiobjetivo.

A literatura apresenta resultados variados para o **RF** e o **XGBoost**. Em alguns estudos, esses modelos obtiveram desempenhos próximos aos observados nesta pesquisa; em outros, alcançaram resultados superiores. Essa variação não deve ser interpretada como conflito direto entre os trabalhos, mas como consequência das diferenças metodológicas envolvidas. *Carvalho et al. (2025)* observaram, em uma revisão sobre inteligência artificial aplicada a geopolímeros, que não existe um algoritmo universalmente superior, pois o desempenho dos modelos depende das características da base de dados, das variáveis consideradas, das estratégias de pré-processamento, da validação e da definição dos hiperparâmetros. Essa observação é especialmente relevante para o presente trabalho, uma vez que os modelos foram avaliados com uma base reduzida, composta por apenas 44 traços de concretos geopoliméricos ácidos. Em contraste, os estudos comparados utilizaram, em geral, bases mais amplas, materiais mais consolidados na literatura e maior quantidade de variáveis explicativas.

A comparação com a literatura indica que o desempenho inferior do **RF** neste trabalho não é um resultado isolado. No estudo de *Li et al. (2023)*, voltado a concretos geopoliméricos

alcalinos de escória e cinza volante, o RF apresentou $R^2 = 0,94$ no conjunto de treinamento, mas apenas $R^2 = 0,71$ no conjunto de teste.

Ji *et al.* (2024) também avaliaram o XGBoost como modelo de aprendizado de máquina para a previsão da resistência à compressão de geopolímeros alcalinos. Nesse estudo, os autores utilizaram uma base composta por 795 dados de resistência para treinar o modelo, que posteriormente foi associado ao algoritmo *Particle Swarm Optimization*. Como resultado, obtiveram $R^2 = 0,95$ e validação experimental satisfatória para traços com resistências-alvo de 20 MPa, 40 MPa e 60 MPa. Esse desempenho foi superior ao obtido na presente pesquisa, em que o XGBoost atingiu $R^2 = 0,83$ e RMSE mínimo de 2,51 MPa. Essa diferença pode estar relacionada, principalmente, à maior dimensão da base de dados utilizada por Ji *et al.* (2024), ao ajuste sistemático de hiperparâmetros e à estratégia de retroalimentação experimental adotada pelos autores. No presente trabalho, por outro lado, o XGBoost foi treinado apenas com a base experimental inicial e com parametrização simples.

O estudo de Guo, Meng e Bao (2024) reforça essa interpretação. Os autores utilizaram 676 traços de geopolímeros de alto desempenho e compararam diferentes modelos, selecionando o XGBoost após ajuste de hiperparâmetros. O desempenho do modelo aumentou de $R^2 = 0,831$, antes da otimização de parâmetros, para $R^2 = 0,97$ no conjunto de teste. Além do maior número de dados e parâmetros otimizados, os autores incluíram informações físico-químicas dos materiais, condições de processamento e variáveis relacionadas à composição dos constituintes.

Também é importante observar que, mesmo em bases maiores, o XGBoost não é necessariamente o melhor modelo. Hosseinzadeh e Dehestani (2025) compararam 14 algoritmos de aprendizado de máquina, incluindo RF, XGBoost, em uma base com 886 traços de concreto e verificaram que a MLP apresentou o melhor desempenho para previsão da resistência à compressão, com R^2 próximo de 0,85, superando modelos como XGBoost e RF. Esse resultado é coerente com o comportamento observado nesta pesquisa, na qual a MLP apresentou o maior R^2 entre os modelos avaliados, além da fronteira de Pareto mais diversa.

4.2 OTIMIZAÇÃO

Durante a etapa de otimização, observou-se uma diferença clara nos comportamentos do XGBoost e da MLP quando integrados ao NSGA-II. Com a MLP como modelo preditivo, o algoritmo genético exigiu algumas dezenas de gerações para estabilizar a fronteira de Pareto, indicando uma exploração mais gradual do espaço de busca. No caso do XGBoost, por outro lado, a convergência ocorreu em poucas gerações, por vezes antes de 10 iterações, atingindo rapidamente um mesmo patamar de soluções, com apenas dois traços que já integravam o conjunto de treinamento.

As Tabela 3 e Tabela 4 apresentam, respectivamente, as fronteiras geradas pelo NSGA-II quando integrado ao XGBoost e à MLP, considerando os experimentos com maior R^2 . Os valores dos traços foram arredondados.

Tabela 3 — Fronteira gerada pela associação com extreme gradient boosting (XGBoost)

Identificador	Resistência (MPa)	Custo (R\$/kg)	CO ₂ equiva- lente	Ativador: Precursor:
---------------	----------------------	----------------	----------------------------------	-------------------------

				Areia : Brita 0
T1	14.80	18.98	0.60	0.24:1:1:0,5
T2	30.18	19.06	0.60	0.24:1:1:1

Fonte: elaboração própria.

Tabela 4 — Exemplo de fronteira gerada pela associação com [rede neural multicamadas \(MLP\)](#)

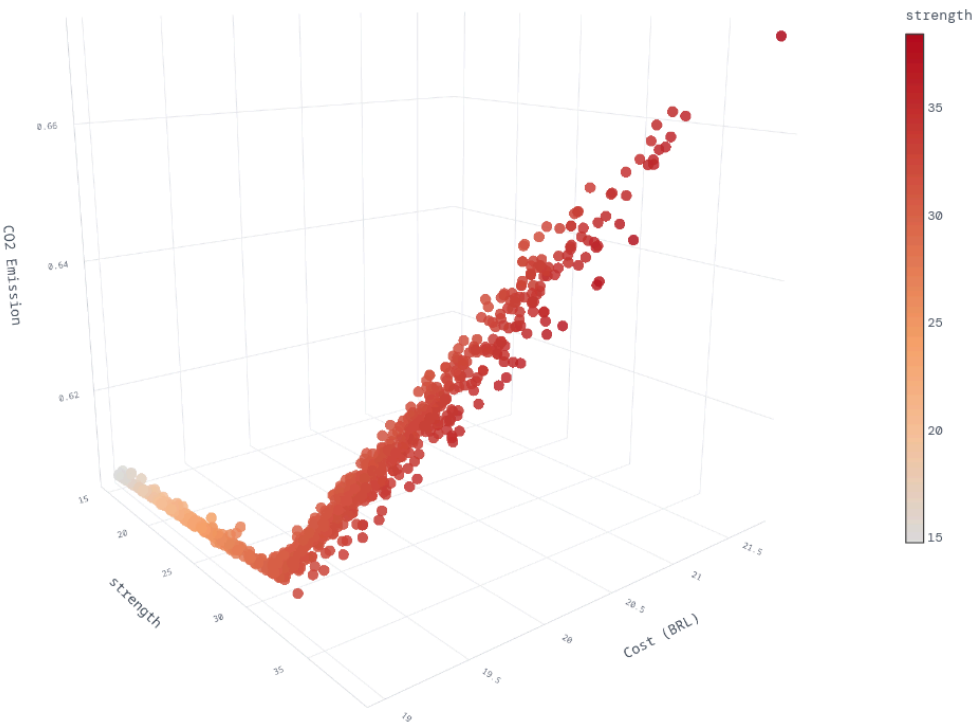
Identificador	Resistência (MPa)	Custo (R\$/kg)	CO ₂ equiva- lente	Ativador: Precursor: Areia : Brita 0
T1	14.80	18.98	0.60	0.24:1:1:0,50
T2	32.97	19.70	0.62	0.25:1:1:0,88
T3	31.70	19.27	0.61	0.24:1:1:0,88
T4	17.17	18.99	0.60	0.24:1:1:0,54
T5	32.10	19.05	0.61	0.24:1:1:0,91
T6	31.09	19.41	0.60	0.24:1:1:0,92
T7	32.71	19.70	0.62	0.25:1:1:0,89
T8	32.17	19.58	0.62	0.25:1:1:0,84
T9	26.26	19.02	0.60	0.24:1:1:0,70
T10	32.76	19.70	0.62	0.25:1:1:0,88

Fonte: elaboração própria.

A [MLP](#) conseguiu extrapolar os limites dos traços originalmente ensaiados e identificar soluções intermediárias não presentes na base de dados laboratorial. Entre essas soluções, destacou-se um traço particularmente interessante, por apresentar não apenas ganho mecânico como manter valores modestos de custo e emissão de CO₂. Este traço está identificado por **T2** na [Tabela 5](#) e por **T7** na [Tabela 4](#). Assim, essa solução representa um ponto especialmente favorável da fronteira de Pareto, por apresentar um bom desempenho mecânico com viabilidade econômica e impacto ambiental razoáveis.

A [Figura 13](#) apresenta, de forma consolidada, as fronteiras de Pareto obtidas nas diferentes execuções em que a [MLP](#) foi integrada ao [NSGA-II](#). A sobreposição das soluções permite observar que os pontos não se distribuem uniformemente pelo espaço de busca. Algumas regiões apresentam elevada concentração de soluções, enquanto outras são ocupadas por poucos pontos. As regiões mais densas indicam que diferentes execuções conduziram o processo de otimização a soluções semelhantes, sugerindo maior estabilidade dessas combinações diante da natureza estocástica do treinamento da [MLP](#) e do [NSGA-II](#).

Figura 13 — Fluxo das etapas computacionais



Fonte: elaboração própria.

A concentração visual apresentada na [Figura 13](#), entretanto, não corresponde diretamente à frequência percentual de um traço específico, pois pontos próximos podem representar composições ligeiramente diferentes. Para a contabilização das frequências, as soluções equivalentes foram agrupadas após o arredondamento das proporções dos materiais. A partir desse procedimento, verificou-se que o traço selecionado apareceu em 44% das execuções independentes do experimento computacional.

Não obstante, o traço selecionado apresentou notável recorrência nas execuções independentes do experimento computacional, sendo encontrado em 44% das execuções após o agrupamento de soluções equivalentes por arredondamento das proporções dos materiais. Essa frequência sugere estabilidade da solução diante da natureza estocástica do processo. Por esses motivos, o traço foi selecionado para a etapa de validação empírica em laboratório. A [Tabela 5](#) mostra os 10 traços encontrados com maior frequência durante o experimento utilizando a [MLP](#). [Tabela 5](#) — Traços mais frequentes encontrados na associação com [rede neural multicamadas \(MLP\)](#).

Identifica- dor	Frequên- cia	Resistên- cia Média (MPa)	Custo (R\$/ kg)	CO ₂ equi- valente	Ativador: Precursor: Areia : Brita 0
T1	100%	14.80	18.98	0.60	0.24:1:1:0,50
T2	44%	32.41	19.70	0.62	0.25:1:1:0,90
T3	37%	32.17	19.70	0.62	0.25:1:1:0,91
T4	21%	31.75	19.27	0.61	0.24:1:1:0,98
T5	19%	30.63	18.99	0.60	0.24:1:1:0,89

T6	17%	31.24	19.05	0.60	0.24:1:1:0,91
T7	17%	30.66	19.70	0.61	0.24:1:1:0,96
T8	16%	31.92	19.91	0.62	0.25:1:1:0,98
T9	15%	30.59	19.66	0.61	0.24:1:1:0,94
T10	15%	32.20	19.82	0.62	0.25:1:1:0,93

Fonte: elaboração própria.

O traço de maior resistência observado experimentalmente apresentou resistência de 30,3 MPa, com custo de R\$ 19,06 e emissão de 0,61 kg CO_2 equivalente. Em comparação, o traço destacado atinge resistência média de 32,41 MPa, representando um aumento de aproximadamente 6,96%, enquanto o custo se eleva para cerca de R\$ 19,88 (4,3%) e a emissão para aproximadamente 0,62 kg CO_2 (1,64%).

Em termos de métricas de eficiência, a eficiência custo-resistência (MPa/R\$) evolui de aproximadamente 1,59 no melhor traço experimental para cerca de 1,63 no traço previsto, enquanto a eficiência ambiental (MPa/kg CO_2) aumenta de aproximadamente 49,7 para 52,3. Por fim, ao considerar o ganho relativo em relação à base experimental, observa-se que o modelo foi capaz de extrapolar o espaço de soluções originalmente ensaiado, obtendo um incremento de quase 7% na resistência à compressão, mantendo aumentos marginais de custo e impacto ambiental.

4.3 VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DO TRAÇO SELECIONADO

Após a seleção do traço, usando a composição do **T2** da [Tabela 5](#), foi realizada uma etapa de validação experimental com o objetivo de verificar se a solução indicada pela pesquisa apresentaria, em laboratório, desempenho compatível com a resistência prevista. Para isso, foram moldados três corpos de prova utilizando o mesmo procedimento de preparo, moldagem, cura e caracterização adotado na produção dos corpos de prova empregados no treinamento dos modelos de aprendizado de máquina.

Três corpos de prova foram produzidos e caracterizados quanto à resistência à compressão aos 28 dias, resultando nos valores de 28,2 MPa, 32,1 MPa e 32,8 MPa. Considerando o maior valor obtido na validação experimental, a resistência alcançada foi de 32,8 MPa, valor ligeiramente superior ao previsto pelo algoritmo, que estimava 32,41 MPa para o traço selecionado. A diferença absoluta entre o valor experimental máximo e o valor previsto foi de 0,39 MPa, correspondente a aproximadamente 1,2%. Esses resultados indicam uma dispersão moderada entre os corpos de prova, compatível com a variabilidade esperada em materiais cimentícios experimentais.

Considerando que a resistência prevista pelo modelo para o traço selecionado foi de 32,4 MPa, a diferença absoluta entre a previsão e a média experimental obtida (31 MPa) foi de aproximadamente 1,4 MPa. Em termos percentuais, esse valor corresponde a um erro de previsão de cerca de 4,2% em relação ao valor previsto. Assim, mesmo com a dispersão observada entre os corpos de prova, a média experimental apresentou boa concordância com a estimativa computacional, indicando que o modelo foi capaz de prever a resistência do traço selecionado com erro reduzido.

Outro ponto relevante é que a resistência média obtida na validação experimental superou o maior valor observado na base de dados original, que era de 30,3 MPa. Esse resultado reforça que a **MLP** conseguiu extrapolar, de forma coerente, os limites dos traços inicialmente ensaiados, indicando uma composição não presente no conjunto experimental original, mas capaz de apresentar desempenho mecânico superior ao melhor traço utilizado no treinamento.

Dessa forma, a validação experimental confirma a relevância do procedimento computacional adotado. Embora o resultado não elimine a necessidade de novos ensaios, especialmente com maior número de corpos de prova e avaliação de outras propriedades, ele demonstra que a integração entre aprendizado de máquina e **NSGA-II** foi capaz de orientar a seleção de um traço promissor. Assim, a abordagem computacional não substitui integralmente a etapa laboratorial, mas atua como ferramenta de direcionamento experimental, reduzindo o espaço de busca e concentrando os ensaios em composições com maior probabilidade de bom desempenho.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo desenvolver uma abordagem computacional para auxiliar a dosagem de concretos geopoliméricos ácidos, integrando modelos de aprendizado de máquina ao algoritmo de otimização multiobjetivo **NSGA-II**. A proposta buscou contribuir para a redução da dependência de ensaios laboratoriais extensivos e para a identificação de traços capazes de harmonizar resistência a compressão, custo e emissões de CO_2 .

A partir dos 44 traços experimentais produzidos com metacaulim, ácido fosfórico, areia e brita, foi possível construir uma base de dados inicial para o treinamento e a avaliação dos modelos preditivos. Entre os algoritmos avaliados, o **RF** apresentou o desempenho menos satisfatório, não atingindo o critério mínimo de $R^2 = 0,80$ estabelecido para participação na etapa de otimização. O **XGBoost**, embora tenha atingido desempenho preditivo aceitável, mostrou-se limitado na etapa de otimização, gerando uma fronteira de Pareto restrita, composta por apenas duas soluções, ambas associadas a traços já conhecidos experimentalmente. Esse comportamento indica que, para a base de dados utilizada, o modelo ficou fortemente condicionado às soluções previamente observadas, sem capacidade suficiente de extrapolar o espaço de busca.

A **MLP**, por sua vez, apresentou o melhor desempenho entre os modelos avaliados, alcançando R^2 de até 0,86 e o menor valor de RMSE entre os algoritmos testados. Quando integrada ao **NSGA-II**, a **MLP** permitiu a construção de uma fronteira de Pareto mais ampla, composta por soluções intermediárias entre os objetivos analisados. Entre essas soluções, destacou-se um traço com resistência média prevista de aproximadamente 32,40 MPa, custo estimado de R\$ 19,70 e emissão aproximada de 0,62 kg de CO_2 . Esse traço apareceu em 44% das execuções do experimento, o que indica estabilidade da solução frente à natureza estocástica do processo.

A validação experimental do traço selecionado reforçou a viabilidade da abordagem proposta. Os três corpos de prova produzidos com o traço otimizado apresentaram resistências à compressão de 28,2 MPa, 32,1 MPa e 32,8 MPa aos 28 dias. Embora a média desses valores seja inferior à resistência prevista pelo modelo, a diferença observada foi pequena diante da variabilidade inerente ao processo experimental e do tamanho reduzido da base de dados utilizado no treinamento. Além disso, os maiores valores obtidos superaram a maior resistência registrada no conjunto experimental inicial, de 30,3 MPa, indicando que o modelo não apenas reproduziu soluções conhecidas, mas foi capaz de orientar a seleção de um traço com desempenho mecânico superior ao observado na etapa experimental inicial.

Dessa forma, os resultados obtidos indicam que a combinação entre aprendizado de máquina e otimização evolutiva é uma alternativa promissora para apoiar a dosagem de concretos geopoliméricos ácidos. A abordagem permitiu explorar computacionalmente novas composições, reduzir o espaço de busca experimental e selecionar um traço com desempenho satisfatório para validação em laboratório. Assim, o método proposto contribui para tornar o processo de desenvolvimento desses materiais mais eficiente, com potencial para economia de tempo, recursos financeiros e consumo de materiais.

Apesar dos resultados positivos, algumas limitações devem ser destacadas. A base de dados utilizada ainda é reduzida, contendo apenas 44 traços experimentais, o que restringe a capacidade de generalização dos modelos. Além disso, a pesquisa considerou apenas a resistência à compressão aos 28 dias, o custo e as emissões de CO_2 , não abrangendo propriedades como trabalhabilidade, durabilidade, absorção de água, porosidade, estabilidade térmica ou desempenho em ambientes agressivos. Também não foi realizada uma otimização aprofundada dos hiperparâmetros dos modelos, uma vez que o foco principal foi validar a viabilidade da abordagem proposta.

Em trabalhos futuros, se faz pertinente ampliar a base de dados experimental, incluindo novos traços, diferentes relações entre ativador e precursor, variações na concentração do ácido fosfórico e outros tipos de precursores. Também é possível validar experimentalmente outros pontos da fronteira de Pareto, como aqueles associados a menores custos e menores emissões de CO_2 . Além disso, a inclusão de novas propriedades como objetivos de otimização pode tornar o modelo mais robusto e mais próximo das exigências reais de aplicação em engenharia. Por fim, a retroalimentação contínua da base de dados com novos ensaios pode permitir o aprimoramento progressivo dos modelos preditivos, consolidando uma metodologia iterativa para o desenvolvimento de concretos geopoliméricos ácidos mais eficientes e sustentáveis.

REFERÊNCIAS

- ABNT. **ABNT NBR 13279: Argamassa para assentamento e revestimento de paredes e tetos — Determinação da resistência à tração na flexão e à compressão**. Rio de Janeiro: [S.n.], 2005.
- ABNT 5739. **ABNT NBR 5739: Concreto – Ensaio de compressão de corpos de prova cilíndricos**. Rio de Janeiro: [S.n.], 2018.
- AHMAD, Madiha; RASHID, Khuram; TARIQ, Zainab; JU, Minkwan. Utilization of a novel artificial intelligence technique (ANFIS) to predict the compressive strength of fly ash-based geopolymer. **Construction and Building Materials**, v. 301, p. 124251, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.124251>.
- ALADAG, Cagdas; EGRIOGLU, Erol; YOLCU, Ufuk. Robust multilayer neural network based on median neuron model. **Neural Computing and Applications**, v. 24, , 2014. DOI: [10.1007/s00521-012-1315-5](https://doi.org/10.1007/s00521-012-1315-5).
- ALLGAIER, Johannes; PRYSS, Rüdiger. Cross-Validation Visualized: A Narrative Guide to Advanced Methods. **Mach. Learn. Knowl. Extr.**, v. 6, p. 1378–1388, 2024. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:270671696>.
- ALSHIHRI, Marai M.; AZMY, Ahmed M.; EL-BISY, Mousa S. Neural networks for predicting compressive strength of structural light weight concrete. **Construction and Building Materials**, v. 23, n. 6, p. 2214–2219, 2009. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2008.12.003>.
- BAL, Cagatay; DEMIR, Serdar. Estimating the Initial Weights in Artificial Neural Networks for Univariate Time Series with Kernel Density Estimator. 2025. DOI: [10.21203/rs.3.rs-7885425/v1](https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-7885425/v1).
- BANERJEE, Chaity; MUKHERJEE, Tathagata; PASILIAO, Eduardo L. An Empirical Study on Generalizations of the ReLU Activation Function. **Proceedings of the 2019 ACM Southeast Conference**, 2019. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:146806760>.
- BASAVARAJU, Akanksh; DU, Jing; ZHOU, Fujie; JI, Jim. A Machine Learning Approach to Road Surface Anomaly Assessment Using Smartphone Sensors. **IEEE Sensors Journal**, v. 20, p. 2635–2647, 2020. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:201139605>.
- BISHOP, C.M. **Pattern recognition and machine learning**. [S.l.]: Springer New York, 2006. v. 4. Disponível em: http://scholar.google.com/scholar.bib?q=info:jYxggZ6Ag1YJ:scholar.google.com/&output=citation&hl=en&as_sdt=0,5&as_vis=1&ct=citation&cd=0.
- BLOCKEEL, Hendrik; STRUYF, Jan. Efficient Algorithms for Decision Tree Cross-validation. **Journal of Machine Learning Research**, v. 3, p. 621–650, 2002. DOI: [10.48550/arXiv.cs/0110036](https://doi.org/10.48550/arXiv.cs/0110036).
- BREIMAN, L. Random Forests. **Machine Learning**, v. 45, p. 5–32, 2001. DOI: [10.1023/A:1010950718922](https://doi.org/10.1023/A:1010950718922).
- CARVALHO, Aldo Ribeiro de; PITA, Romário Parreira; OLIVEIRA, Thaís Mayra de; SILVA, Guilherme Jorge Brigolini; MENDES, Julia Castro. Exploratory literature review and scientific analysis of artificial intelligence applied to geopolymeric materials. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 145, p. 110210, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2025.110210>.
- CARVALHO, Aldo Ribeiro de; SILVA CALDERÓN-MORALES, Bianca Rafaela da; BORBA JÚNIOR, José Carlos; OLIVEIRA, Thaís Mayra de; SILVA, Guilherme Jorge Brigolini. Proposition of geopolymers obtained through the acid activation of iron ore tailings with phosphoric

acid. **Construction and Building Materials**, v. 403, p. 133078, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.133078>.

CARVALHO, Aldo; MENDES, Julia; OLIVEIRA, Thais Mayra de; BRIGOLINI, Guilherme. Potencial do uso dos resíduos industriais originados no estado de Minas Gerais como precursores geopoliméricos - Potential application of industrial waste from the state of Minas Gerais as geopolymer precursors. *[S.l.]: [S.n.]*, 2023.

CHEN, Keyu; WU, Da Zhi; XIA, Linling; CAI, Qimao; ZHANG, Zhen-ying. Geopolymer concrete durability subjected to aggressive environments – A review of influence factors and comparison with ordinary Portland cement. **Construction and Building Materials**, v. 279, p. 122496, 2021. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:233598717>.

CHEN, Keyu; WU, Da Zhi; YI, Ming; CAI, Qimao; ZHANG, Zhen-ying. Mechanical and durability properties of metakaolin blended with slag geopolymer mortars used for pavement repair. **Construction and Building Materials**, v. 281, p. 122566, 2021. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:233584134>.

CHEN, Tianqi; GUESTRIN, Carlos. XGBoost: A Scalable Tree Boosting System. *[S.l.]: [S.n.]*, 2016. p. 785–794. DOI: [10.1145/2939672.2939785](https://doi.org/10.1145/2939672.2939785).

CUI, Xue-min; LIU, Le-ping; HE, Yan; CHEN, Jin-yu; ZHOU, Ji. A novel aluminosilicate geopolymer material with low dielectric loss. **Materials Chemistry and Physics**, v. 130, n. 1, p. 1–4, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.06.039>.

DAMION, Tom; CHAUNSALI, Piyush. Evaluating acid resistance of Portland cement, calcium aluminate cement, and calcium sulfoaluminate based cement using acid neutralisation. **Cement and Concrete Research**, v. 162, p. 107000, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2022.107000>.

DAVIDOVITS, J. **Geopolymer Chemistry and Applications**. *[S.l.]: Lulu.com*, 2020. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=JgIKPgAACAAJ>.

DAVIDOVITS, Joseph. Solid-phase synthesis of a mineral blockpolymer by low temperature polycondensation of alumino-silicate polymers: Na-poly (sialate) or Na-PS and characteristics. *In: Proceedings of the IUPAC Symposium on Long-Term Properties of Polymers and Polymeric Materials, Stockholm, Sweden*. *[S.l.]: [S.n.]*, 1976. v. 30.

DAVIDOVITS, Joseph. **Geopolymer Chemistry and Applications**. *[S.l.]: [S.n.]*, 2008. v. 171, .

DAVIDOVITS, Joseph; LEGRAND, Jean-Jacques. **Process for agglomerating compressible mineral substances under the form of powder, particles or fibres**. Disponível em: <https://patents.google.com/patent/US4028454A/en>. Acesso em: 22 jun. 2026. Filed Dec. 31, 1974. Priority: French patent application FR7400938A, filed Jan. 11, 1974. Equivalent patents include FR2324427A1, GB1481479A and DE2500151C3.

DEB, Kalyan. **Multiobjective Optimization Using Evolutionary Algorithms**. Wiley, New York. *[S.l.]: [S.n.]*, 2001.

DEB, Kalyanmoy; AGRAWAL, Samir; PRATAP, Amrit; MEYARIVAN, T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. **IEEE Trans. Evol. Comput.**, v. 6, p. 182–197, 2002. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:9914171>.

DITZLER, Gregory; LABARCK, Joseph; RITCHIE, James; ROSEN, Gail; POLIKAR, Robi. Extensions to Online Feature Selection Using Bagging and Boosting. **IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems**, p. 1–6, 2017. DOI: [10.1109/TNNLS.2017.2746107](https://doi.org/10.1109/TNNLS.2017.2746107).

- EN-NAJI, S.; MABROUM, Safaa; KHATIB, Khalid; BENZAAZOUA, Mostafa; HAKKOU, Rachid. Development of Geopolymers from Phosphate By-Products for Thermal Insulation Applications. **Minerals**, 2023. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:265435576>.
- FELIPE DE AZEVEDO, Carlos; MARIA FRANCO DE CARVALHO, José; CASTRO MENDES, Júlia; SILVA SANTANA CASTRO, Arthur; RONY BARRETO, Rodrigo; ANDRÉ FIOROTTI PEIXOTO, Ricardo. Compressive strength of reduced concrete specimens considering dimensional distortion of coarse aggregates. **Construction and Building Materials**, v. 257, p. 119448, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.119448>.
- FRIEDMAN, Jerome. Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine. **The Annals of Statistics**, v. 29, , 2000. DOI: [10.1214/aos/1013203451](https://doi.org/10.1214/aos/1013203451).
- GAO, Li; XIA, Chunlin; HONG, Xuelun; WANG, Chang-an. Effect of SiO₂/Al₂O₃ Molar Ratio on Microstructure and Properties of Phosphoric Acid-based Metakaolin Geopolymers. **DEStech Transactions on Materials Science and Engineering**, 2017. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:104208909>.
- GAO, Li; ZHENG, Youxiong; TANG, Yan; YU, Jianwei; YU, Xingchang; LIU, Bingxin. Effect of phosphoric acid content on the microstructure and compressive strength of phosphoric acid-based metakaolin geopolymers. **Heliyon**, v. 6, n. 4, p. e3853, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e03853>.
- GARPELLI, Lucas; STUANI ALVES, Diogo; CAVALCA, Katia; CASTRO, Helio. Physics-guided neural networks applied in rotor unbalance problems. **Structural Health Monitoring**, v. 22, p. 4117–4130, 2023. DOI: [10.1177/14759217231163081](https://doi.org/10.1177/14759217231163081).
- GEEKSFORGEES. **Machine Learning Algorithms**. [S.l.]: GeeksforGeeks, 18 nov. 2025. Disponível em: <https://www.geeksforgeeks.org/machine-learning/machine-learning-algorithms/>. Acesso em: 12 jan. 2026.
- GUO, Haozhe; ZHANG, Baifa; DENG, Liangliang; YUAN, Peng; LI, Mengyuan; WANG, Qiang. Preparation of high-performance silico-aluminophosphate geopolymers using fly ash and metakaolin as raw materials. **Applied Clay Science**, v. 204, p. 106019, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2021.106019>.
- GUO, Pengwei; MENG, Weina; BAO, Yi. Knowledge-guided data-driven design of ultra-high-performance geopolymer (UHPG). **Cement and Concrete Composites**, v. 153, p. 105723, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2024.105723>.
- GUO, Yajiang; GAO, Danying; MA, Wei; LIU, Jun. Multi-objective mix optimization of geopolymer recycled aggregate concrete using prior knowledge embedded neural network and evolutionary algorithm. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 164, p. 113254, 2026. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2025.113254>.
- HAENLEIN, Michael; KAPLAN, Andreas M. A Brief History of Artificial Intelligence: On the Past, Present, and Future of Artificial Intelligence. **California Management Review**, v. 61, p. 14–15, 2019. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:199866730>.
- HINTON, Geoffrey; RUMELHART, David; WILLIAMS, Ronald. **Learning Representations by Back-Propagating Errors**. [S.l.]: [S.n.], 2002. p. 213–222.
- HO, Tin Kam. Random decision forests. In: **Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition**. [S.l.]: [S.n.], 1995. v. 1, p. 278–282vol.1. DOI: [10.1109/ICDAR.1995.598994](https://doi.org/10.1109/ICDAR.1995.598994).

HO, Tin Kam. The random subspace method for constructing decision forests. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, v. 20, n. 8, p. 832–844, 1998. DOI: [10.1109/34.709601](https://doi.org/10.1109/34.709601).

HOSSEINZADEH, Alireza; DEHESTANI, Mehdi. Intelligent low carbon reinforced concrete beam design optimization via deep reinforcement learning. **Scientific Reports**, v. 15, n. 1, p. 33143, 26 set. 2025. DOI: [10.1038/s41598-025-18543-4](https://doi.org/10.1038/s41598-025-18543-4).

HUSSAIN, Izhar; CHING, Kok Boon; UTTRAPHAN, Chessda; TAY, Kim Gaik; NOOR, Adil. Evaluating machine learning algorithms for energy consumption prediction in electric vehicles: A comparative study. **Scientific Reports**, v. 15, n. 1, p. 16124, 8 maio 2025. DOI: [10.1038/s41598-025-94946-7](https://doi.org/10.1038/s41598-025-94946-7).

HUYNH, An Thao; NGUYEN, Quang Dang; XUAN, Qui Lieu; MAGEE, Bryan; CHUNG, TaeChoong; TRAN, Kiet Tuan; NGUYEN, Khoa Tan. A Machine Learning-Assisted Numerical Predictor for Compressive Strength of Geopolymer Concrete Based on Experimental Data and Sensitivity Analysis. **Applied Sciences**, v. 10, n. 21, 2020. DOI: [10.3390/app10217726](https://doi.org/10.3390/app10217726).

JANIESCH, Christian; ZSCHECH, Patrick; HEINRICH, Kai. Machine learning and deep learning. **Electronic Markets**, v. 31, p. 685–695, 2021. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:233210772>.

Jl, Haodong; LYU, Yuhui; YING, Weichao; LIU, Jin-Cheng; YE, Hailong. Machine learning guided iterative mix design of geopolymer concrete. **Journal of Building Engineering**, v. 91, p. 109710, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2024.109710>.

KAZE, Cyriaque Rodrigue; LECOMTE-NANA, Gisèle Laure; KAMSEU, Elie; CAMACHO, Paula Sanz; YORKSHIRE, Antonia S.; PROVIS, John L.; DUTTINE, Mathieu; WATTIAUX, Alain; MELO, Uphie Chinje. Mechanical and physical properties of inorganic polymer cement made of iron-rich laterite and lateritic clay: A comparative study. **Cement and Concrete Research**, v. 140, p. 106320, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2020.106320>.

KONDURU, Harini; KARTHIYAINI, S. Enhancing solidification in one-part geopolymer systems through alkali-thermal activation of bauxite residue and silica fume integration. **Case Studies in Construction Materials**, v. 21, p. e3444, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2024.e03444>.

KROTOV, Dmitry; HOPFIELD, John. Dense Associative Memory Is Robust to Adversarial Inputs. **Neural Computation**, v. 30, p. 3151–3167, 2018. DOI: [10.1162/neco_a_01143](https://doi.org/10.1162/neco_a_01143).

LAMBORA, Annu; GUPTA, Kunal; CHOPRA, Kriti. Genetic Algorithm- A Literature Review. In: **2019 International Conference on Machine Learning, Big Data, Cloud and Parallel Computing (COMITCon)**. [S.l.]: [S.n.], 2019. p. 380–384. DOI: [10.1109/COMIT-Con.2019.8862255](https://doi.org/10.1109/COMIT-Con.2019.8862255).

LASSINANTTI GUALTIERI, Magdalena; ROMAGNOLI, Marcello; MISELLI, Paola; CAN- NIO, Maria; GUALTIERI, Alessandro F. Full quantitative phase analysis of hydrated lime using the Rietveld method. **Cement and Concrete Research**, v. 42, n. 9, p. 1273–1279, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2012.05.016>.

LE-PING, Liu; XUE-MIN, Cui; SHU-HENG, Qiu; JUN-LI, Yu; LIN, Zhang. Preparation of phosphoric acid-based porous geopolymers. **Applied Clay Science**, v. 50, n. 4, p. 600–603, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2010.10.004>.

LI, Yue; SHEN, Jiale; LIN, Hui; LI, Yaqiang. Optimization design for alkali-activated slag-fly ash geopolymer concrete based on artificial intelligence considering compressive strength, cost,

and carbon emission. **Journal of Building Engineering**, v. 75, p. 106929, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jobe.2023.106929>.

LIN, Xi; YANG, Zhiyuan; ZHANG, Qingfu. Pareto Set Learning for Neural Multi-objective Combinatorial Optimization. **ArXiv**, 2022. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:247778377>.

LIU, Jun; TONG, Dan; ZHENG, Yixuan; CHENG, Jing; QIN, Xinying; SHI, Qinren; YAN, Liu; LEI, Yu; ZHANG, Qiang. Carbon and air pollutant emissions from China's cement industry 1990–2015: trends, evolution of technologies, and drivers. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 21, p. 1627–1647, 2021. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:233993817>.

LOPES, Adelino; LOPES, Sergio; FERNANDES, Manuel. Time Evolution of the Modulus of Elasticity of Metakaolin-Based Geopolymer. **Applied Sciences**, v. 13, n. 4, 2023. DOI: [10.3390/app13042179](https://doi.org/10.3390/app13042179).

LOUATI, S.; BAKLOUTI, S.; SAMET, B. Acid based geopolymerization kinetics: Effect of clay particle size. **Applied Clay Science**, p. 571–578, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2016.08.007>.

LOUATI, S.; HAJJAJI, W.; BAKLOUTI, S.; SAMET, B. Structure and properties of new eco-material obtained by phosphoric acid attack of natural Tunisian clay. **Applied Clay Science**, v. 101, p. 60–67, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2014.07.015>.

MAJDOUBI, H.; MAKHLOUF, R.; HADDAJI, Y.; NADI, M.; MANSOURI, S.; SEMLLAL, N.; OUMAM, M.; MANOUN, B.; ALAMI, J.; HANNACHE, H.; TAMRAOUI, Y. Valorization of phosphogypsum waste through acid geopolymer technology: synthesis, characterization, and environmental assessment. **Construction and Building Materials**, v. 371, p. 130710, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.130710>.

MARTÍNEZ-MUÑOZ, Gonzalo; SUÁREZ, Alberto. Out-of-bag estimation of the optimal sample size in bagging. **Pattern Recognition**, v. 43, n. 1, p. 143–152, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2009.05.010>.

MENDES, Júlia Castro; MORO, Taís Kuster; FIGUEIREDO, Aline Santana; CARMO SILVA, Keoma Defáveri do; SILVA, Gabriela Cordeiro; SILVA, Guilherme Jorge Brigolini; PEIXOTO, Ricardo André Fiorotti. Mechanical, rheological and morphological analysis of cement-based composites with a new LAS-based air entraining agent. **Construction and Building Materials**, v. 145, p. 648–661, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2017.04.024>.

MOHTASHAM MOEIN, Mohammad; SARADAR, Ashkan; RAHMATI, Komeil; GHASEMZADEH MOUSAVINEJAD, Seyed Hosein; BRISTOW, James; ARAMALI, Vartenie; KARAKOUZIAN, Moses. Predictive models for concrete properties using machine learning and deep learning approaches: A review. **Journal of Building Engineering**, v. 63, p. 105444, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jobe.2022.105444>.

MORSY, M.S.; RASHAD, Alaa M.; SHOUKRY, H.; MOKHTAR, M.M. Potential use of limestone in metakaolin-based geopolymer activated with H₃PO₄ for thermal insulation. **Construction and Building Materials**, v. 229, p. 117088, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.117088>.

MURALEEDHARAN, Manjusha; NADIR, Yashida. Geopolymer mortar integrated with phase change materials for improvement of thermal efficiency in buildings: A review. **Materials Today: Proceedings**, v. 44, p. 878–885, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.791>. International Conference on Materials, Processing & Characterization.

- NAMOUNE, Abdallah; HUSSEIN, Burhan Rashid; TUFAIL, Ali; ALREHAILI, Ahmed; SYED, Toqeer Ali; BENRHOUMA, Oussama. An Ensemble Learning Based Classification Approach for the Prediction of Household Solid Waste Generation. **Sensors (Basel, Switzerland)**, v. 22, 2022. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:248594573>.
- PAIXÃO, Rafael; PENIDO, Rúben; CURY, Alexandre; MENDES, Julia. Comparison of machine learning techniques to predict the compressive strength of concrete and considerations on model generalization. **Revista IBRACON de Estruturas e Materiais**, v. 15, , 2022. DOI: 10.1590/s1983-41952022000500003.
- PATEL, Rohit; TIWARI, Shashi; RAKESH, Deepak; KAILASANATHAN, Nallakaruppan; SELAVARAJAN, Shitharth. An automated framework for traffic noise level analysis using explainable artificial intelligence techniques. **Scientific Reports**, v. 15, p. 1–22, 2025. DOI: 10.1038/s41598-025-20377-z.
- PENIDO, Rúben El-Katib; DA PAIXÃO, Rafael Christian Fonseca; COSTA, Laís Cristina Barbosa; PEIXOTO, Ricardo André Fiorotti; CURY, Alexandre Abrahão; MENDES, Júlia Castro. Predicting the compressive strength of steelmaking slag concrete with machine learning – Considerations on developing a mix design tool. **Construction and Building Materials**, v. 341, p. 127896, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.127896>.
- PROVIS, John; BERNAL, Susan. Geopolymers and Related Alkali-Activated Materials. **Annual Review of Materials Research**, v. 44, , 2014. DOI: 10.1146/annurev-matsci-070813-113515.
- PÉREZ, Fernando Lucambio. **Modelo de regressão linear Teoria e aplicações**. [S.l.]: [S.n.], 2024. Disponível em: <http://leg.ufpr.br/~lucambio/Linear/Regressao.pdf>.
- RAO, C.R.; WU, Y. Linear model selection by cross-validation. **Journal of Statistical Planning and Inference**, v. 128, n. 1, p. 231–240, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jspi.2003.10.004>.
- ROSA, Arthur. **LLMs are a Dead End**. Disponível em: https://wq6e.com/posts/2024-07-24_llms-are-a-dead-end/. Acesso em: 25 jun. 2026.
- SANTOS, Miriam Seoane; SOARES, Jastin Pompeu; ABREU, Pedro Henriques; ARAUJO, Helder; SANTOS, Joao. Cross-Validation for Imbalanced Datasets: Avoiding Overoptimistic and Overfitting Approaches [Research Frontier]. **IEEE Computational Intelligence Magazine**, v. 13, n. 4, p. 59–76, 2018. DOI: 10.1109/MCI.2018.2866730.
- SCHMITT, Lothar M. Theory of genetic algorithms. **Theoretical Computer Science**, v. 259, n. 1, p. 1–61, 2001. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0304-3975\(00\)00406-0](https://doi.org/10.1016/S0304-3975(00)00406-0).
- SOMNA, Rattapon; SAOWAPUN, Teerapon; SOMNA, Kiatsuda; CHINDAPRASIRT, Prinya. Rice Husk Ash and Fly Ash Geopolymer Hollow Block Based on NaOH Activated. **Case Studies in Construction Materials**, v. 16, p. e1092, 2022. DOI: 10.1016/j.cscm.2022.e01092.
- SOTELO-PIÑA, Carlos; AGUILERA-GONZÁLEZ, Elsa Nadia; MARTÍNEZ-LUÉVANOS, Antonia. Geopolymers: Past, present, and future of low carbon footprint eco-materials. **Handbook of ecomaterials**, v. 4, p. 2765–2785, 2019.
- SRINIVAS, N.; DEB, Kalyanmoy. Multiobjective Optimization Using Nondominated Sorting in Genetic Algorithms. **Evolutionary Computation**, v. 2, n. 3, p. 221–248, 1994. DOI: 10.1162/evco.1994.2.3.221.
- STANDARDS, United States. National Bureau of. **Journal of Research of the National Bureau of Standards**. [S.l.]: The Bureau, 1946. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=hPa3AAAAIAAJ>.

STONE, M. Cross-Validatory Choice and Assessment of Statistical Predictions. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)**, v. 36, n. 2, p. 111–133, 1974. DOI: [10.1111/j.2517-6161.1974.tb00994.x](https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1974.tb00994.x).

SUN, Zhigang; WANG, Guotao; LI, Pengfei; WANG, Hui; ZHANG, Min; LIANG, Xiaowen. An improved random forest based on the classification accuracy and correlation measurement of decision trees. **Expert Systems with Applications**, v. 237, p. 121549, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2023.121549>.

TANG, Jiabo; JI, Xiang; LIU, Xinghong; ZHOU, Wei; CHANG, Xiaolin; ZHANG, Sifan. Mechanical and microstructural properties of phosphate-based geopolymers with varying Si/Al molar ratios based on the sol-gel method. **Materials Letters**, v. 308, p. 131178, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.131178>.

TCHAKOUTÉ, Hervé Kouamo; RÜSCHER, Claus Henning. Mechanical and microstructural properties of metakaolin-based geopolymer cements from sodium waterglass and phosphoric acid solution as hardeners: A comparative study. **Applied Clay Science**, v. 140, p. 81–87, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2017.02.002>.

TORRES-CARRASCO, F., M AND Puertas. La activaci n alcalina de diferentes aluminosilicatos como una alternativa al Cemento Portland: cementos activados alcalinamente o geopol meros. **Revista ingenier a de construcci n**, v. 32, p. 5–12, 2017. Dispon vel em: http://www.scielo.cl/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0718-50732017000200001&nrm=iso.

VERMA, Shanu; PANT, Millie; SN  SEL, V clav. A Comprehensive Review on NSGA-II for Multi-Objective Combinatorial Optimization Problems. **IEEE Access**, v. 9, p. 57757–57791, 2021. Dispon vel em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:233331809>.

WAHBA, Mohamed; ESSAM, Radwa; EL-RAWY, Mustafa; AL-ARIFI, Nassir; ABDALLA, Fathy; ELSADEK, Wael. Forecasting of Flash Flood Susceptibility Mapping Using Random Forest Regression Model and Geographic Information Systems. **Heliyon**, v. 10, p. e33982, 2024. DOI: [10.1016/j.heliyon.2024.e33982](https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e33982).

WANG, Shengjie; ZHOU, Tianyi; BILMES, Jeff. Bias Also Matters: Bias Attribution for Deep Neural Network Explanation. In: **Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning**. [S.l.]: PMLR, 2019. v. 97, p. 6659–6667. Dispon vel em: <https://proceedings.mlr.press/v97/wang19p.html>.

WANG, Yan-Shuai; PROVIS, John L.; DAI, Jian-Guo. Role of soluble aluminum species in the activating solution for synthesis of silico-aluminophosphate geopolymers. **Cement and Concrete Composites**, v. 93, p. 186–195, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2018.07.011>.

YUSOFF, Y. ; ZAIN, AM; HARON, H. Experimental study of genetic algorithm optimization on WC/Co material machining. **Journal of Advanced Research in Materials Science**, v. 21, p. 14–26, 2016.

ZHANG, Peng; WANG, Kexun; WANG, Juan; GUO, Jinjun; HU, Shaowei; LING, Yifeng. Mechanical properties and prediction of fracture parameters of geopolymer/alkali-activated mortar modified with PVA fiber and nano-SiO₂. **Ceramics International**, v. 46, n. 12, p. 20027–20037, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.05.074>.

ZHANG, Z.H.; ZHU, H.J.; ZHOU, C.H.; WANG, H. Geopolymer from kaolin in China: An overview. **Applied Clay Science**, v. 119, p. 31–41, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2015.04.023>. Chinese Applied Clay Research — Workshop on Green Chemical Technology for Clay Minerals-derived Functional Materials and Catalysts, October 22-23, 2014, Hangzhou

Guest Editor: Chun-Hui ZHOU Email: clay@zjut.edu.cn, Research Group for Advanced Materials & Sustainable Catalysis (AMSC), College of Chemical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China.

GLOSSÁRIO

Overfitting – Sobreajuste. Fenômeno em que um modelo de aprendizado de máquina se ajusta excessivamente aos dados de treinamento, capturando não apenas os padrões relevantes, mas também ruídos e particularidades específicas da base utilizada. Como consequência, o modelo pode apresentar métricas elevadas durante o treinamento, mas baixa capacidade de generalização quando aplicado a dados não vistos. Em problemas com bases reduzidas, como ocorre frequentemente em estudos com materiais geopoliméricos, o sobreajuste deve ser avaliado com atenção por meio de estratégias como validação cruzada, análise em dados de teste e comparação entre diferentes métricas de desempenho (Carvalho *et al.*, 2025).

COMPUTAÇÃO

aprendizado de máquina. Em inglês, *machine learning*. Área da [artificial intelligence](#) que desenvolve algoritmos capazes de aprender padrões a partir de dados sem programação explícita, melhorando seu desempenho através da experiência (GeeksforGeeks, 2025).

MLP – rede neural multicamadas. Rede neural artificial do tipo *feedforward*, estruturada em uma camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas e uma camada de saída. Nesse modelo, os neurônios de uma camada recebem os resultados da camada anterior, calculam combinações ponderadas com termos de viés e aplicam funções de ativação, permitindo a representação de relações não lineares entre as variáveis de entrada e a variável prevista (Li *et al.*, 2023).

NSGA-II – non-dominated sorting genetic algorithm II. Algoritmo genético evolutivo voltado à otimização multiobjetivo, empregado para encontrar conjuntos de soluções que representam compromissos entre objetivos conflitantes. O NSGA-II trabalha com uma população de soluções candidatas, que evolui ao longo das gerações por meio de operadores genéticos, como seleção, cruzamento e mutação. Sua seleção é baseada na ordenação não dominada, que organiza as soluções em frentes de Pareto, e na *crowding distance*, utilizada para preservar a diversidade das soluções ao longo da fronteira. Além disso, o algoritmo emprega uma estratégia elitista, preservando as melhores soluções entre gerações (Deb *et al.*, 2002).

RF – random forest. Método de aprendizado de máquina do tipo *ensemble*, baseado na combinação de múltiplas árvores de decisão. Cada árvore é treinada com subconjuntos aleatórios dos dados e das variáveis de entrada, e a predição final é obtida pela combinação das respostas individuais, geralmente por média em problemas de regressão (Carvalho *et al.*, 2025; Li *et al.*, 2023).

XGBoost – extreme gradient boosting. Algoritmo de aprendizado de máquina do tipo *ensemble* baseado em *gradient boosting*. Diferentemente de métodos nos quais as árvores são construídas de forma independente, o XGBoost constrói árvores de decisão sequencialmente, de modo que cada novo modelo busca corrigir os erros residuais dos modelos anteriores. Além disso, emprega recursos como regularização e otimizações computacionais, contribuindo para maior desempenho preditivo e controle de *overfitting* (Carvalho *et al.*, 2025).