ENARC
FOZ DO IGUAÇU-2023

MODELAGEM DA CARBONATAÇÃO ACELERADA DE CONCRETOS COM CINZA DE CASCA DE ARROZ VIA APRENDIZADO DE MÁQUINA

Modeling the accelerated carbonation of concretes with rice-husk ash by machine learning

Emerson Felipe Félix
Universidade Estadual Paulista | Guaratinguetá, São Paulo | emerson.felix@unesp.br

Paulo Guilherme Cornélio
Universidade Estadual Paulista | Guaratinguetá, São Paulo | paulupgc@gmail.com

Carlos Manoel Andrade Sousa
Universidade Estadual Paulista | Guaratinguetá, São Paulo | carlos.manuel@unesp.br

Lisiane Pereira Prado
Universidade Estadual Paulista | Guaratinguetá, São Paulo | lisiane.pereira@unesp.br

Edna Possan
Universidade Federal da Integração Latino-Americana | Foz do Iguaçu, Paraná | epossan@gmail.com

Resumo

A crescente preocupação com as mudanças climáticas impulsiona a busca por alternativas sustentáveis na construção civil. A substituição parcial do cimento por cinza da casca de arroz (CCA) é uma estratégia que vem se mostrando eficiente. No entanto, a carbonatação do concreto, que afeta sua durabilidade, deve ser compreendida. Nesse contexto, as técnicas de aprendizado de máquina, como as Florestas aleatórias, surgem como ferramentas eficientes para modelar a carbonatação, considerando múltiplas variáveis. Deste modo, este estudo investiga o uso de Florestas aleatórias para prever a frente de carbonatação de concretos com CCA, visando proporcionamentos de baixo impacto ambiental. Os resultados obtidos apontam a viabilidade do modelo proposto, com nível de acurácia de 97,5%. Ademais, o modelo apresentou erro máximo de 3,91 mm, raiz do erro médio quadrático de 0,72 mm e erro percentual médio de 4,38%, aferindo boa capacidade de generalização na predição da profundidade de carbonatação.

Palavras-chave: Concreto com cinza de casca de arroz; carbonatação; aprendizado de máquina; Floresta aleatória.

ABSTRACT

The growing concern about climate change is driving the search for sustainable alternatives in the construction industry. The partial replacement of cement with rice husk ash (RHA) is a strategy that has been proven to be efficient. However, the carbonation of concrete, which affects its durability, must be understood. In this context, machine learning techniques, such as random forest, emerge as efficient tools to model carbonation, considering multiple variables. Thus, this study investigates the use of Random Forests to predict the carbonation front of RHA concrete, aiming for low environmental impact mixes. The results obtained indicate the viability of the proposed model, with an accuracy level of 97.5%. Furthermore, the model showed a maximum prediction error of 3.91 mm, root mean square error of 0.72 mm, and mean percentage error of 4.38%, demonstrating good generalization ability in predicting carbonation depth.

Keywords: Concrete with rice-husk ash; Carbonation; machine learning; random forest.

1 INTRODUÇÃO

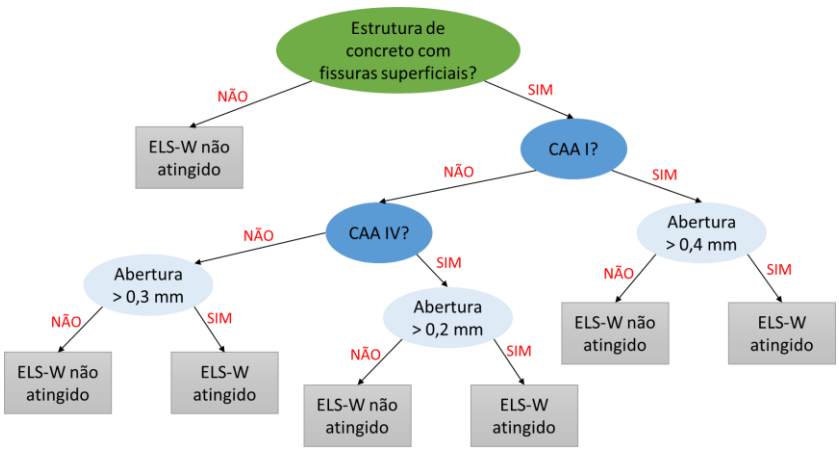
A crescente preocupação com as mudanças climáticas e busca da redução das emissões de dióxido de carbono (CO_2) têm impulsionado a investigação por soluções inovadoras na construção civil. Uma das estratégias promissoras para mitigar o impacto ambiental da construção civil remete à substituição parcial do cimento Portland, que é uma das principais fontes de emissão de CO_2 na produção de concreto, por materiais alternativos e sustentáveis. Assim, a cinza da casca de arroz (CCA) tornou-se material de interesse devido sua abundância, baixo custo e potencial de melhora nas propriedades do concreto (FARID; ZAHEER, 2023).

Em contrapartida, o uso de materiais alternativos substituindo parte do cimento, requer estudos quando à durabilidade deste novo material. A carbonatação do concreto é um processo natural no qual o dióxido de carbono presente na atmosfera reage com os componentes alcalinos do concreto, formando carbonato de cálcio ($CaCO_3$) e reduzindo a alcalinidade da matriz cimentícia (MEHTA; MONTEIRO, 2014). A carbonatação pode afetar significativamente a durabilidade do concreto, tornando-o mais suscetível à corrosão das armaduras e, portanto, comprometendo sua vida útil (PU *et al.*, 2023). Portanto, compreender e modelar a taxa de carbonatação do concreto é fundamental para garantir a durabilidade das estruturas construídas com materiais alternativos, a exemplo da CCA.

Neste contexto, técnicas de aprendizado de máquina surgem como poderosas ferramentas de modelagem capazes de abordar complexidades inerentes aos processos do fenômeno da carbonatação, considerando a influência de múltiplas variáveis, muitas vezes interdependentes. São diversas as técnicas de aprendizado de máquina: árvore de decisão (Figura 1), florestas aleatórias, redes neurais artificiais, máquinas de vetor de suporte, algoritmos de agrupamento e regressão linear.

As florestas aleatórias são definidas pela composição de várias árvores de decisão. As árvores de decisão são modelos de aprendizado de máquina que utilizam uma estrutura de árvore para tomar decisões com base em condições lógicas. Elas são amplamente utilizadas em problemas de classificação e regressão (BREIMAN, *et al.*, 1984). Uma árvore de decisão é composta por nós (ou vértices) e arestas. O nó raiz representa a variável de entrada inicial, e cada nó interno representa uma decisão baseada em uma condição específica. As arestas conectam os nós e representam o fluxo de decisão. Os nós “folha” representam as saídas ou as decisões finais (HASTIE *et al.*, 2009). Na Figura 1 é apresentado um exemplo ilustrativo de uma árvore de decisão para avaliação do estado limite de serviço abertura de fissuras (ELS-W) de uma estrutura de concreto armado.

Figura 1: Modelo de uma árvore de decisão para avaliação do ELS-W em estruturas de concreto armado.



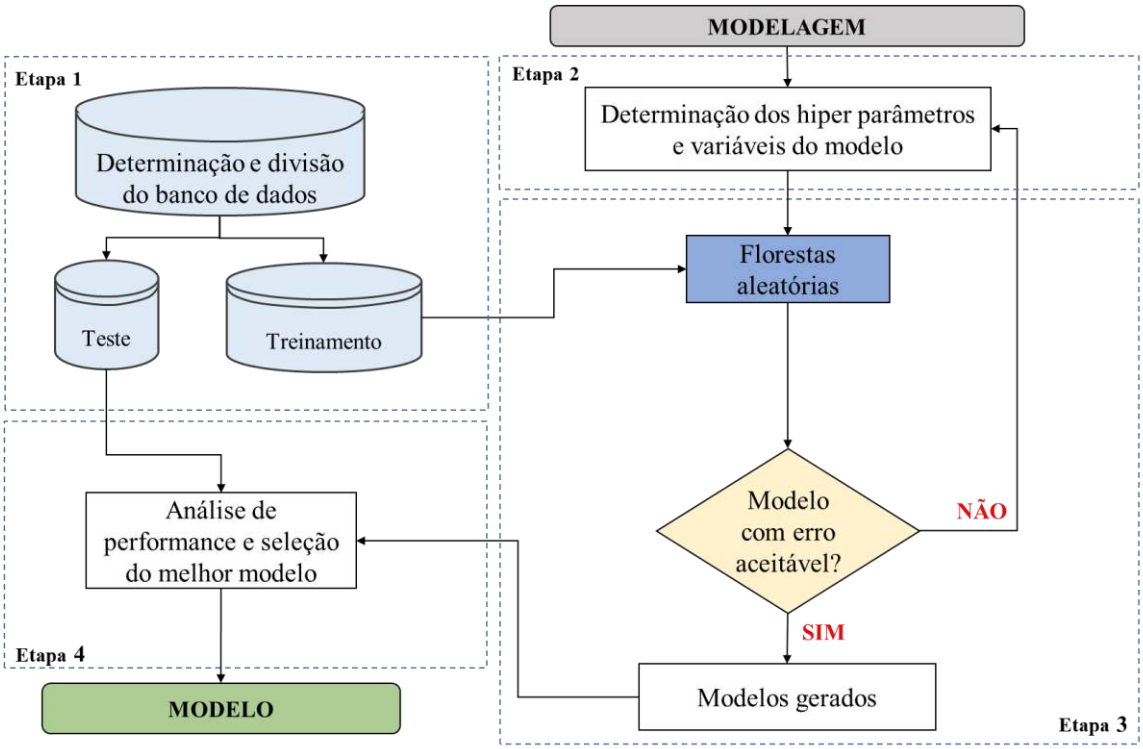
Fonte: Própria autoria.

Trabalhos recentes apontam a potencialidade no uso de técnicas de aprendizado de máquina para avaliar propriedades intrínsecas ao concreto com CCA (AMIN *et al.*, 2023a; AMIN *et al.*, 2023b; LI; SONG, 2023; HUANG *et al.*, 2023). Deste modo, este trabalho visa avaliar o potencial de aplicação de florestas aleatórias para mapear as relações não lineares entre os parâmetros envolvidos na carbonatação do concreto, para prever o comportamento do compósito em condições de substituição parcial do cimento pela CCA. Ademais, para fomentar o uso do modelo na formulação de proporcionamentos ótimos de concretos com CCA, o modelo foi concebido com parâmetros de entrada de fácil obtenção, considerando apenas informações da composição do concreto e de sua exposição.

2 MODELAGEM DA CARBONATAÇÃO

Com o objetivo de criar um modelo para a carbonatação de concretos que utilizam a substituição parcial do cimento Portland por CCA, foram conduzidas as atividades e processos ilustrados na Figura 2. Em termos simplificados, na primeira fase, procedeu-se à coleta e compilação de um conjunto de dados, utilizando resultados experimentais previamente disponíveis na literatura. Na segunda etapa, foram conduzidas análises dos dados para investigar possíveis correlações entre os diferentes atributos do conjunto de informações. A terceira fase envolveu o desenvolvimento de modelos com a utilização de florestas aleatórias, e, por fim, na quarta etapa, avaliou-se o desempenho desses modelos.

Figura 2: Fluxo de processos conduzidos no presente estudo.



Fonte: Própria autoria.

A montagem do banco de dados foi realizada através da busca na literatura de resultados experimentais de carbonatação acelerada em concretos que empregam cimentos produzidos no Brasil (HOPPE, 2008; MARTINELLI JUNIOR; 2010; NUNES, 2014; RIGON, 2015; SANTOS, 2017). A busca compreendeu apenas concretos produzidos com cimentos nacionais, para que fosse possível inserir no modelo a influência da composição de tais cimentos, e pelo fato deste ser um primeiro estudo do grupo onde almeja-se gerar modelos para a carbonatação de estruturas de concretos de baixo carbono situadas em ambiente brasileiro. Ao todo, 480 dados foram coletados, tratados e processados. A análise, processamento e tratamento dos dados foram desenvolvidos conforme metodologia descrita em Felix *et. al.* 2021a e Felix, *et al.* 2021b. A regressão com as florestas aleatórias foi conduzida considerando os seguintes processos:

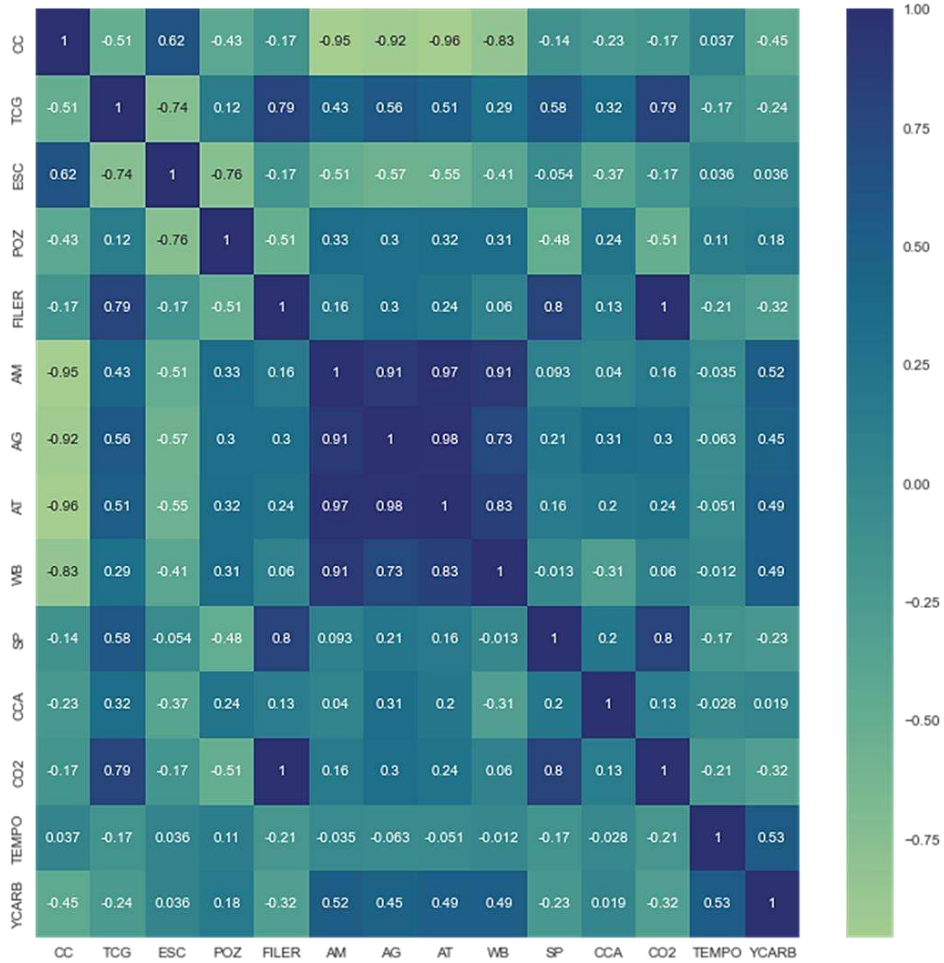
a) Divisão dos dados, empregando conjuntos de treinamento (80%) e teste (20%);
b) Modelagem com florestas aleatórias, considerando o número de árvores variando entre 10 e 100;
c) Treinamento das florestas, fazendo a busca pela configuração das árvores da floresta. A determinação das árvores considerou a minimização do erro médio quadrático (MSE) e a determinação das árvores foi feita maximizando o ganho de informação por entropia;
d) Avaliação de performance dos modelos, para garantir uma avaliação imparcial do modelo, a validação cruzada foi aplicada durante o treinamento, sendo também, empregado um conjunto de teste para avaliar a performance e capacidade de generalização do modelo.

Para o ajuste e otimização do desempenho dos modelos, ajustou-se os hiperparâmetros do algoritmo para melhorar o seu desempenho, sendo que neste trabalho foram utilizadas árvores com profundidades máximas variando entre 5 e 10 camadas.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente realizou-se o levantamento, tratamento e análise dos dados, sendo possível avaliar a dispersão dos dados em relação à profundidade de carbonatação *YCARB* (em mm), considerando a influência do consumo de cimento em kg/m³ (*CC*), consumo de CCA em kg/m³ (*CCA*), relações entre o consumo de agregados graúdo e miúdo com o consumo de cimento (AG e AM), relação água-aglomerante (WB), tempo de ensaio acelerado em dias (TEMPO), relação entre quantidade total de agregados e o consumo de cimento (AT), a relação superplastificante-cimento em % (SP), o teor de CO_2 em % do ensaio (CO2), e o tipo de cimento, que teve sua caracterização definida pelo conteúdo dos componentes do cimento (TCG-clinquer mais gipsita, ESC-escória, POZ-pozolana e FILER-fíler calcário), de acordo com Battagin (2011). Comenta-se que o banco de dados foi configurado com amostras de concretos com cimentos CP II-F, CP IV e CP V. A Figura 3 apresenta o mapa de cores da matriz de correlação cruzada dos atributos (correlação de Pearson), enquanto na Figura 4 são apresentados a distribuição, mapas de concentração e dispersão dos dados, dos atributos com os maiores índices de correlação.

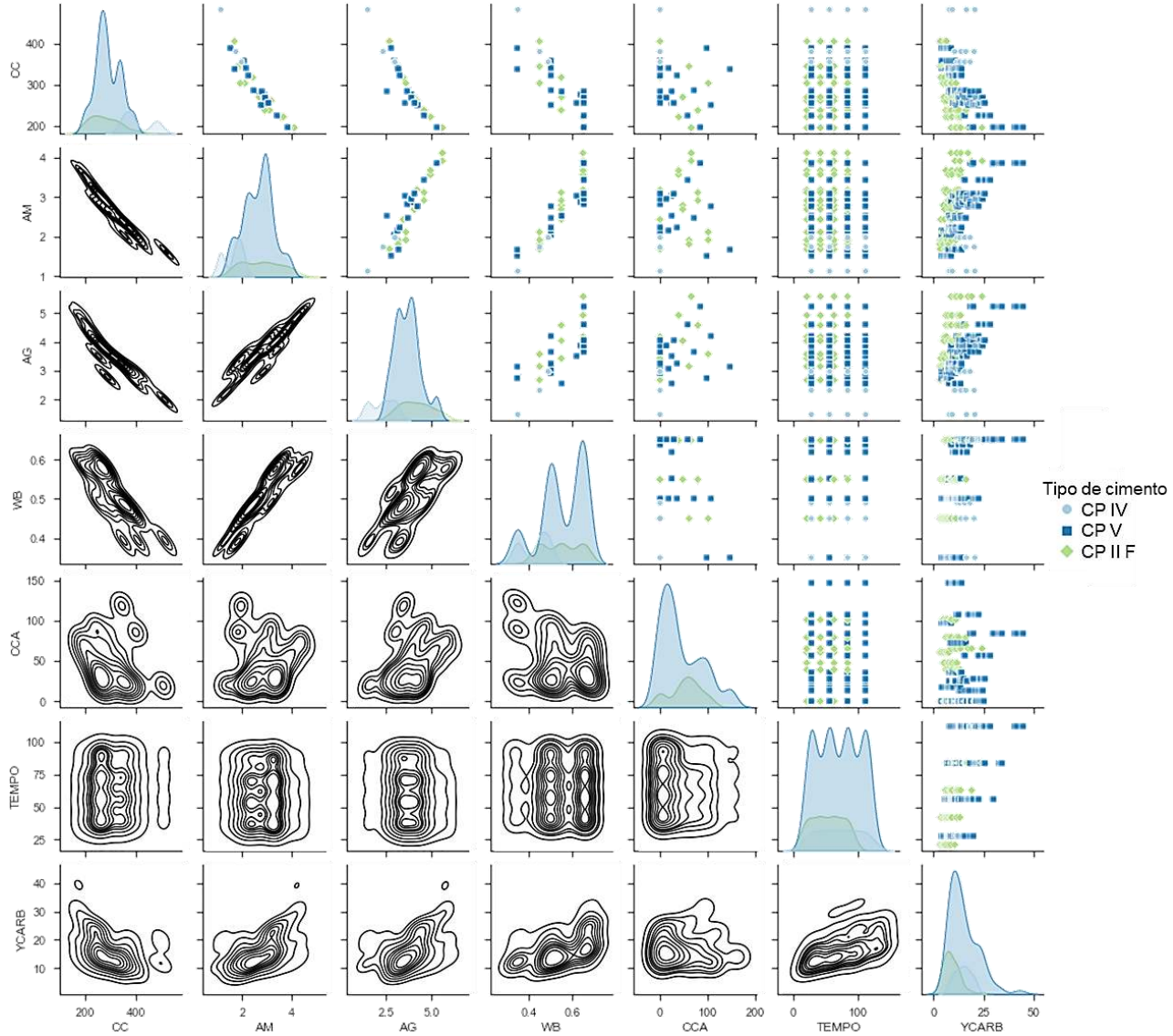
Figura 3: Matriz de correlação cruzada dos atributos do banco de dados.



Fonte: Própria autoria.

Da Figuras 3 e 4, e considerando o banco de dados definido, foi possível inferir que: (i) maior consumo de cimento geralmente está associado a menor profundidade de carbonatação, devido à neutralização do CO_2; (ii) o teor de CCA e a carbonatação não possuem correlação linear, mas ao avaliar a dispersão, observou-se que a substituição parcial do cimento por este material, pode potencializar a carbonatação quando da utilização de substituições acima de 20%, e reduzir quando da utilização de teores abaixo de 15%, algo semelhante ao observado em Isaia *et al.* (2017), onde os autores aferiram que substituições de até 15% não geram frentes de carbonatação superiores que concretos sem substituição; (iii) relações maiores de AM e AG tendem a substanciar a ação da carbonatação em concretos com CCA; (iv) menores relações água-aglomerante indicam uma redução na profundidade de carbonatação; (v) o uso de superplastificante pode gerar concretos com maior resistência à carbonatação; (vi) concretos produzidos com CCA apresentam maiores profundidades de carbonatação ao utilizar cimentos do tipo CP II F, CP IV e CP V, nesta ordem.

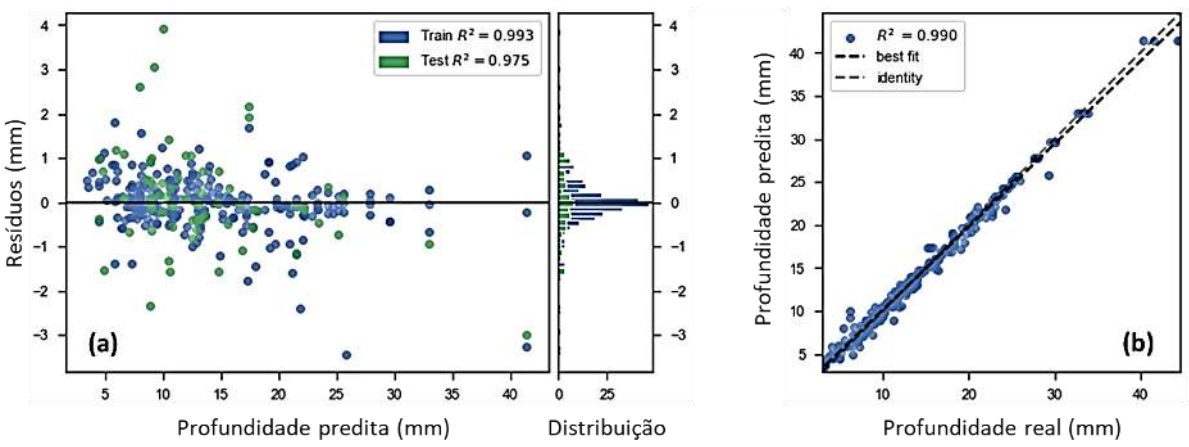
Figura 4: Histogramas, mapas de contorno da concentração e gráficos de dispersão dos dados.



Fonte: Própria autoria.

Após a avaliação da distribuição dos dados, realizou-se o treinamento com as florestas aleatórias. Ao todo, foram treinadas 90 florestas, às quais diferenciam-se pelo número de árvores, variando entre 10 e 100. Após a modelagem, realizou-se a avaliação do desempenho de cada modelo para determinar a melhor combinação de árvores. O modelo com melhor desempenho foi a floresta com 87 árvores, cuja performance é apresentada na Figura 5.

Figura 5: Performance do modelo: (a) distribuição dos resíduos e (b) dispersão entre valores reais e preditos.

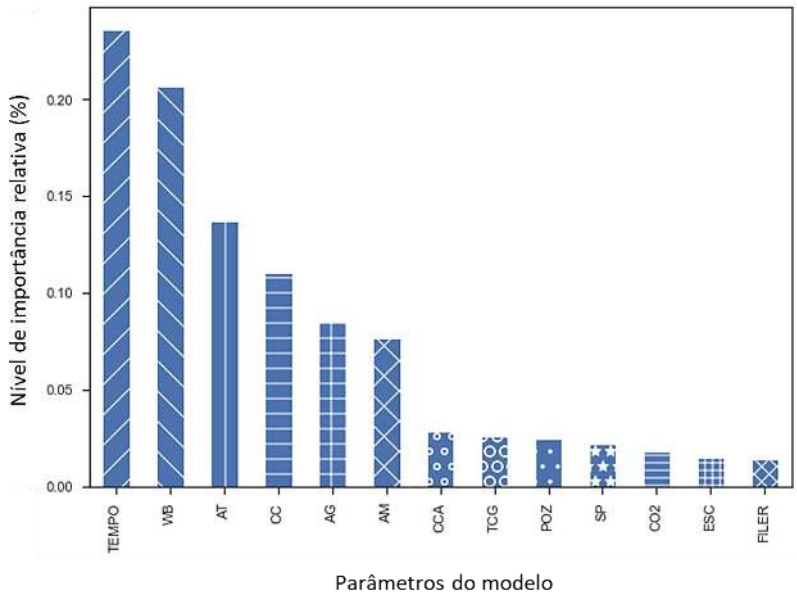


Fonte: Própria autoria.

A Figura 5 apresenta os gráficos de distribuição dos resíduos (erros) durante a fase de modelagem (treinamento) e teste (performance), além da dispersão dos valores preditos em relação aos valores reais, incluindo o coeficiente de determinação (R^2). Da Figura 5, infere-se que os resíduos gerados no conjunto de teste são inferiores aos obtido no treinamento. Quanto às métricas de erros, o modelo proporcionou erro máximo na predição de 3,91 mm, raiz do erro médio quadrático de 0,72 mm, e erro percentual médio de 4,38%. Além disso, o modelo exibe uma distribuição de resíduos concentrada em torno de zero, com R^2 de 99% no treinamento e 97% na fase de teste e validação, indicando alta capacidade de generalização dos resultados.

Por fim, com o objetivo de avaliar a importância de cada parâmetro na previsão da carbonatação de concretos com CCA, realizou-se uma análise de importância cujos resultados são indicados na Figura 6. Os dados revelam que o tempo, a relação água-aglomerante, os teores de agregados graúdos e miúdos, juntamente com o consumo de cimento, contribuem com um total de 85,22% para a capacidade das florestas de aprendizado em mapear o fenômeno da carbonatação. Além disso, os resultados indicam que o consumo de CCA e os componentes dos cimentos (CP II-F, CP IV e CP V) têm uma relevância de 15% na previsão do modelo, enfatizando a necessidade de incorporar esses atributos na modelagem do fenômeno.

Figura 6: Nível de importância dos parâmetros de entrada do modelo na predição do módulo de elasticidade.



Fonte: Própria autoria.

4 CONCLUSÕES

Considerando os resultados obtidos da aplicação florestas aleatórias para mapear a frente de carbonatação de concretos com substituição parcial de cimento por CCA e da análise do banco de dados definido com resultados de campanhas experimentais da literatura, as seguintes considerações foram estabelecidas:

- Maior consumo de cimento está relacionado a uma menor profundidade de carbonatação, devido à neutralização do CO_2;
- A relação entre o teor de CCA e a carbonatação não é linear, mas substituições de cimento por CCA acima de 20% podem aumentar a carbonatação, enquanto teores abaixo de 15% tendem a reduzi-la;
- Relações água-aglomerante maiores aumentam a ação da carbonatação em concretos com CCA, enquanto relações menores indicam uma redução na profundidade de carbonatação;
- O uso de superplastificante pode resultar em concretos com maior resistência à carbonatação;
- Concretos produzidos com CCA tendem a ter maiores profundidades de carbonatação ao utilizar cimentos do tipo CP II F, CP IV e CP V, nessa ordem.

Além disso, o modelo apresentou excelentes métricas de desempenho, incluindo um erro máximo na previsão de 3,91 mm, raiz do erro médio quadrático de 0,72 mm e erro percentual médio de 4,38%. Os resíduos do modelo são concentrados em torno de zero, e os coeficientes de determinação (R^2) são de 99% no treinamento e 97% na fase de teste e validação, indicando uma alta capacidade de generalização dos resultados.

A análise de importância aponta que parâmetros como tempo, relação água-aglomerante, teores de agregados graúdos e miúdos, juntamente com o consumo de cimento, contribuem significativamente com 85,22% para a capacidade do modelo em mapear a carbonatação. Já o consumo de CCA e os componentes dos cimentos CP II-F, CP IV e CP V, também desempenham um papel importante, enfatizando a necessidade de incluí-los na modelagem do fenômeno.

5 AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o auxílio concedido pelo Programa de Incentivo e Estímulo à Pesquisa do edital 06/2023 PROPe da UNESP e fomento associado ao projeto de pesquisa regular com processo nº 2023/04364-9, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

REFERÊNCIAS

AMIN, M. N.; IFTIKHAR, B.; KHAN, K.; JAVED, M. F.; ABUARAB, A. M.; REHMAN, M. F. Prediction model for rice husk ash concrete using AI approach: Boosting and bagging algorithms. **Structures. Elsevier**, 2023. p. 745-757.

AMIN, M. N.; AHMAD, W.; KHAN, K.; DEIFALLA, A. F. Optimizing compressive strength prediction models for rice husk ash concrete with evolutionary machine intelligence techniques. **Case Studies in Construction Materials**, v. 18, p. e02102, 2023.

BATTAGIN, A. F. **Cimento Portland**. In: ISAIA, G. C. Concreto: Ciência e Tecnologia. São Paulo: Instituto Brasileiro do Concreto, 2011. cap. 6, p. 1-48.

BREIMAN, L.; FRIEDMAN, J.; STONE, C. J.; OLSHEN, R.A. **Classification and regression trees**. CRC Press, 1984.

FARID, S. A.; ZAHEER, M. M. Production of new generation and sustainable concrete using Rice Husk Ash (RHA): A review. **Materials Today: Proceedings**, 2023.

FELIX, E. F.; POSSAN, E.; CARRAZEDO, R. A new formulation to estimate the elastic modulus of recycled concrete based on regression and ANN. **Sustainability**, v. 13, n. 15, p. 8561, 2021.

FELIX, E. F.; POSSAN, E.; CARRAZEDO, R. **Artificial Intelligence Applied in the Concrete Durability Study**. Hygrothermal Behaviour and Building Pathologies, p. 99-121, 2021.

HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. H. **The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction**. New York: Springer, 2009.

HOPPE, A. E. **Carbonatação em concreto com cinza de casca de arroz sem moagem**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2008.

HUANG, Y.; LEI, Y.; LUO, X.; FU, C. Prediction of compressive strength of rice husk ash concrete: a comparison of different metaheuristic algorithms for optimizing support vector regression. **Case Studies in Construction Materials**, p. e02201, 2023.

ISAIA, G. C.; ZERBINO, R. L.; GASTALDINI, A. L. G.; SENSALE, G. R. Viabilidade do emprego de cinza de casca de arroz natural em concreto estrutural (parte II): durabilidade. **Ambiente Construído**, v. 17, p. 233-252, 2017.

LI, Q.; SONG, Z. Prediction of compressive strength of rice husk ash concrete based on stacking ensemble learning model. **Journal of Cleaner Production**, v. 382, p. 135279, 2023.

MARTINELLI JUNIOR, L. A. **Carbonatação natural de protótipos de concreto com cinza de casca de arroz sem moagem**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2010.

MEHTA, P. K.; MONTEIRO, P. J. M. **Concreto: Estrutura, Propriedades e Materiais**. São Paulo, 4a edição. Ed. Ibracon, 2014.

NUNES, D. G. **Carbonatação acelerada em concretos compostos com cinza de casca de arroz de diferentes teores de carbono grafítico**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2014.

PU, Y.; LANG, L.; XIAOSHUANG, S.; QINGYUAN, W.; ABDELFATAH, A. Recent advances in accelerated carbonation for improving cement-based materials and CO_2 mitigation from a life cycle perspective. **Construction and Building Materials**, v. 388, p. 131695, 2023.

RIGON, M. R. **Avaliação ambiental do uso da casca de arroz como biomassa para fins energéticos e do coproduto cinza aplicado ao concreto**. Dissertação (Mestrado) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2015.

SANTOS, C. C. **Concretos com misturas de agregado residual de construção e demolição (RCD) e pozolana, com ênfase na carbonatação**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2017.