COMPARAÇÃO DOS DESEMPENHOS DE MODELOS DE *MACHINE LEARNING* NA PREVISÃO DA RESISTÊNCIA À COMPRESSÃO DO CIMENTO AOS 28 DIAS

Paulo Hiroshi Kato Filho
Votorantim Cimentos | Curitiba, Paraná | paulo.kato.pk1@vcimentos.com

Resumo

Este estudo avalia o desempenho de modelos de aprendizado de máquina na previsão da resistência à compressão aos 28 dias de cimentos Portland CP II-F 40 e CP II-F 32. Foram analisadas duas bases de dados: uma com parâmetros físicos e químicos obtidos via fluorescência de raios-X (FRX) e outra incluindo parâmetros mineralógicos determinados via difração de raios-X (DRX). Os modelos testados incluíram Random Forest, Extra Trees, Gradient Boosting, XGBoost, K-Nearest Neighbors e Redes Neurais Artificiais. As métricas utilizadas para avaliação foram R^2, RMSE e MAPE. Os resultados indicam que o uso dos dados obtidos por difratometria de raios-X proporcionou maior precisão, com o XGBoost apresentando o melhor desempenho. No entanto, o uso de dados de fluorescência de raios-X se mostra uma boa alternativa, por ser um equipamento mais comum nas fábricas de cimento. A implementação desses modelos pode otimizar o controle de qualidade do cimento, permitindo ajustes na produção e garantindo um produto de melhor qualidade.

Palavras-chave: Aprendizado de máquina; Resistência à compressão aos 28 dias; Inteligência artificial; Difração de raios-X; Fluorescência de raios-X.

ABSTRACT

This study evaluates the performance of machine learning models in predicting the 28-day compressive strength of Portland cements CP II-F 40 and CP II-F 32. Two datasets were analyzed: one containing physical and chemical parameters obtained via X-ray fluorescence (FRX) and another containing mineralogical data obtained via X-ray diffraction (DRX). The tested models included Random Forest, Extra Trees, Gradient Boosting, XGBoost, K-Nearest Neighbors, and Artificial Neural Networks. The evaluation metrics used were R^2, RMSE, and MAPE. The results indicate that the use of mineralogical data (DRX-based dataset) provided higher accuracy, with XGBoost achieving the best performance. However, the FRX-based dataset is a good alternative, as X-Ray fluorescence is a more common equipment in cement factories. Implementing these models helps optimize cement quality control, enabling adjustments in the production process and ensuring a higher-quality product.

Keywords: Machine learning; Compressive strength at 28 days; Artificial intelligence; X-ray diffraction; X-ray fluorescence.

1. INTRODUÇÃO

A qualidade e o desempenho do cimento são definidos por diversos parâmetros químicos e físicos. Dentre esses, a resistência à compressão é frequentemente considerada o parâmetro mais importante para caracterizar produtos à base de cimento, sendo normalmente medida nas idades iniciais (1 e 3 dias) ou tardias (28 e 90 dias). Os silicatos de cálcio presentes no cimento Portland, como a alita, belita, e os aluminatos, desempenham um papel fundamental na resistência à compressão do material ao longo do tempo. A alita, por exemplo, é responsável pelo desenvolvimento da resistência inicial, enquanto a belita contribui para ganhos de resistência em idades mais avançadas. A presença de álcalis e sulfatos pode influenciar significativamente a formação e a reatividade desses compostos, afetando diretamente a evolução da resistência mecânica. A finura do cimento também é um fator importante, já que influencia a taxa de hidratação (HEWLETT, 2019).

A inteligência artificial (IA) vem, recentemente, ganhando importância devido à sua capacidade de processar um grande volume de dados, resolver problemas complexos não-lineares, reconhecer padrões e prever um resultado futuro com erros aceitáveis, tudo isso a partir de dados históricos. Uma área bem relevante da IA é o aprendizado de máquina (*machine learning*), e diversos algoritmos já foram desenvolvidos com a finalidade de prever resultados a partir de uma base histórica (RUSSEL & NORVIG, 2010). Algumas das aplicações dos modelos de aprendizado de máquina são a previsão das características físicas do cimento, como tempo de pega (GUO *et al*., 2020), e parâmetros de processo, como o teor de CaO livre do clínquer (LIU *et al*., 2019). A

necessidade de aguardar até 28 dias para obter resultados definitivos impacta diretamente o controle de qualidade, dificultando ajustes rápidos no processo produtivo e aumentando o risco de fabricação de lotes fora do contrato. Nesse contexto, a implementação de modelos de IA surge como uma solução promissora para antecipar a resistência à compressão, permitindo tomadas de decisão mais ágeis e precisas.

2. METODOLOGIA

Este estudo avalia a performance dos modelos *machine learning* para prever a resistência à compressão aos 28 dias (R28) de cimentos Portland CP II-F 40 e CP II-F 32 considerando duas bases de dados: uma com parâmetros físicos e químicos obtidos via fluorescência de raios-X (base 1) e outra com parâmetros físicos e mineralógicos obtidos via difração de raios-X (base 2), ambos considerando como variável independente a resistência à compressão real aos 28 dias. A metodologia utilizada foi inspirada no processo KDD - knowledge discovery in databases (FAYYAD *et al.*, 1996). Os parâmetros utilizados estão apresentados no Quadro 1:

Quadro 1: Parâmetros utilizados para desenvolvimento dos modelos

Parâmetros	Base 1	Base 2
Físicos	#200, #325, Finura Blaine, Consistência, Início e Fim de Pega, Perda ao Fogo, Resíduo Insolúvel	
Químicos via fluorescência (FRX)	Al_2O_4, CaO, Fe_2O_3, K_2O, Na_2O, MgO, SiO_2 e SO_3	-
Mineralógicos via difração (DRX)	-	Alita total, Belita (beta e gama), Aluminato (cúbico, ortorrômbico), Ferrita, Cao Livre, Portlandita, Periclásio, Arcanita, Aftitalita, Gipsita, Bassanita, Anidrita, Calcita, Dolomita, Quartzo, Gesso, Calcário e Clínquer
Variáveis categóricas	Tipo de cimento (CP II-F 40, CP II-F 32)	
Váriável de referência	Resistência à compressão real aos 28 dias	

Fonte: O Autor

2.1 COLETA E PROCESSAMENTO DOS DADOS

As informações utilizadas no desenvolvimento do modelo são os resultados de qualidade de dois tipos de cimentos, da mesma fábrica da Votorantim Cimentos, com diferentes teores de adições, expedidos no período entre 2019 e 2025. Os dados possuem uma frequência diária de amostragem e a quantidade total utilizada foi de 2239, sendo 40% do CP II-F 32 e 60% do CP II-F 40. Após a coleta dos dados, a qualidade da base de dados foi melhorada pela remoção de *outliers* pela técnica dos quartis, e preenchimento de valores nulos por meio dos métodos *forward* e *back fill*, preservando a distribuição estatística dos parâmetros.

2.2 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

A seleção das variáveis combinou revisão da literatura, consulta a especialistas e análises estatísticas. A literatura identificou características cruciais em estudos anteriores, e o coeficiente de correlação de Pearson foi aplicado para medir a força e direção da relação entre duas variáveis. Essa análise estatística permitiu identificar variáveis com altas correlações, garantindo que as mais relevantes fossem consideradas no modelo.

2.3 ENGENHARIA DE RECURSOS

Algumas técnicas de engenharia de recursos foram aplicadas para melhorar a qualidade dos dados, isto é, e aumentar a correlação do modelo em relação as variações dos dados. Essas técnicas combinam as variáveis originais em novos parâmetros para tentar capturar relações mais complexas. Em seguida, foram agrupadas as variáveis que possuíam características semelhantes através de um algoritmo, reduzindo a sua dimensionalidade. Por fim, um algoritmo foi usado para normalizar a distribuição dos dados, reduzindo assimetria e estabilizando a variância.

2.4 ALGORITMOS AVALIADOS

As técnicas de aprendizado de máquina utilizadas incluem *Random Forest* (RF), *Extra Trees* (ETR), *Gradient Boosting* (GB), *XGBoost* (XGB), *K-Nearest Neighbors* (KNN) e Redes Neurais Artificiais (MLP). O RF e o ETR são baseados em múltiplas árvores de decisão, com o ETR introduzindo mais aleatoriedade para melhor generalização. O GB e o XGB constroem árvores sequenciais para corrigir erros anteriores, sendo o XGB uma versão otimizada com regularização para evitar *overfitting*. O KNN faz previsões com base nos dados mais próximos, dependendo da escolha dos vizinhos e da métrica de distância. Já o MLP utiliza camadas de neurônios artificiais para aprender padrões complexos, exigindo grande volume de dados e ajuste fino de hiperparâmetros.

2.5 MÉTRICAS

As métricas usadas para avaliar a qualidade dos modelos de predição e otimizar os hiperparâmetros incluem o erro absoluto percentual médio ou MAPE (*Mean Absolute Percentage Error*), a raiz do erro quadrático médio ou RMSE (*Root Mean Squared Error*) e o R^2 (coeficiente de determinação). O MAPE calcula a média dos erros absolutos entre as previsões e os valores reais, em porcentagem, sendo útil para avaliar a precisão relativa do modelo. O RMSE mede a média das diferenças entre os valores previstos e reais elevadas ao quadrado, penalizando mais os erros grandes e tornando-se sensível a *outliers*. Já o R^2 indica a proporção da variação total dos dados explicada pelo modelo, variando de 0 a 1, onde valores próximos de 1 indicam um bom ajuste. Essas métricas são complementares e permitem uma avaliação robusta da performance dos modelos, considerando precisão relativa (MAPE), magnitude do erro (RMSE) e poder explicativo (R^2).

2.6 OTIMIZAÇÃO DE HIPERPARÂMETROS

Para otimizar os hiperparâmetros dos modelos, foi empregado o *framework* Optuna, que aplica estratégias avançadas como otimização bayesiana e busca sequencial para identificar as melhores combinações de parâmetros de forma automatizada, com o objetivo de minimizar o RMSE. Em vez de testar combinações aleatórias, o Optuna explora o espaço de busca de forma inteligente, priorizando as regiões mais promissoras.

2.7 AVALIAÇÃO DOS MODELOS

Os resultados foram analisados por meio de técnicas de *holdout*, em que os dados são divididos em um conjunto de treinamento e um conjunto de teste. Neste estudo, a divisão adotada foi de 70% para treinamento e 30% para teste, de forma a avaliar o desempenho dos modelos em dados não vistos durante o treinamento.

3. RESULTADOS E ANÁLISES

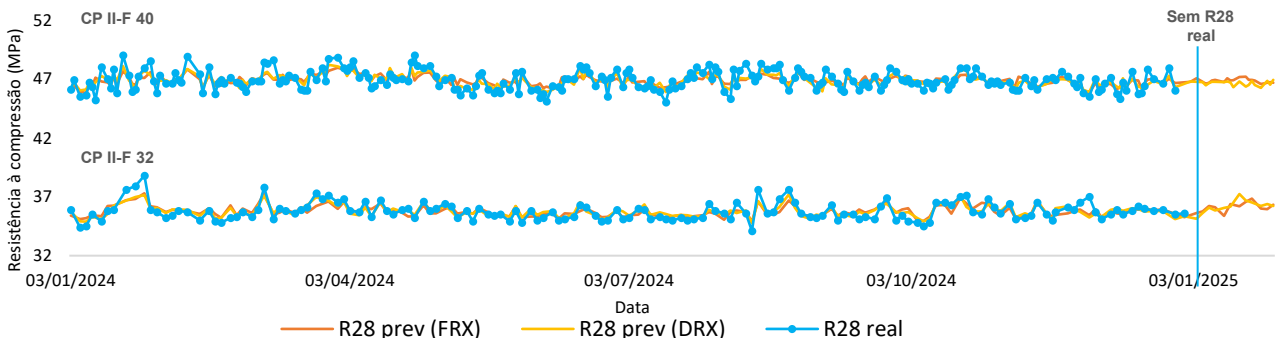
Após o treinamento dos modelos de previsão, foram calculadas as métricas para avaliação do desempenho dos modelos. A Tabela 1**Erro! Fonte de referência não encontrada.** apresenta as métricas dos sete modelos preditivos. A Figura 1 mostra a tendência da resistência à compressão real e predita do cimento de 2024 a 2025.

Tabela 1: Métricas dos modelos avaliados para as duas bases.

Modelo	Base 1 (FRX)			Base 2 (DRX)		
	R^2 (-)	RMSE (MPa)	MAPE (%)	R^2 (-)	RMSE (MPa)	MAPE (%)
RF	0,978	0,827	1,47	0,980	0,785	1,43
ETR	0,978	0,823	1,49	0,980	0,774	1,40
GB	**0,979**	**0,808**	**1,48**	0,980	0,777	1,43
XGB	0,978	0,829	1,51	**0,981**	**0,767**	**1,38**
KNN	0,978	0,822	1,48	0,981	0,768	1,40
MLP	0,971	0,944	1,62	0,970	0,955	1,61

Fonte: O Autor

Figura 1: Tendência da resistência à compressão aos 28 dias (R28) com o melhor modelo de cada base de dados



Fonte: O Autor

Os modelos treinados utilizando a base 1 (FRX) tiveram um ótimo desempenho quando comparado com os resultados de R28 de referência, com erros próximos a 1,52% no MAPE e 0,842 MPa no RMSE. O MAPE indica que as previsões tiveram uma diferença média de 1,52% em relação aos valores reais de R28. O RMSE

indica que, em média, as previsões do modelo erram cerca de 0,842 MPa em relação aos valores reais. Os desempenhos dos modelos que usaram a base 2 (DRX) foram semelhantes aos da base 1, com R² próximos de 0,979, porém com erros MAPE e RMSE ligeiramente menores, cerca de 1,44% e 0,804 MPa, em média. O algoritmo XGB foi o que melhor se ajustou a esses dados pois apresentou erros menores. Isso é devido ao fato de que a difração de raios-X (DRX) quantifica a composição mineralógica do cimento, oferecendo uma maior precisão, enquanto a fluorescência de raios-X (FRX) só mede a composição química (HEWLETT, 2019). Apesar dos erros serem maiores ao utilizar a base 1 (FRX), sua relevância é inegável, pois o alto custo dos equipamentos de difratometria de raios-X impede que muitas fábricas os tenham. Todas as métricas foram calculadas comparando o valor estimado da predição com o resultado real de referência.

Uma grande vantagem dos modelos preditivos é a capacidade de identificar tendências antes que impactem significativamente o processo de produção ou desempenho do produto. Por exemplo, se o modelo indicar uma queda gradual na resistência à compressão do cimento, a redução das adições ou o ajuste na finura do cimento podem ser feitos de forma antecipada, evitando problemas de qualidade do produto. Essa abordagem proativa possibilita um controle mais eficiente da produção, minimiza reclamações ou ressarcimentos e garante maior estabilidade nas características dos materiais.

4. CONCLUSÃO

Os resultados deste estudo demonstram que técnicas de aprendizado de máquina são eficazes na previsão da resistência à compressão do cimento, possibilitando ações proativas e rápidas para garantir a qualidade do produto. A análise comparativa mostrou que os modelos treinados com dados de difração de raios-X (DRX) apresentaram um desempenho ligeiramente superior, principalmente devido à maior precisão na quantificação da composição mineralógica do cimento. No entanto, a fluorescência de raios-X (FRX) continua sendo uma boa opção, especialmente considerando o menor custo do equipamento e sua maior disponibilidade nas fábricas. A utilização dessas técnicas preditivas pode permitir ações corretivas antecipadas na produção, garantindo maior consistência das propriedades e qualidade do cimento, além de evitar custos com reclamações e ressarcimentos.

5. AGRADECIMENTOS

Agradecemos à Votorantim Cimentos e à Silvia Regina Soares da Silva Vieira pelo apoio e colaboração no desenvolvimento deste artigo. Sua expertise, dedicação e contribuição foram fundamentais para a realização deste estudo, contribuindo significativamente para o desenvolvimento de modelos de IA na previsão da resistência à compressão do cimento. Essa parceria reforça a importância da integração entre a pesquisa e indústria na busca por inovações que aprimorem o controle de qualidade e a eficiência dos processos produtivos.

REFERÊNCIAS

FAYYAD, U.; PIATETSKY-SHAPIRO, G.; SMYTH, P. (1996) From Data Mining to Knowledge Discovery in Databases. **AI Magazine**, v. 17, p 37-54, 1996. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1609/aimag.v17i3.1230>. Acesso em: 03 fev. 2025. doi:https://doi.org/10.1609/aimag.v17i3.1230.

GUO, J. et al. (2020) An efficient model for predicting setting time of cement based on broad learning system. **Applied Soft Computing**, v. 96, p. 106698–106698, 1 nov. 2020. Disponível em: < https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1568494620306360>. Acesso em 03 fev. 2025. doi: https://doi.org/10.1016/j.asoc.2020.106698.

HEWLETT, P. (2019) **Lea's Chemistry of Cement and Concrete.** 5ed.Elsevier Science & Technology, 2019.

LIU, X. et al. (2019) A novel support vector machine ensemble model for estimation of free lime content in cement clinkers. **ISA Transactions**, v. 99, p. 479–487, 3 set. 2019. Disponível em: < https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019057819304185>. Acesso em 01 fev. 2025. doi: https://doi.org/10.1016/j.asoc.2020.106698.

RUSSELL, S.; NORVIG, P. (2010) **Artificial Intelligence: A Modern Approach**. 3ed. Tradução: Regina Célia Simille de Macedo. Prentice-Hall, Upper Saddle River. 2010. 51 p.