

Programa de Pós-Graduação em  
**Nanociências**



Universidade Franciscana



UFN  
engenharia  
química



UFPEL



Santa Maria-RS | 2025

# Aplicações da Inteligência Artificial no Desenvolvimento e Otimização de Processos Sol-Gel

Leandro Rodrigues Oviedo  
Engenheiro Químico  
Doutor em Nanociências – UFN



**GRUPO DE PESQUISA  
EM NANOMATERIAIS APLICADOS**

Universidade Franciscana (UFN)

# Tópicos abordados

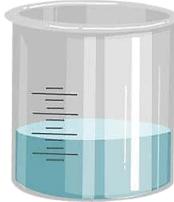
Conceitos gerais – Processo sol-gel / Aprendizado de máquina

Quando utilizar algoritmos de IA?

Tipos de aprendizado de máquina / IA integrado ao processo Sol-Gel

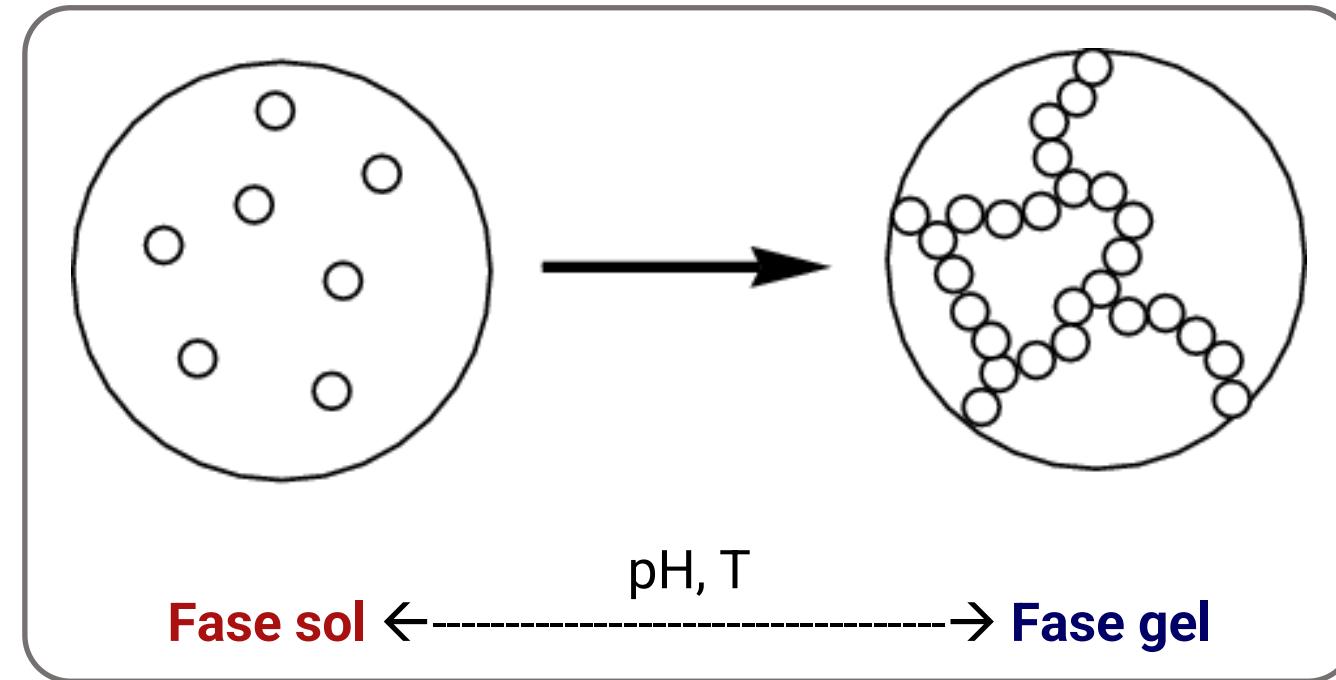
Vantagens e limitações

Estudos de caso



## O que é processo sol-gel

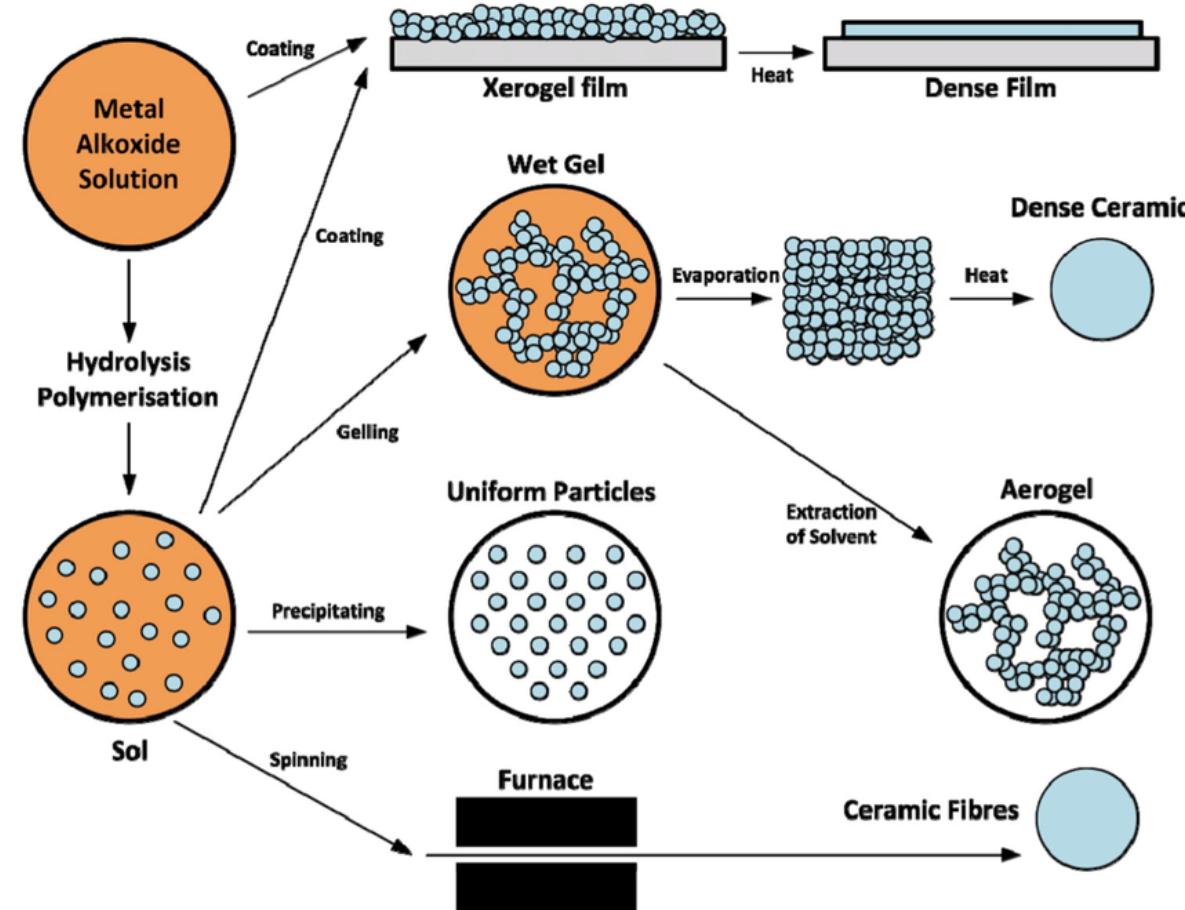
**Figura 1.** Esquema ilustrativo do processo sol-gel.



**Fonte:** Adaptado de Peterson (2008) / doi: [https://doi.org/10.1007/978-0-387-48998-8\\_1432](https://doi.org/10.1007/978-0-387-48998-8_1432)

## Processo sol-gel

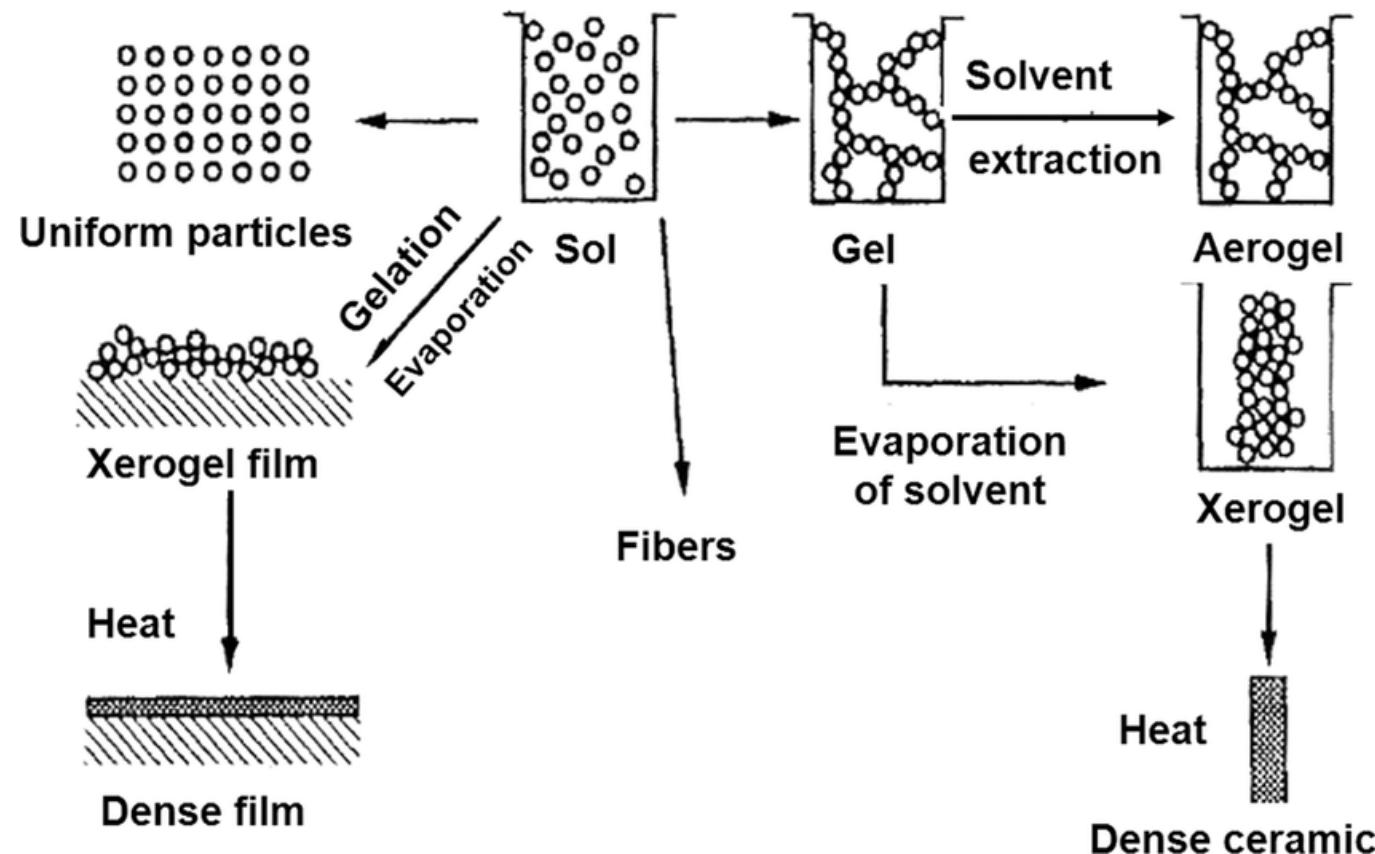
**Figura 2.** Esquema do processo sol-gel para a síntese de (nano)materiais cerâmicos



Fonte: Innocenzi (2020) / doi: <http://dx.doi.org/10.1007/s10971-020-05243-w>

## Processo sol-gel

**Figura 3.** Esquema do processo sol-gel para a síntese de (nano)materiais cerâmicos, aerogéis, partículas homogêneas e revestimentos.



Fonte: Innocenzi (2020) / doi: <http://dx.doi.org/10.1007/s10971-020-05243-w>

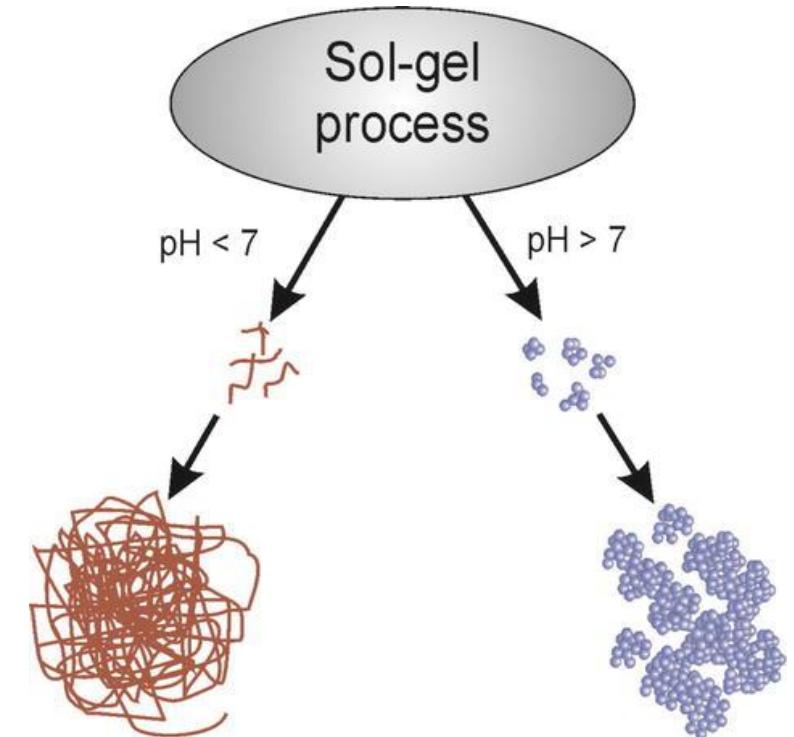
# Processo sol-gel

## Particularidades

- Processo extremamente dependente do pH, solvente, precursor
- Pode ser catalisada por ácido (cadeias +lineares, xerogéis)
- Pode ser catalisada por base (estruturas +particuladas/porosas)
- Produção de aerogéis, óxidos metálicos, filmes finos, nanomateriais....
- Baixas temperaturas de processamento, boa homogeneidade, dopagem...
- Pode envolver efeitos da temperatura (método **Pechini**)

## Precursors

- Nitratos:  $M_x(NO_3)_y$
- Sulfatos:  $M_x(SO_4)_y$
- Acetatos:  $M_x(OOCH_2CH_3)_y$
- Alcóxidos metálicos:  $M-OR$

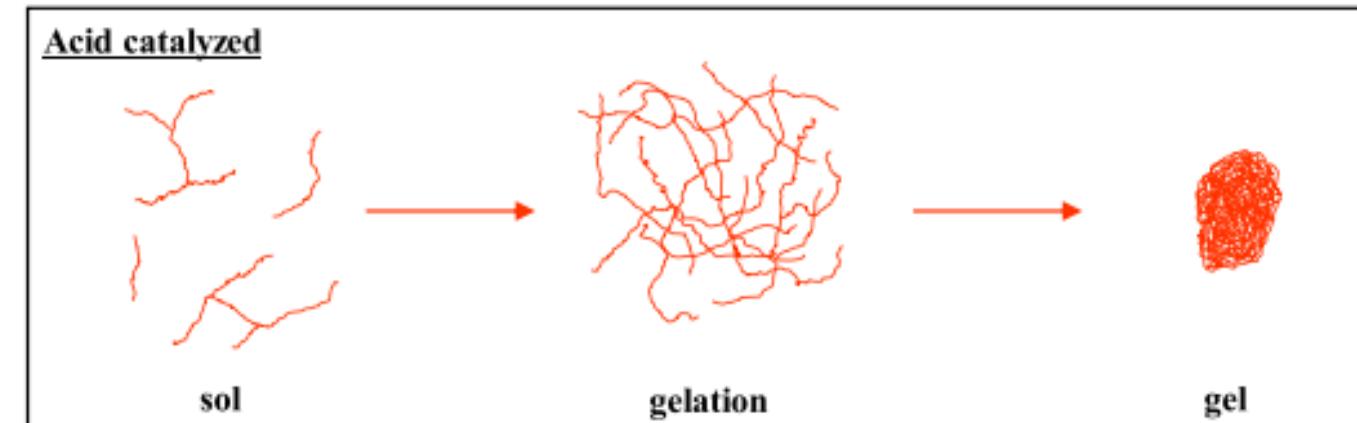


**Fonte:** Zielecka et al. (2017)

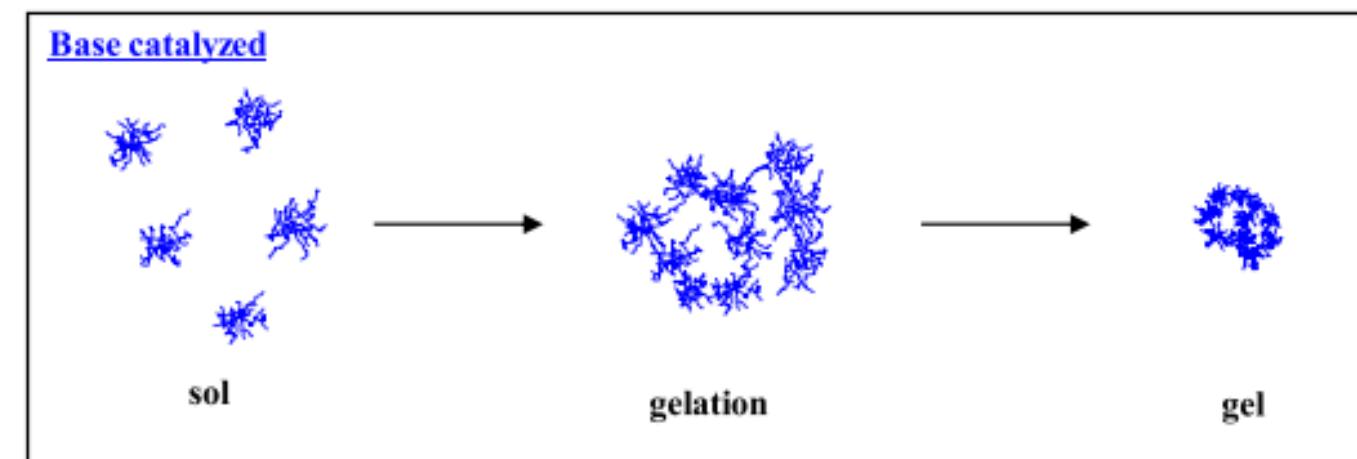
doi: <http://dx.doi.org/10.5772/67824>

## Processo sol-gel

**Fig. 4** Formation of a gel from an acid (a) or basic (b) catalyzed hydrolysis, the change of inorganic structure from a sol to a gel. Reprinted with permission from [1]



Acid catalyzed hydrolysis



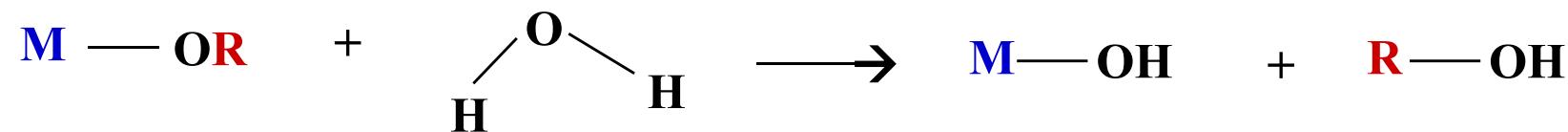
Base catalyzed hydrolysis

Fonte: Innocenzi (2020)

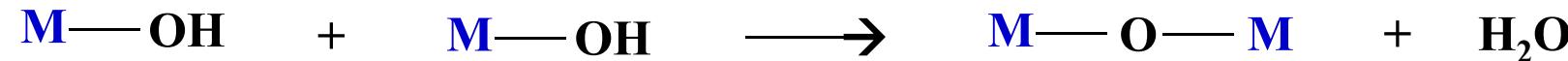
Doi: [10.1007/s10971-020-05243-w](https://doi.org/10.1007/s10971-020-05243-w)

## Reações químicas do processo sol-gel

### Etapa de hidrólise



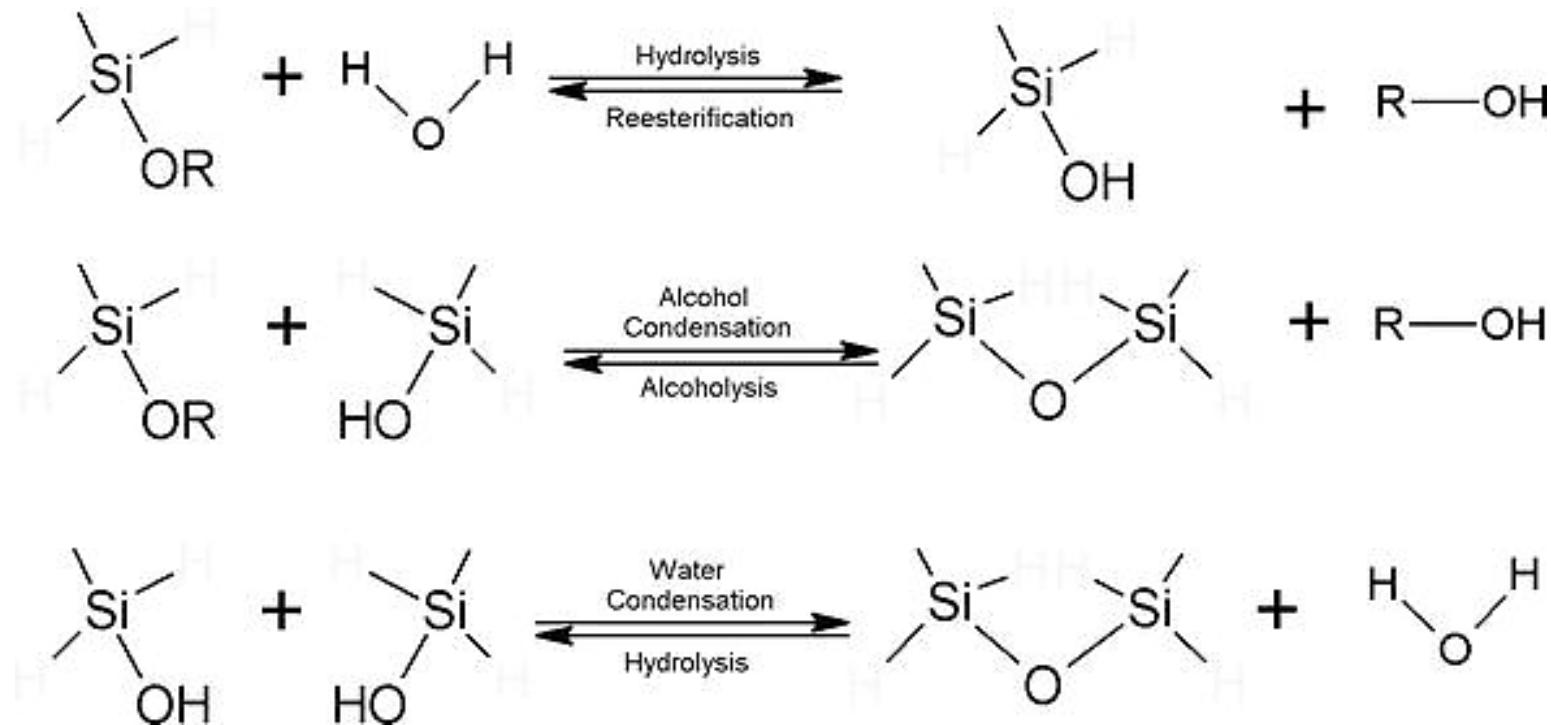
### Etapa de condensação



**Secagem → Produto do processo sol-gel**

## Reações químicas do processo sol-gel

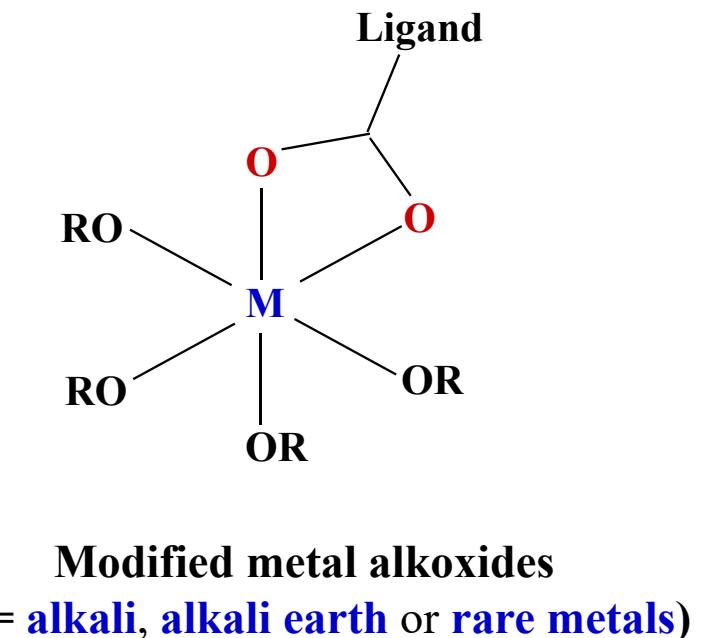
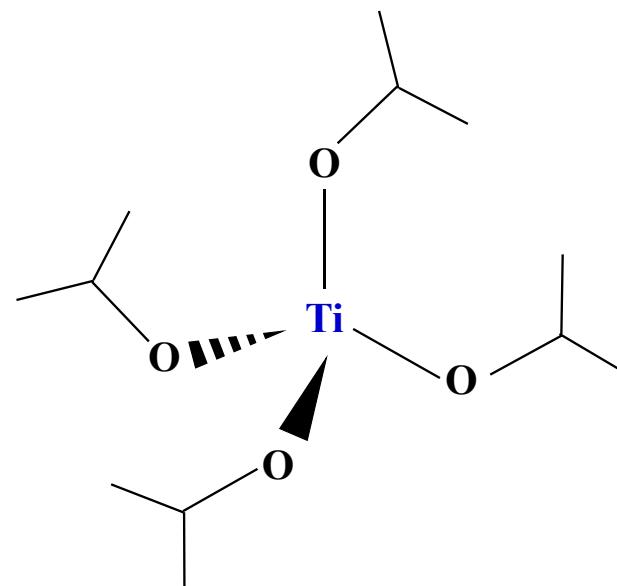
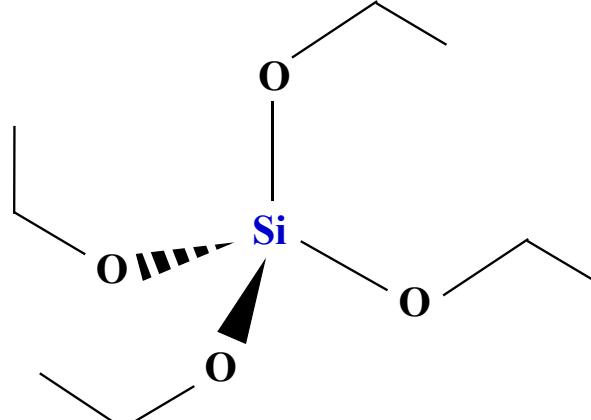
**Figura 3.** Esquema de reações simultâneas de hidrólise e condensação que ocorrem no processo sol-gel, onde R é alquila.



Fonte: Zielecka et al. (2017) / doi: <http://dx.doi.org/10.5772/67824>

## Processo sol-gel

**Figura 4.** Estrutura química de alguns precursores do processo sol-gel.



Fonte: Construção do autor (2024).

## O que é aprendizado de máquina (*machine learning* – ML)?



### Ferramenta de Inteligência artificial (IA)

#### O que é Machine Learning

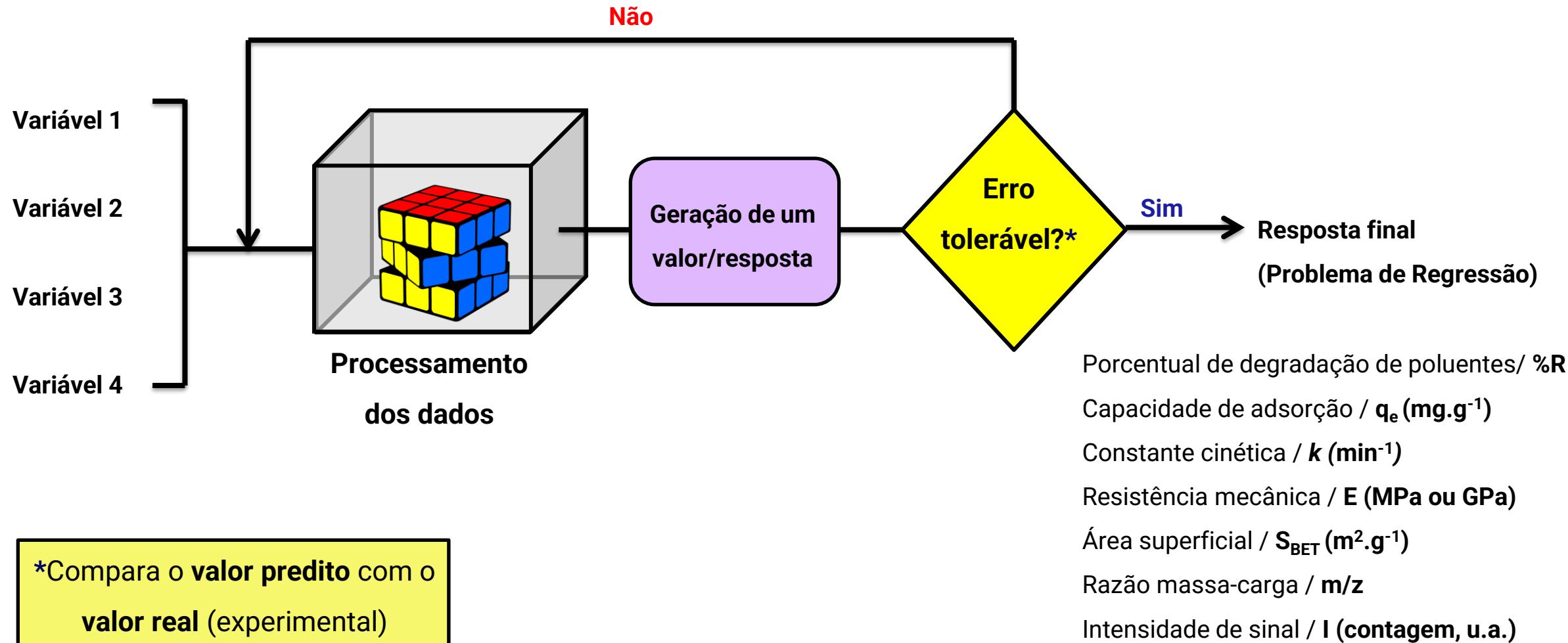
[Hands On Machine Learning with Scikit Learn and TensorFlow](#) (GÉRON, 2017):

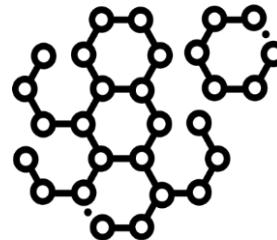
Ciência de programar computadores de forma que eles aprendam com os dados.

[Some Studies in Machine Learning Using the Game of Checkers](#) (SAMUEL, 1959)

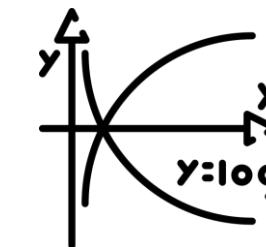
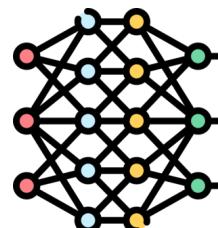
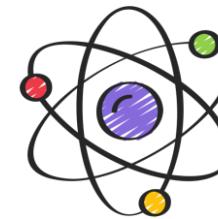
Machine Learning é o campo de estudo que dá aos computadores a capacidade de aprender sem ser explicitamente programado.

# Funcionamento de um algoritmo de IA





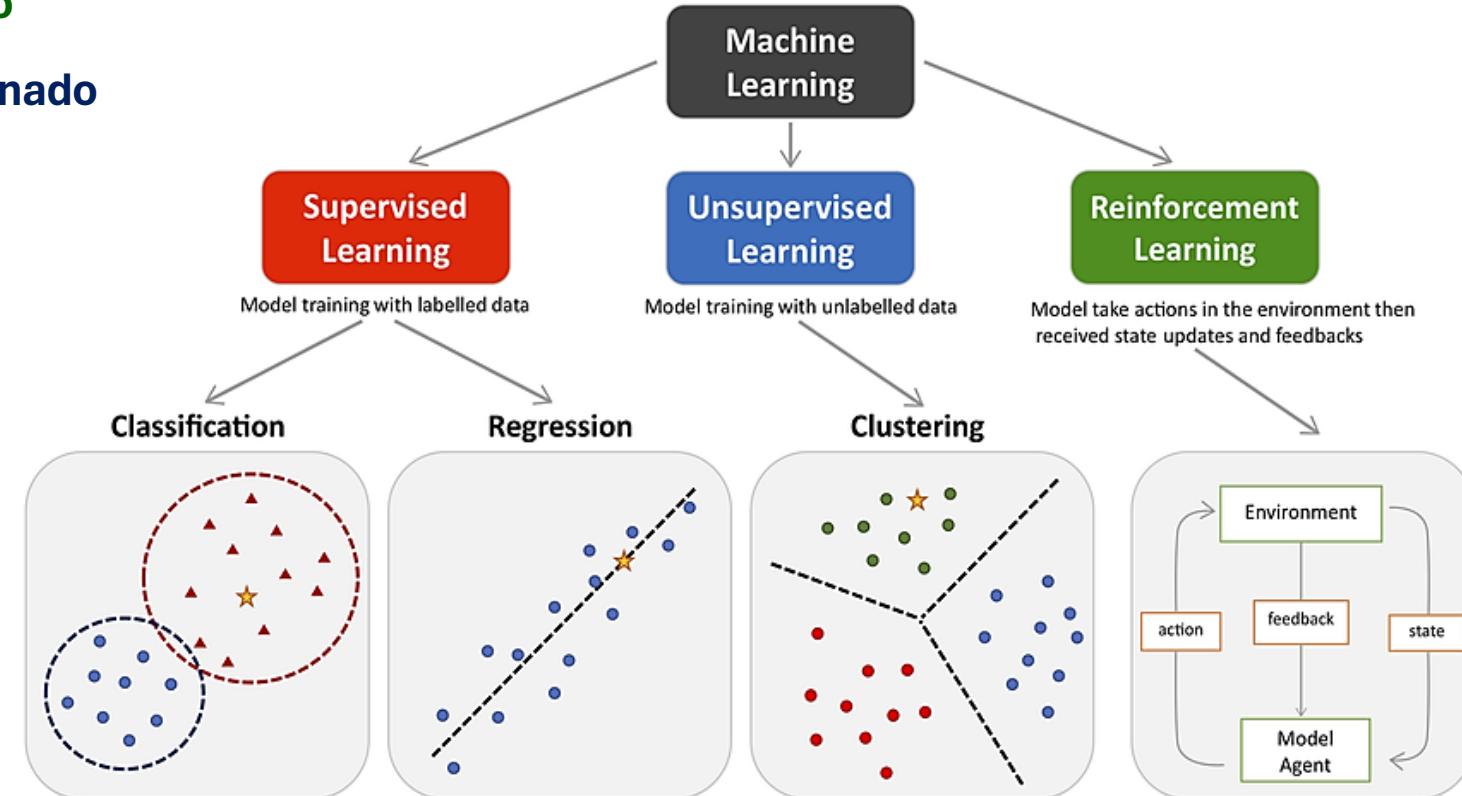
## QUANDO UTILIZAR ALGORITMOS DE IA?



- ✓ Para prever o comportamento de um sistema a partir de dados experimentais/reais, havendo um número suficiente de dados
- ✓ Para otimização de processos e detectar anomalias/padrões em sistemas
- ✓ Quando a realização de experimentos adicionais é inviável/dispendioso/caro.

# Tipos de aprendizado de máquina

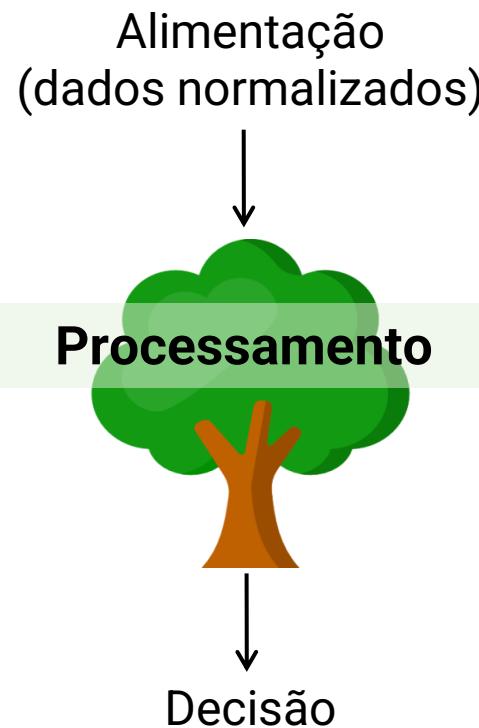
- Aprendizagem **supervisionado**
- Aprendizagem **não supervisionado**
- Aprendizagem por **reforço**



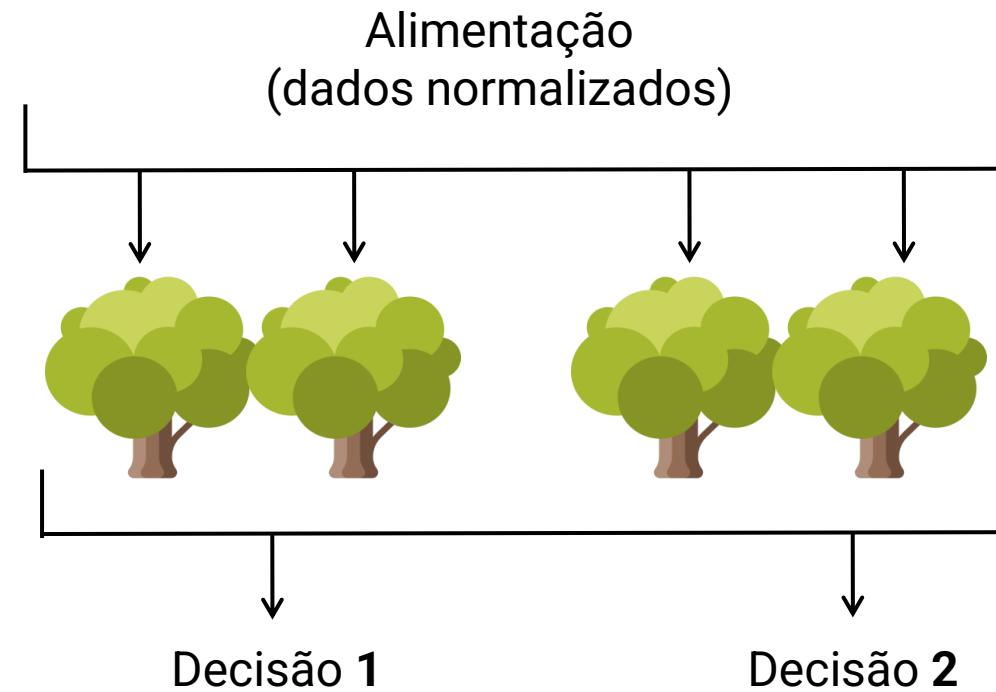
DOI: [10.3389/fphar.2021.720694](https://doi.org/10.3389/fphar.2021.720694)

# Modelos baseados em árvores de decisão

## Árvore de decisão ou *Decision Tree* (DT)



- **Random Forest (RF)**
- **Isolation Forest (IF)**
- **Light Gradient Boosting Machine (LGBm)**
- **Xtreme Gradient Boosting Machine (XGBoost)**



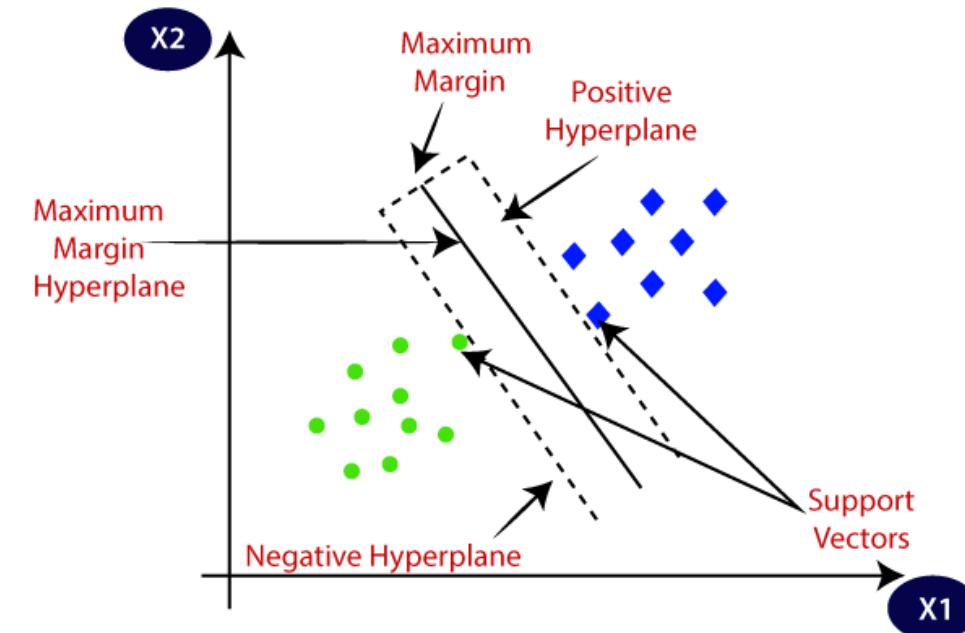
$(D1 + D2)/2 =$  Média das decisões (Resposta do algoritmo)

# Modelos vetoriais

[https://ml-cheatsheet.readthedocs.io/en/latest/classification\\_algos.html?highlight=decision%20tree](https://ml-cheatsheet.readthedocs.io/en/latest/classification_algos.html?highlight=decision%20tree)

## Algoritmos baseado em vetores

- Naïve-Bayes
- K-Nearest Neighbors (KNN)
- Support Vector Machine (SVM)
- Outros...



Estes algoritmos aprendem comparando exemplos no espaço de características, usando distâncias ou separações geométricas para classificar ou agrupar os dados, geralmente **distância Euclidiana, Minkowski, Cosseno, Pearson...**

## Modelos vetoriais

---

- **Euclidiana**  $D(X, Y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$  [0,∞)

- **Minkowski**  $D(X, Y) = \left( \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$  [0,∞)

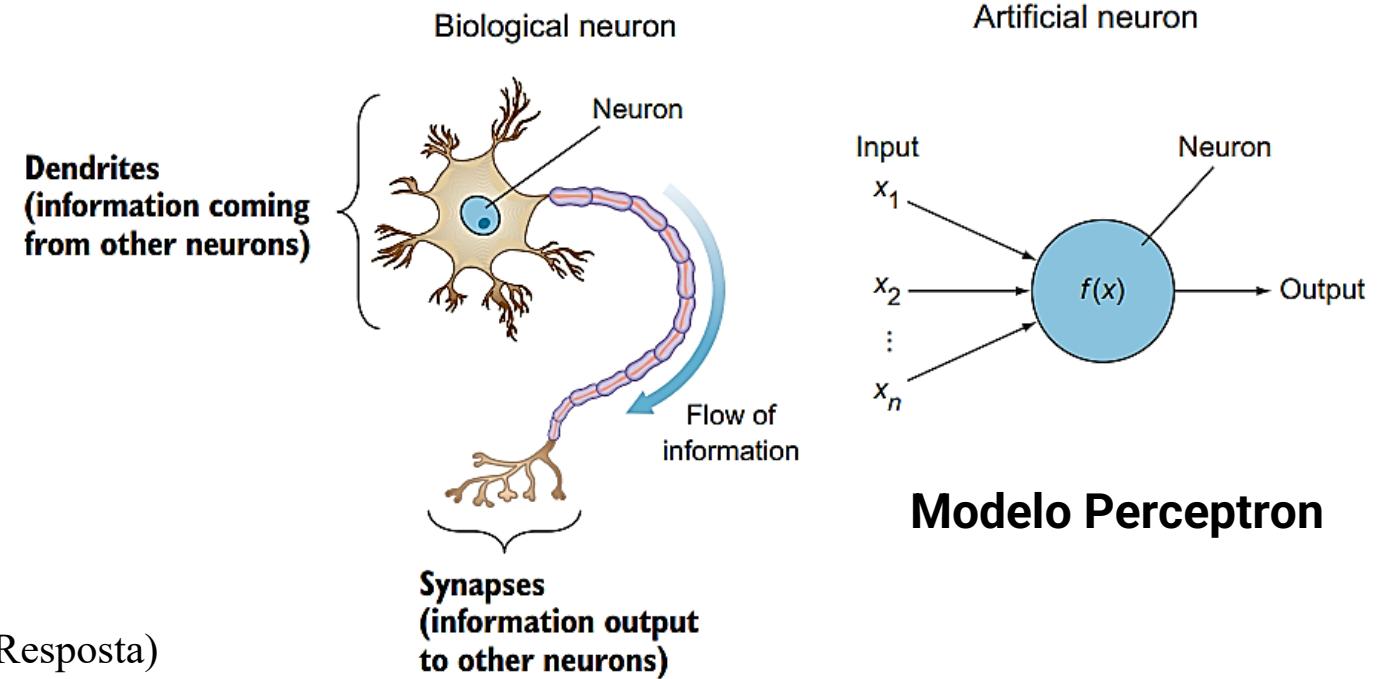
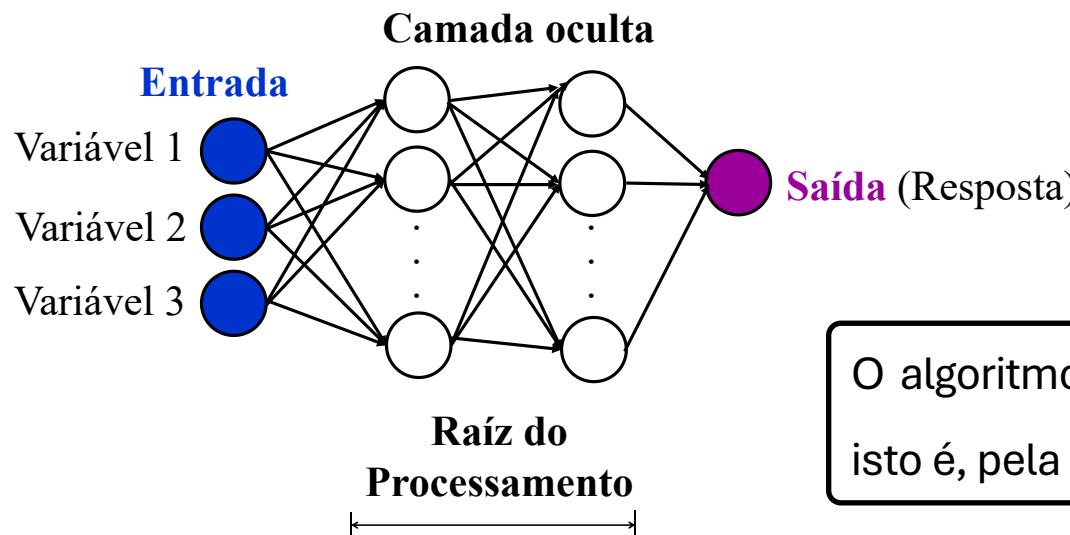
- **Cosseno**  $D(X, Y) = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i)^2}}$  [0,1]

- **Pearson**  $D(X, Y) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$  [-1,1]

# Modelos baseados em redes neurais artificiais

## Tipos de Redes Neurais Artificiais

- Redes neurais multicamadas (ANN-MLP)
- Redes neurais convolucionais (CNN)
- Redes neurais recorrentes (RNN)
- Outras...

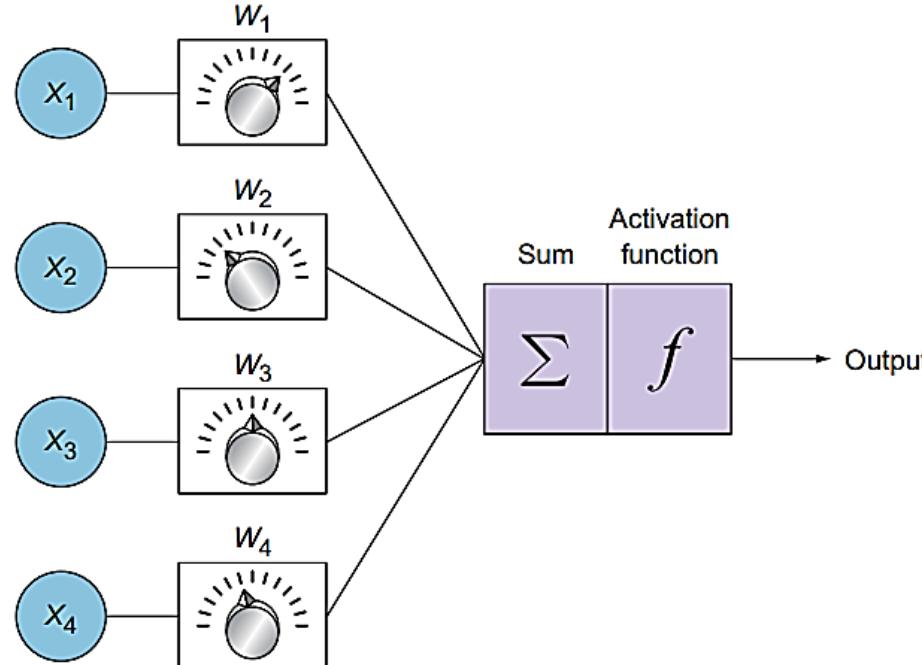


O algoritmo aprende de maneira similar ao **neurônio** no cérebro humano, isto é, pela passagem de informações de neurônios a neurônios (**sinapses**).

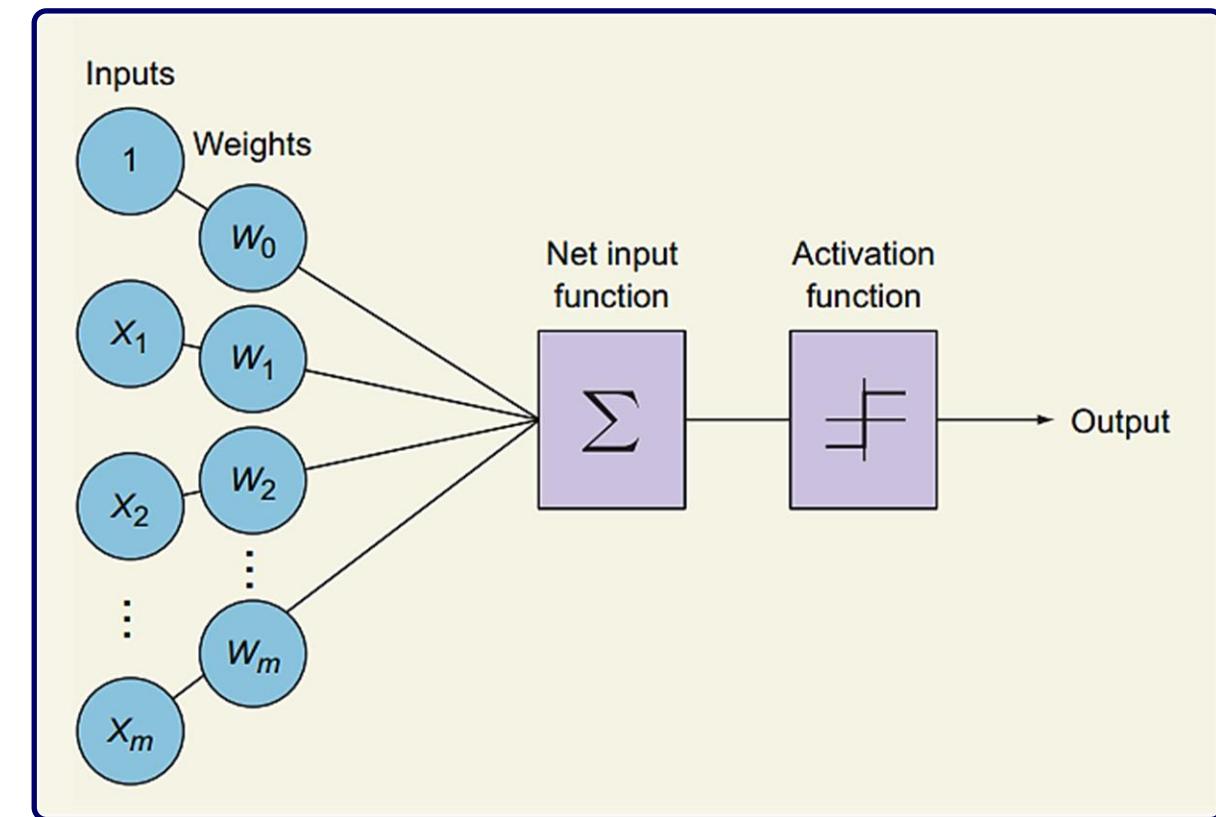
# Modelos baseados em redes neurais artificiais

## Ajuste dos pesos

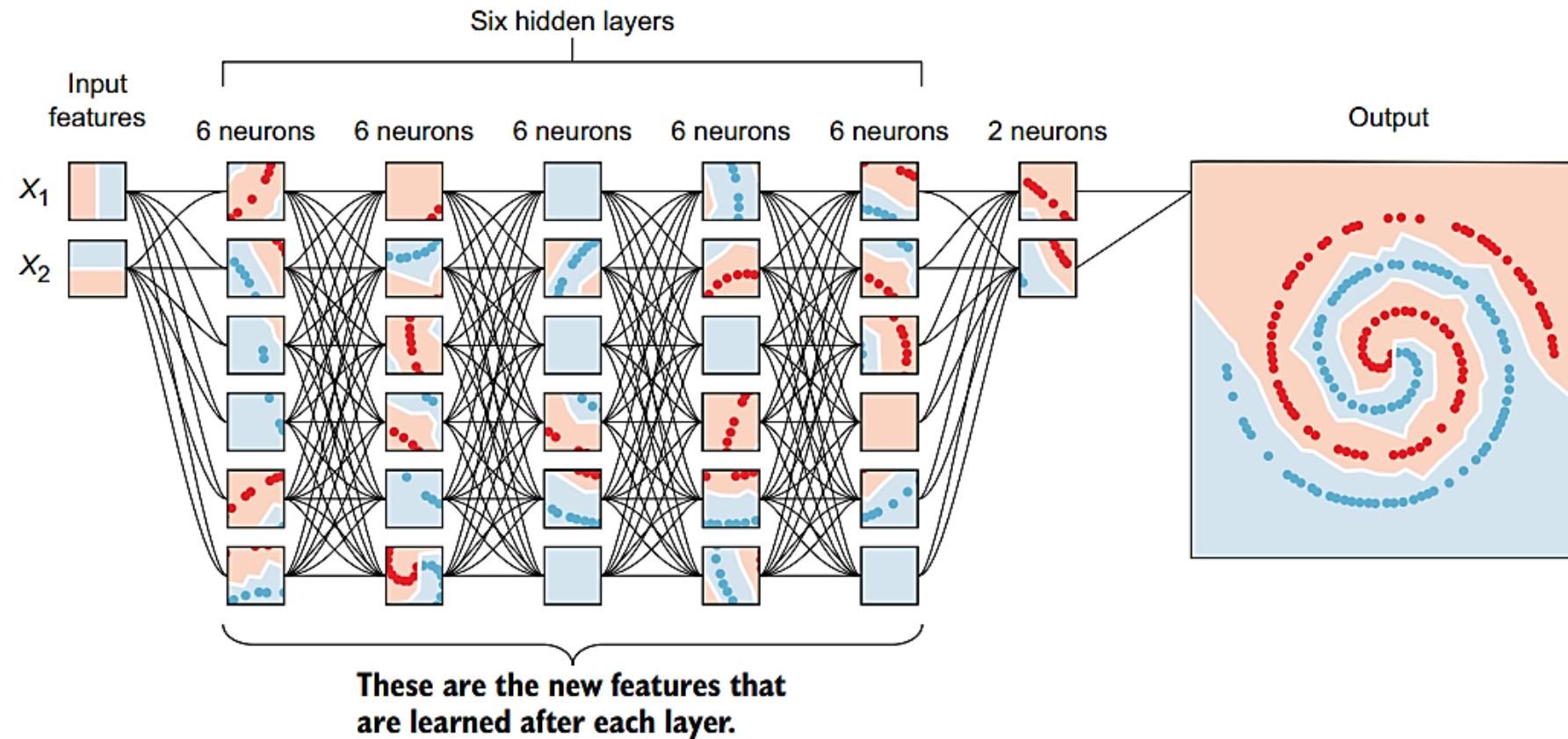
(Contribuição de cada variável de entrada)



## Funcionamento das redes neurais



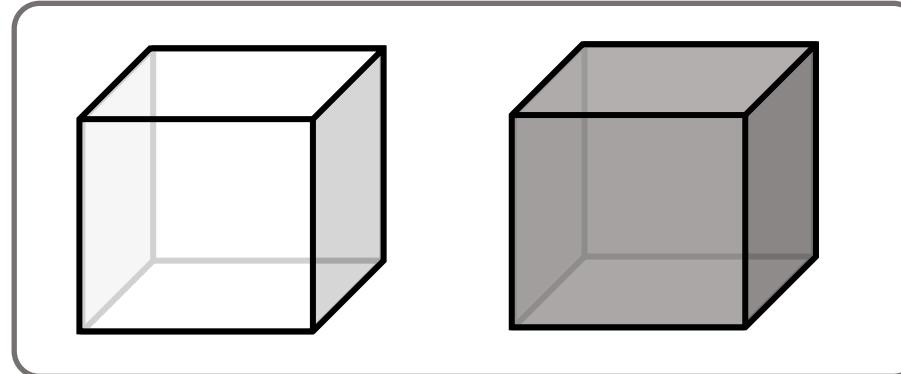
# Modelos baseados em redes neurais artificiais



ELGENDY, Mohamed. **Deep Learning for Vision Systems**. Shelter Island: Manning Publications, 2020.

# Algoritmos e sua interpretabilidade quanto ao método de aprendizagem

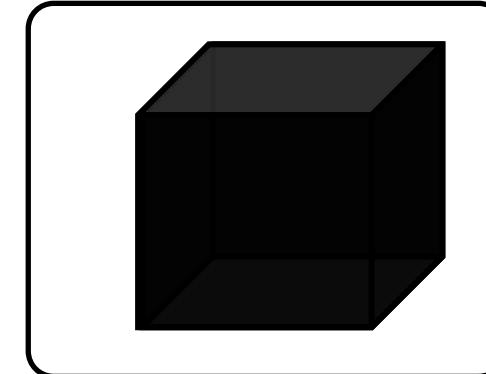
## Machine Learning (ML)



### Modelos de caixa branca e cinza

Funcionamento interno transparente/translúcido

## Deep Learning (DL) e SVM



### Modelos de caixa preta

Funcionamento interno opaco e complexo

## Onde rodar a simulação com IA

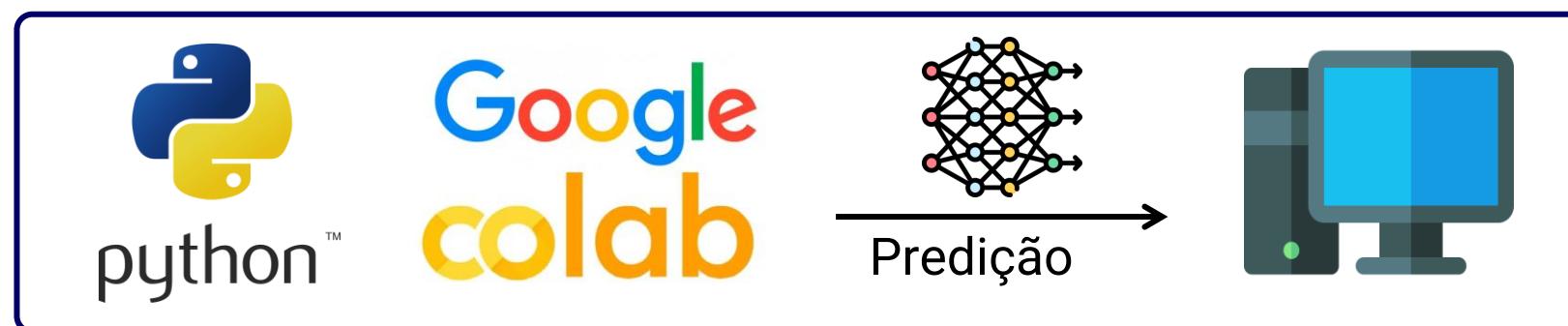
**Software:** Python 3.4.11

**Tratamento dos dados (subdivisão do dataset):** 70 – 80% dados de treino / 20 – 30% dados de teste

**Normalização:** biblioteca StandardScaler ou MinMaxScaler (importante para corrigir problemas de escala entre as var.)

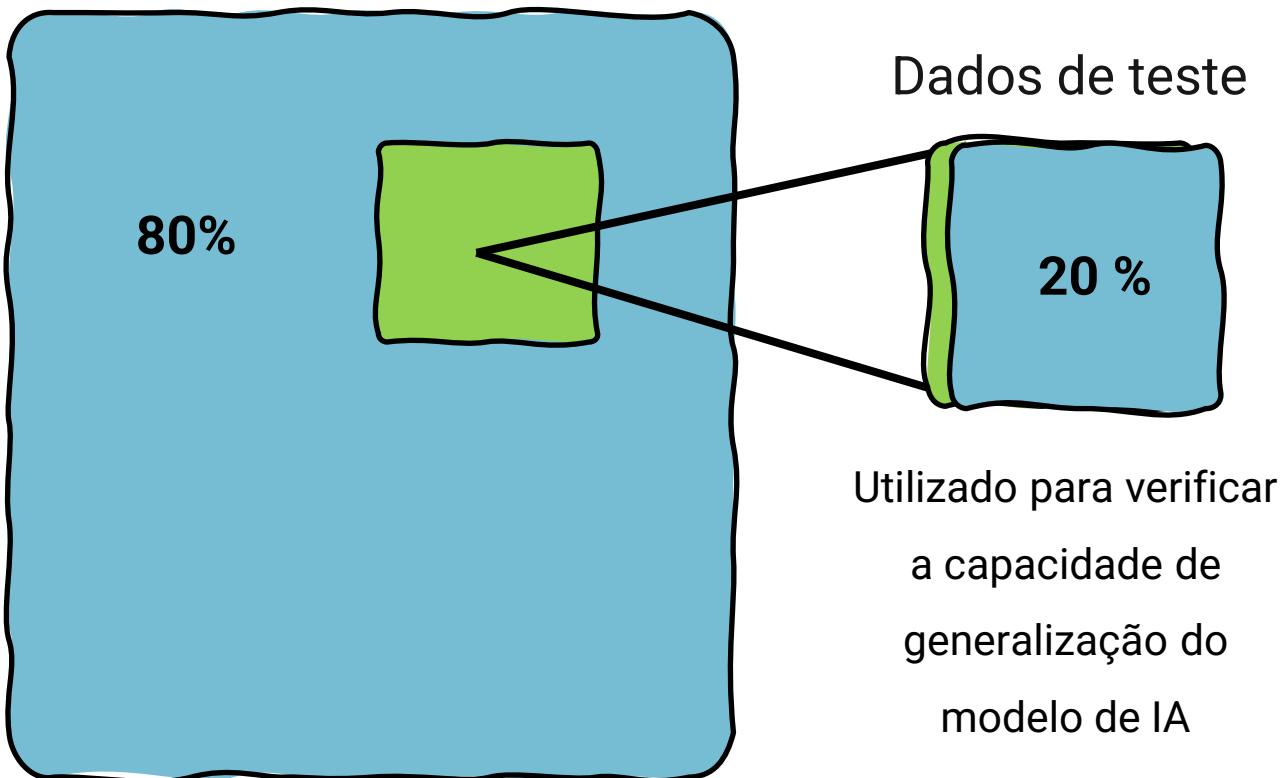
**Bibliotecas:** scikit-learn, tensorflow, keras, numpy, pandas, seaborn, matplotlib, plotly.

**Algoritmos + utilizados:** redes neurais artificiais multicamadas – (ANN-MLP), árvore de decisão (DT), Random Forest (RF) e eXtreme Gradient Boosting (XGBoost), Support Vector Machine, K-Nearest Neighbors (KNN), Naïve-Bayes, K-Means, Regressão Linear, Polinomial e Regressão Múltipla, K-Modes, Análise de componentes principais (PCA), DBScan e clusterização hierárquica.



## Separação do conjunto de dados e validação dos algoritmos

Dados de treino



Utilizado para treinar o algoritmo e ajustar  
os hiperparâmetros do modelo de IA

Google Colab for Python 

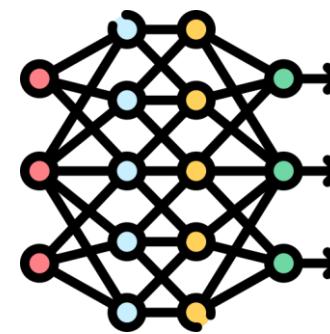


Biblioteca sklearn: `train_test_split`



## Construção do conjunto de dados

---



## Valores discretos (síntese, predição de propriedades discretas)

	A	B	C	D	E	F	G
1	Ensaio	Variável numérica 1	Variável numérica 2	Variável categórica 1	Variável numérica 3	Variável categórica 2	Resposta
2	1	Valor numérico 1	Valor numérico 1	Dado nº 1	Valor numérico 1	Dado nº 1	Valor 1
3	2	Valor numérico 2	Valor numérico 2	Dado nº 2	Valor numérico 2	Dado nº 2	Valor 2
4	3	Valor numérico 3	Valor numérico 3	Dado nº 3	Valor numérico 3	Dado nº 3	Valor 3
5	4	Valor numérico 4	Valor numérico 4	Dado nº 4	Valor numérico 4	Dado nº 4	Valor 4
6	5	Valor numérico 5	Valor numérico 5	Valor numérico 5	Valor numérico 5	Dado nº 5	Valor 5
7	6	Valor numérico 6	Valor numérico 6	Valor numérico 6	Valor numérico 6	Dado nº 6	Valor 6
8	7	Valor numérico 7	Valor numérico 7	Valor numérico 7	Valor numérico 7	Dado nº 7	Valor 7
9	9	Valor numérico 8	Valor numérico 8	Valor numérico 8	Valor numérico 8	Dado nº 8	Valor 8
10	10	Valor numérico 9	Valor numérico 9	Valor numérico 9	Valor numérico 9	Dado nº 9	Valor 9
11	11	Valor numérico 10	Valor numérico 10	Valor numérico 10	Valor numérico 10	Dado nº 10	Valor 10
12	12	Valor numérico 11	Valor numérico 11	Valor numérico 11	Valor numérico 11	Dado nº 11	Valor 11
13	13	Valor numérico 12	Valor numérico 12	Valor numérico 12	Valor numérico 12	Dado nº 12	Valor 12
14	14	Valor numérico 13	Valor numérico 13	Valor numérico 13	Valor numérico 13	Dado nº 13	Valor 13
15	15	Valor numérico 14	Valor numérico 14	Valor numérico 14	Valor numérico 14	Dado nº 14	Valor 14
16	16	Valor numérico 15	Valor numérico 15	Valor numérico 15	Valor numérico 15	Dado nº 15	Valor 15
17	17	Valor numérico 16	Valor numérico 16	Valor nº 16	Valor nº 16	Dado nº 16	Valor 16
18	18	Valor numérico 17	Valor numérico 17	Valor nº 17	Valor nº 17	Dado nº 17	Valor 17
19	19	Valor numérico 18	Valor numérico 18	Valor nº 18	Valor nº 18	Dado nº 18	Valor 18
20	20	Valor numérico 19	Valor numérico 19	Valor nº 19	Valor nº 19	Dado nº 19	Valor 19
21	21	Valor numérico 20	Valor numérico 20	Valor nº 20	Valor nº 20	Dado nº 20	Valor 20
22	22	Valor numérico 21	Valor numérico 21	Valor nº 21	Valor nº 21	Dado nº 21	Valor 21
23	23	Valor numérico 22	Valor numérico 22	Valor nº 22	Valor nº 22	Dado nº 22	Valor 22
24	24	Valor numérico 23	Valor numérico 23	Valor nº 23	Valor nº 23	Dado nº 23	Valor 23

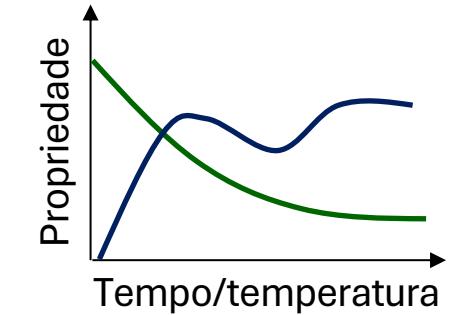
**Condição 1 → Valor X**

**Condição 2 → Valor Y**

**Condição 3 → Valor Z**

## Valores contínuos (predição de propriedades temporais)

	A	B	C	D	E
1	Ensaio	Tempo (s)	Variável numérica 2	Variável numérica 3	Resposta
2	1	0	Valor numérico 1	Valor numérico 1	Valor 1
3	1	2	Valor numérico 2	Valor numérico 2	Valor 2
4	1	4	Valor numérico 3	Valor numérico 3	Valor 3
5	1	6	Valor numérico 4	Valor numérico 4	Valor 4
6	1				Valor 5
7	1				Valor 6
8	1				Valor 7
9	1				Valor 8
10	1				Valor 9
11	1				Valor 10
12	1				Valor 11
13	1				Valor 12
14	1	50	Valor nº 13	Valor nº 13	Valor 13
15	1	60	Valor nº 14	Valor nº 14	Valor 14
16	1	70	Valor nº 15	Valor nº 15	Valor 15
17	2	0	Valor nº 1	Valor nº 1	Valor 1
18	2	2	Valor nº 2	Valor nº 2	Valor 2
19	2	4	Valor nº 3	Valor nº 3	Valor 3
20	2	6	Valor nº 4	Valor nº 4	Valor 4
21	2	8	Valor nº 5	Valor nº 5	Valor 5



## Dataset constituído por imagens

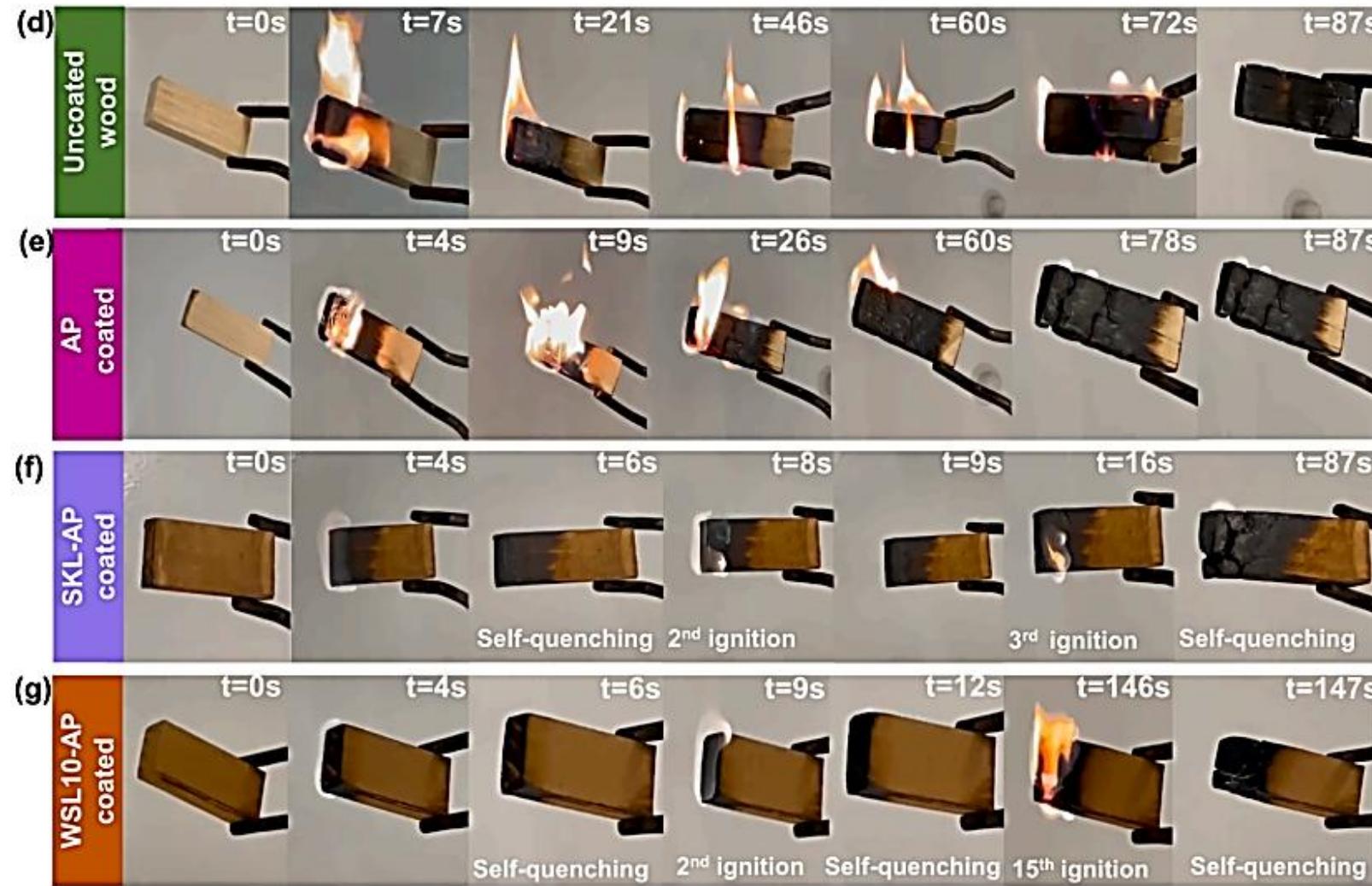
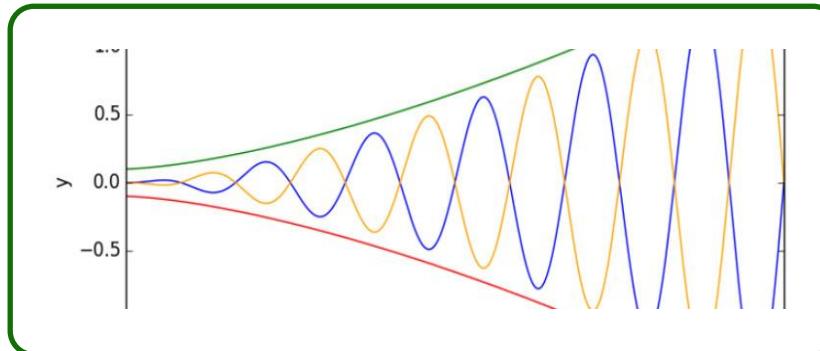


Fig. 7. Limiting oxygen index (LOI) (a), light absorption (b), smoke density rating values (c), and images of the flame test for uncoated wood (d), AP-coated (e), SKL-AP (f), and WSL10-AP (1/1 wt./wt.) (g).

# Links úteis

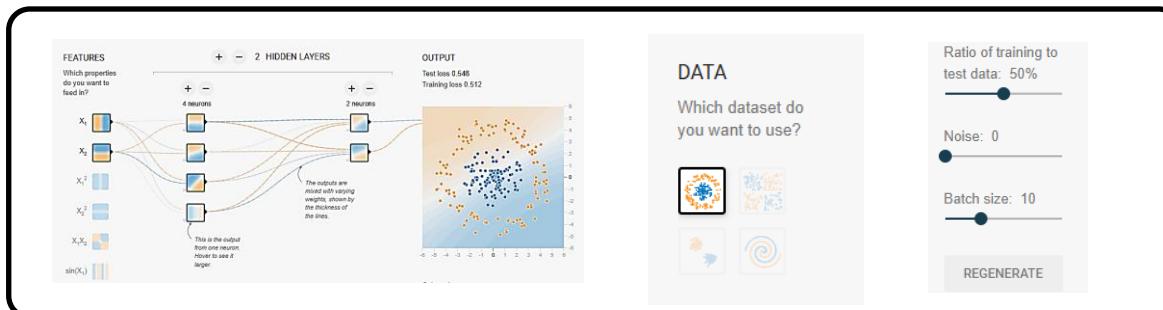


## Extração de dados a partir de imagens



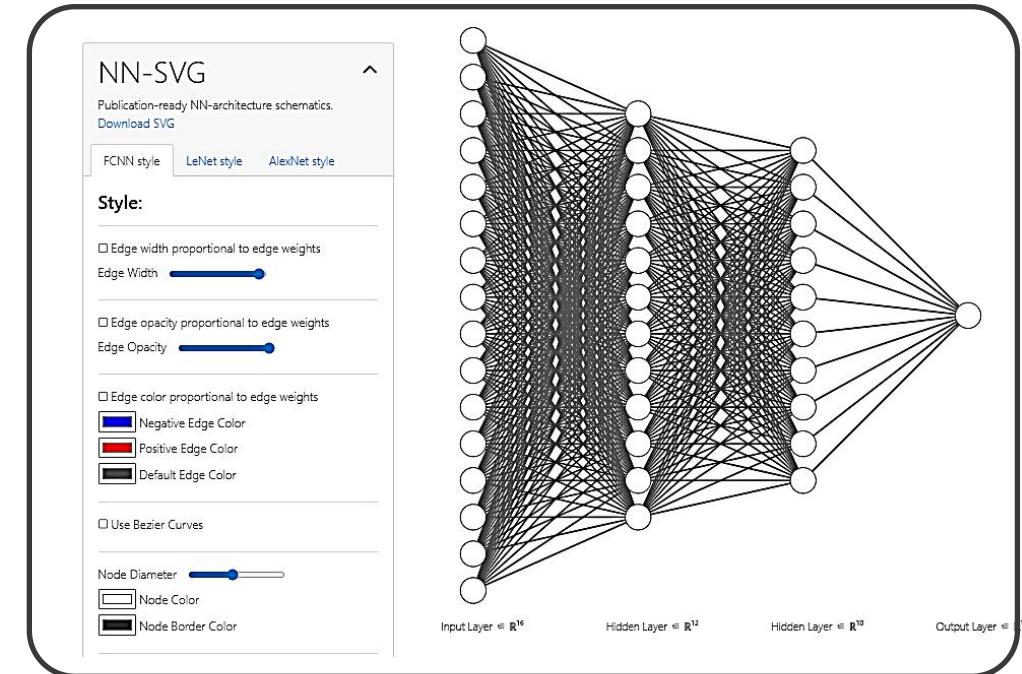
<https://www.youtube.com/watch?v=AqilVkJx7sl>

## Simulação didática do funcionamento de uma rede neural



<https://playground.tensorflow.org/>

## Desenho da arquitetura de rede neural

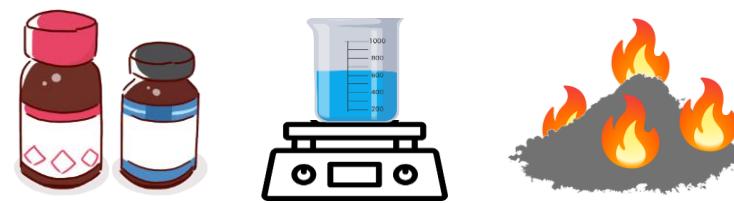


<https://alexlenail.me/NN-SVG/>

# Estudos de casos

## Estudo de Caso 1

**Temática:** Otimização da síntese de um retardante de chamas baseado no LOI (*Limiting Oxygen Index*). Para isso, realizou-se alguns experimentos pela síntese sol-gel, variando os precursores e as condições de síntese (solvente, pH e temperatura), avaliando-se o LOI do material obtido ao final de cada síntese. Quais **precursores** e **condições de síntese** irão resultar no material com maior **LOI** e, consequentemente, maior capacidade de retardar a propagação do fogo?



O LOI é obtido por meio de um teste que determina a concentração mínima de oxigênio no ambiente para que o material sustente a combustão.

Materiais com **LOI maior** indicam **maior resistência à chama**. O ensaio é padronizado internacionalmente pela ASTM D2863 e pela ISO4589

## Estudo de Caso 1

**Tabela 1** – Conjunto de dados obtidos por planejamento experimental (DCCR ou Taguchi).

Precursors	Fonte de Mg (% m/m)	Fonte de Si/Ti (% m/m)	pH	T (°C)	Solvente	LOI
Etóxido de magnésio/TEOS	8	60	8	60	Etanol absoluto	28,12
Etóxido de magnésio/isopropóxido de Ti	9	55	9	55	Etanol absoluto	20,75
Acetato de magnésio/TEOS	10	57	9	45	Etanol/água (80:20)	30,45
Etóxido de magnésio/isopropóxido de Ti	12	53	10	55	Etanol/água (80:20)	29,20
Acetato de magnésio/isopropóxido de Ti	8	58	10	60	Etanol absoluto	27,60
Nitrato de magnésio/TEOS	11	52	8	45	Etanol/água (70:30)	30,05
Etóxido de magnésio/TEOS	8	58	9	60	Etanol absoluto	30,15
Etóxido de magnésio/TEOS	9	60	9	50	Etanol absoluto	32,40

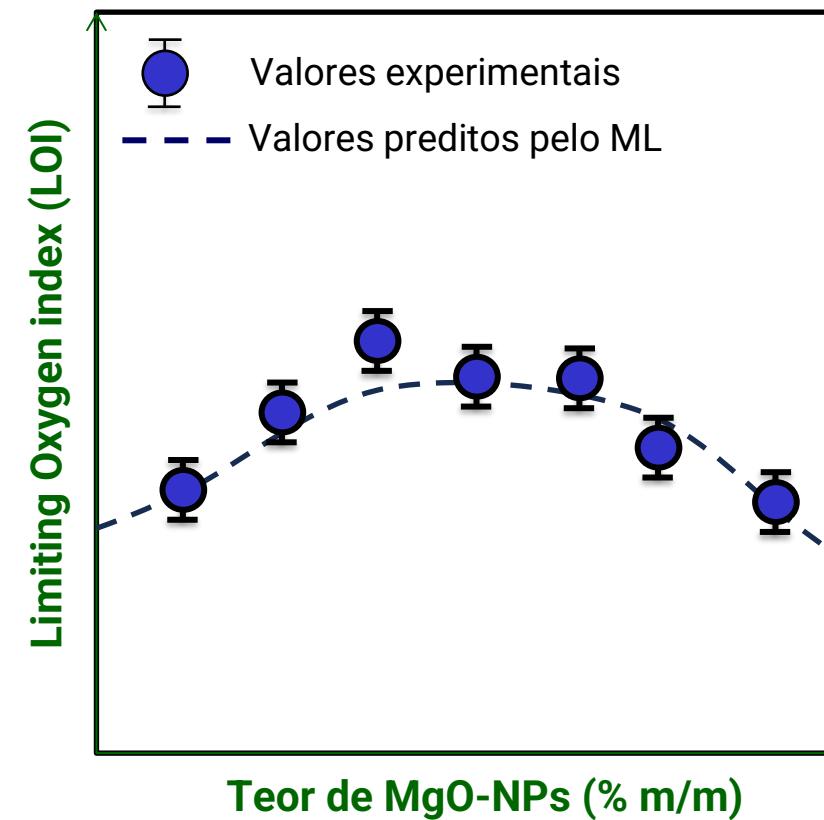
Predição das condições não testadas experimentalmente:

- **Condição 1:** Nitrato de magnésio/isopropóxido de Ti, 11% Mg, 52% Si, pH 9, T = 45°C
- **Condição 2:** Etóxido de magnésio/TEOS, 8% de Mg, 55% Si, pH 8, T = 45°C, etanol absoluto

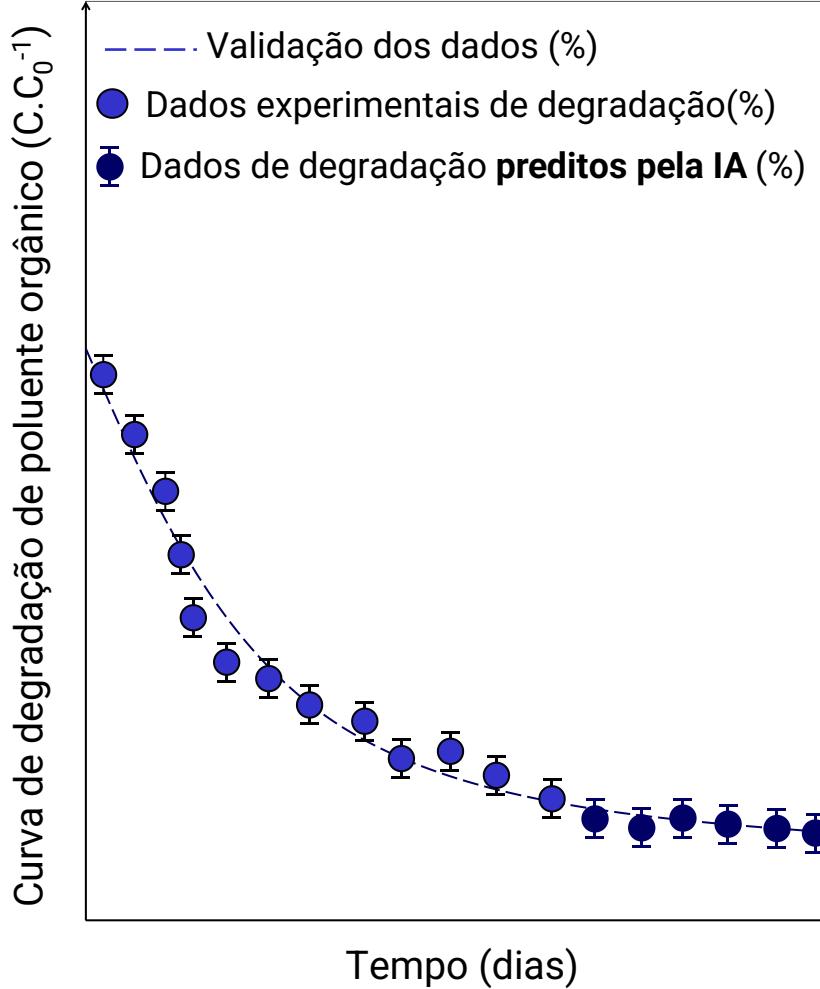
ML/DL → LOI ????

## Estudo de Caso 1

**Figura 3.** Análise gráfica obtida pelas previsões do ML.



## Estudos de casos



### Estudo de Caso 2

**Temática:** Avaliou-se a degradação de um polímero por 60 dias. Deseja-se verificar se haverá degradação após 80, 90, 100, 110 e 120 dias.

O ensaio utilizou radiação UV, constante que até 60 dias, **60% do polímero foi degradado**.

Deseja-se saber o se haverá alguma mudança significativa no valor de degradação polimérica após os 60 dias. Qual a eficiência de degradação desse polímero após 120 dias?

# Estudos de casos

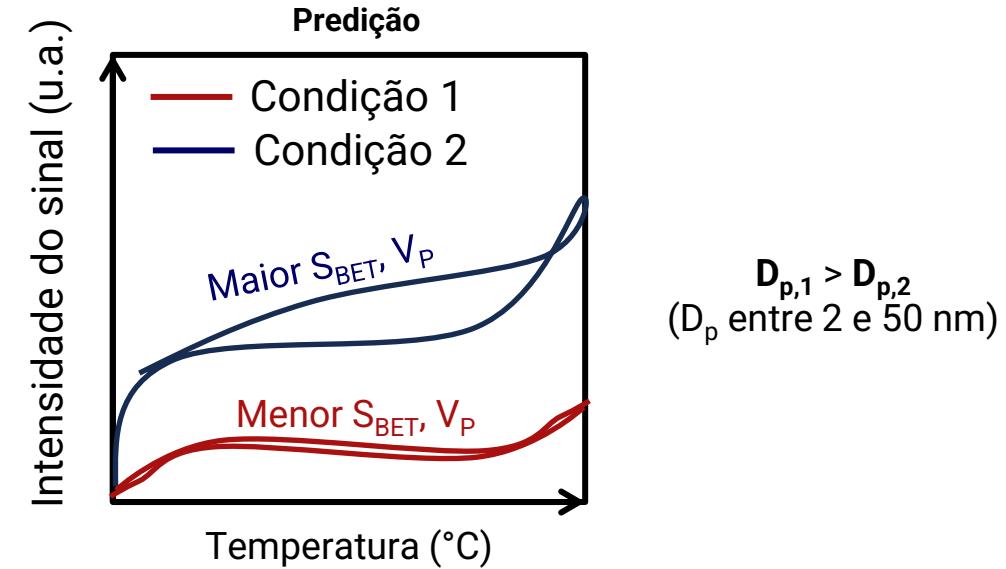
## Estudo de Caso 3

**Temática:** Otimização da síntese de um biovidro para melhorar a integração óssea e minimizar rejeições. Para isso, deseja-se prever qual será o desempenho mecânico e biológico antes desse biovidro anterior a sua fabricação. Para isso, realizou-se alguns experimentos pela síntese sol-gel, variando as condições de síntese, como pH, temperatura e fontes de cálcio e fósforo, avaliando ao final de cada síntese a porosidade ( $S_{BET}$ ,  $V_p$ ,  $D_p$ ) do biovidro obtido. Qual **síntese** e **precursores** irá resultar no biovidro com maior **porosidade** ( $S_{BET}$ ,  $V_p$ ,  $D_p$ ) e, consequentemente, maior bioatividade, osteointegração e desempenho mecânico?

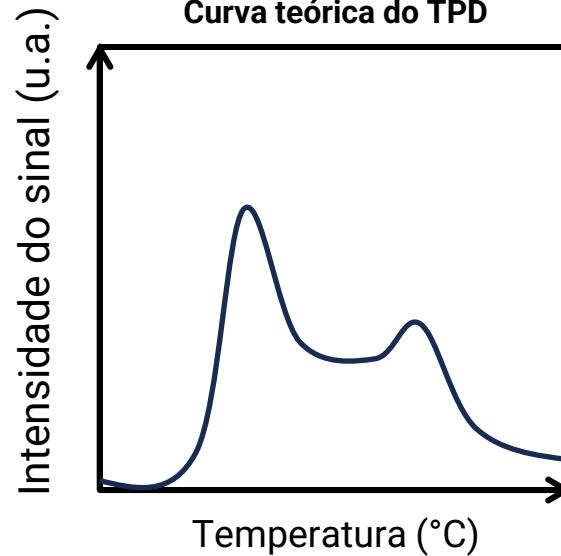
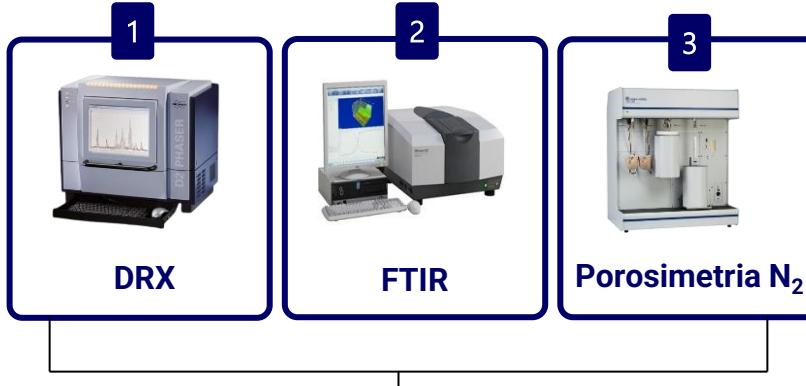
Fonte de Ca	Fonte de P	pH	T (°C)	$S_{BET}$ ( $m^2.g^{-1}$ )	$V_p$ ( $cm^3.g^{-1}$ )	$D_p$ (nm)
CaCO <sub>3</sub>	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	8	80	300	0.254	38.12
Ca(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	TEP	10	60	335	0.278	20.44
Ca(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	8	60	210	0.191	54.60
CaCO <sub>3</sub>	TEP	10	50	660	0.490	18.78

Predição das condições não testadas experimentalmente:

- Condição 1: CaCO<sub>3</sub>, H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, pH 9, T = 55°C
  - Condição 2: CaCO<sub>3</sub>, TEP, pH 9, T = 55°C
- $S_{BET}$ ,  $V_p$ ,  $D_p$  ????



## Estudos de casos



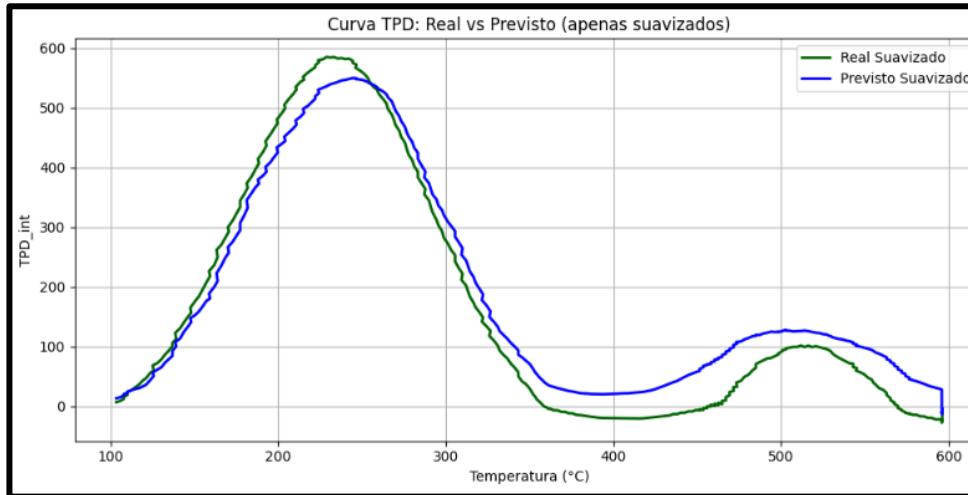
### Estudo de Caso 4

**Temática:** Há disponível um difratômetro de raios X (DRX), um espectrofotômetro no infravermelho por Transformada Fourier (FTIR) e um analisador de área (porosimetria de  $N_2$ ). Quero complementar os resultados dessas técnicas de caracterização com a técnica de Temperatura de Dessorção Programada (TPD) para determinar a acidez de um nanoadsorvente. No entanto, não há recursos financeiros nem disponibilidade do equipamento físico de TPD. Propõe-se a utilização de IA, com as técnicas acima e dados de TPD (retirados da literatura) para prever a curva TPD de um nanoadsorvente de interesse, cujos resultados de DRX, FTIR e Porosimetria de  $N_2$  estão disponíveis.

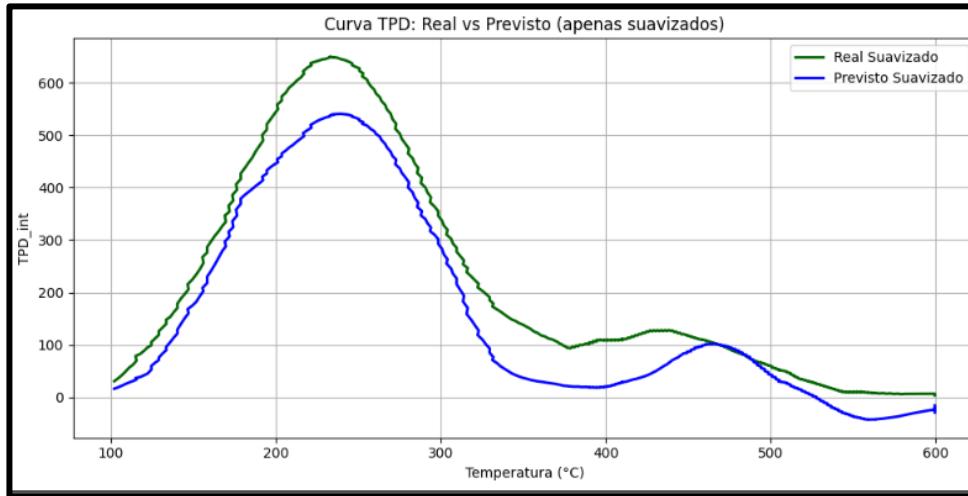
É possível **prever a curva TPD** para esse nanoadsorvente, tendo o resultado de caracterização das demais técnicas?

## Estudo de Caso 4

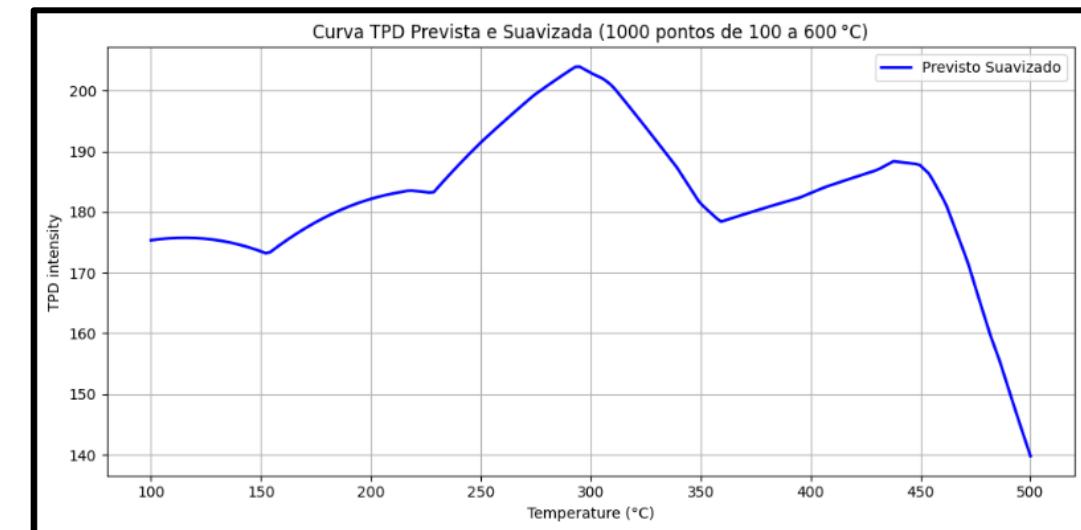
Predição 1. Nanozeólita FAU contendo 1% de Ni



Predição 2. Nanozeólita FAU contendo 10% de Ni



Predição 3. Nanozeólita FAU contendo 10% de Nb (amostra de interesse)



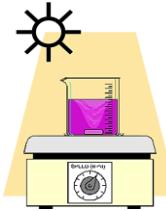
# Estudos de casos

1

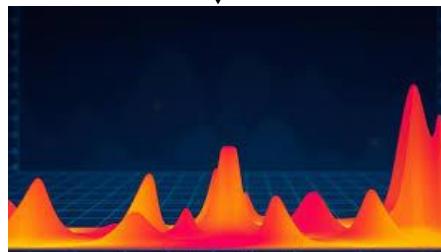


MEV-EDS

2



Fotocatálise heterogênea sob radiação vis.



## Estudo de Caso 5

**Temática:** Deseja-se prever a distribuição da acidez de nanomateriais (nanozeólita sodalita dopada com CuO-NPs) a partir de dados de fotocatálise heterogênea, imagens de microscopia eletrônica de varredura e composição elementar (espectroscopia de energia dispersiva).

### Dopagem

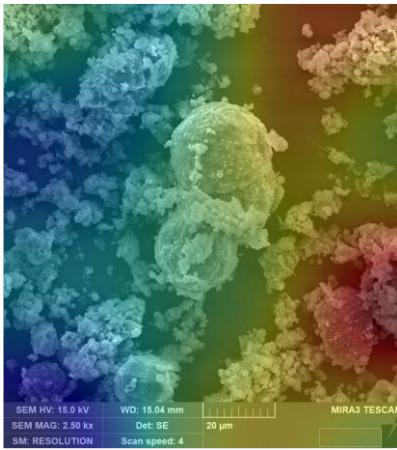
Incorporação de nanopartículas de CuO na estrutura zeolítica



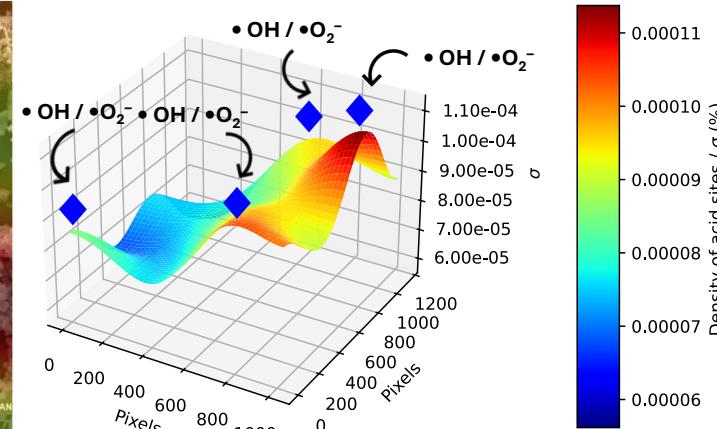
É possível **gerar um mapa de calor** para esse nanocatalisador, mostrando a distribuição de uma alguma propriedade (acidez total) sobre sua estrutura

## Predição 1. Acidez do nanocatalisador nSOD@CuO-NPs (4 pontos)

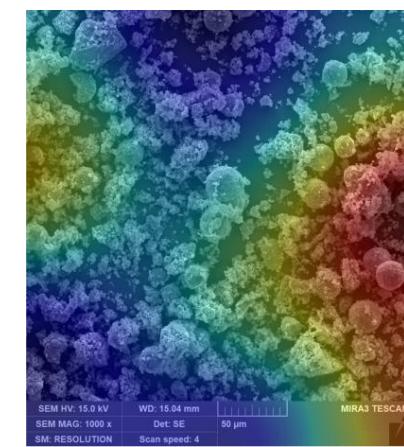
**Predicted  $\alpha = 1.179$**   
**Observed  $\alpha = 1.188$**



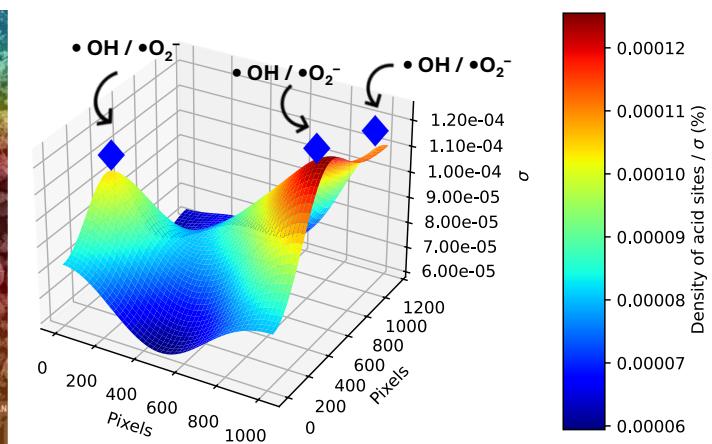
**Ponto 1 (predição 1)**



**Predicted  $\alpha = 0.189$**   
**Observed  $\alpha = 0.183$**

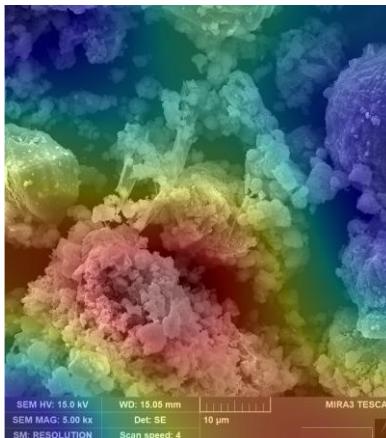


**Ponto 2 (predição 2)**

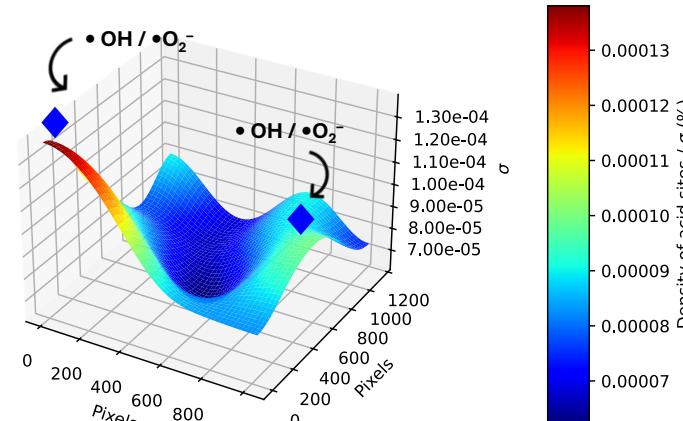


◆ Active sites available for the adsorption of target molecules (CV and MB dyes)

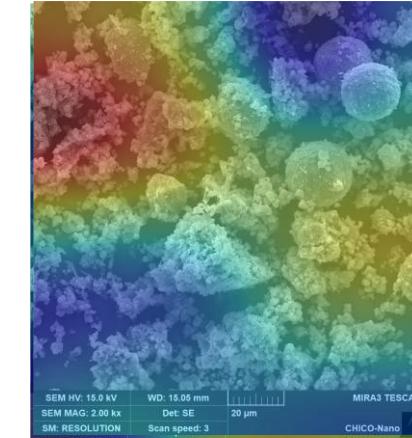
**Predicted  $\alpha = 1.923$**   
**Observed  $\alpha = 1.833$**



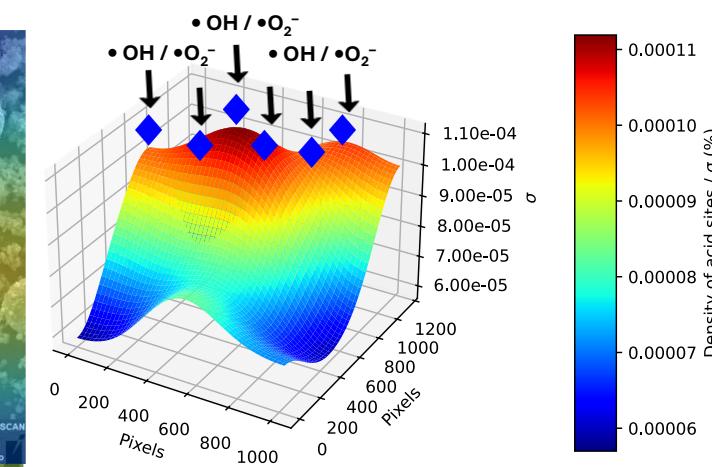
**Ponto 3 (predição 3)**



**Predicted  $\alpha = 1.014$**   
**Observed  $\alpha = 1.131$**



**Ponto 4 (predição 4)**

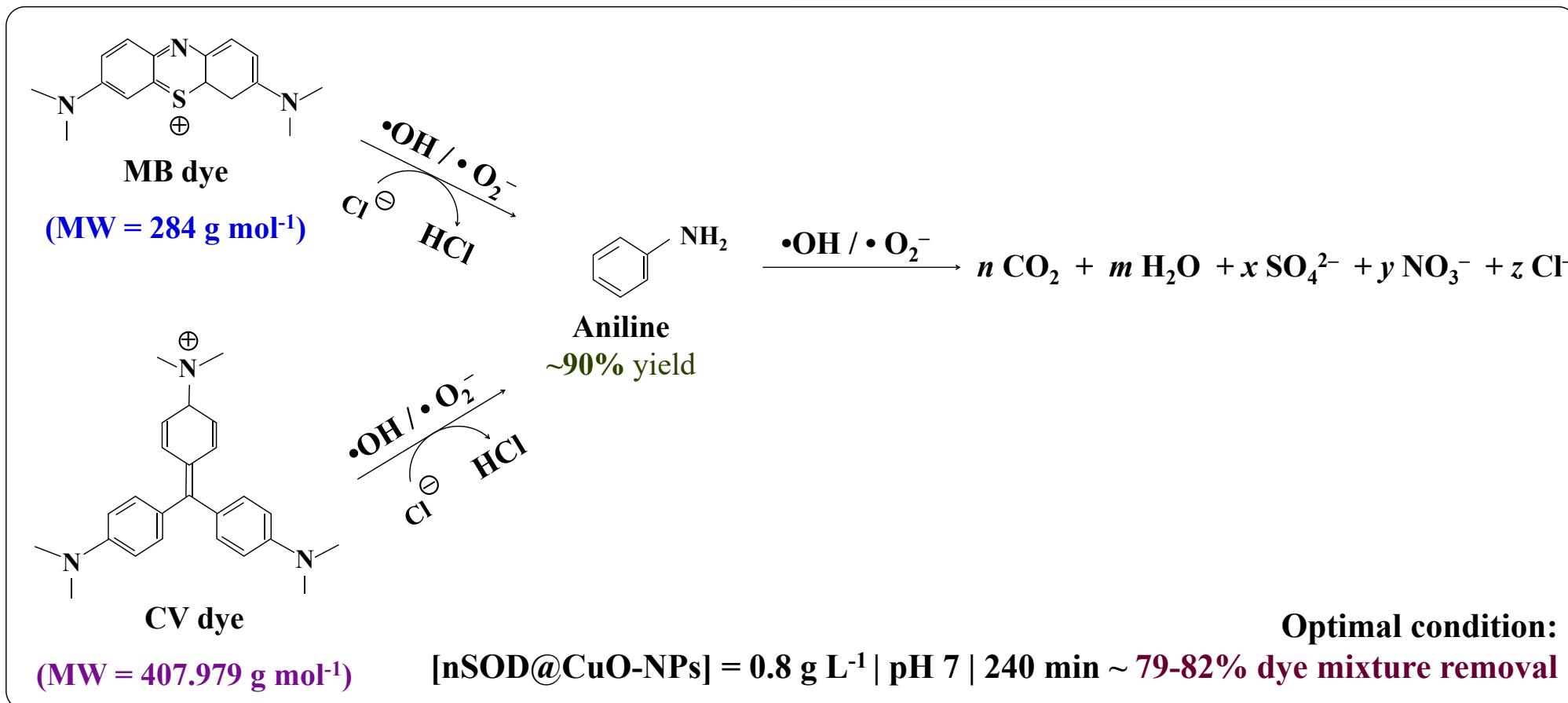


◆ Active sites available for the adsorption of target molecules (CV and MB dyes)

◆ Active sites available for the adsorption of target molecules (CV and MB dyes)

## Estudo de Caso 5

Reação química que ocorre nos sítios ativos (sítios ácidos) do nanocatalisador nSOD@CuO-NPs



## Vantagens e limitações

### Vantagens

- Redução de **tempo** e **recursos financeiros**;
- Realização de previsões com alta precisão/exatidão;
- Pode ser implementada a sistemas físicos complexos;
- Alta visibilidade no mercado de trabalho.



### Limitações

- Requer um **número relativamente alto** de **dados** (cerca de 80 linhas e  $n$  colunas, com  $n = 3, 4, 5....j$ );
- Alguns algoritmos de IA são modelos de **caixa-preta** (não se sabe o mecanismo por trás da previsão).



# Erros de overfitting/underfitting e seu impacto em generalizações

## Underfitting

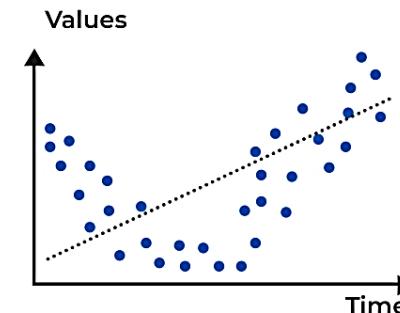
O modelo muito simples (algoritmo não aprende bem o padrão dos dados)

## Overfitting

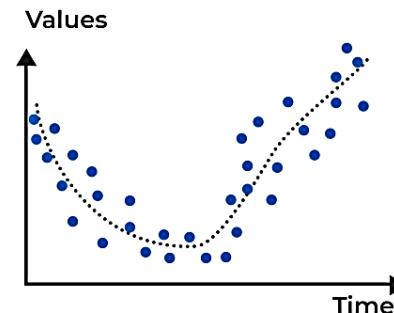
O modelo performa muito bem no treino, mas que generaliza mal para novos dados (“decora” os dados de treino)



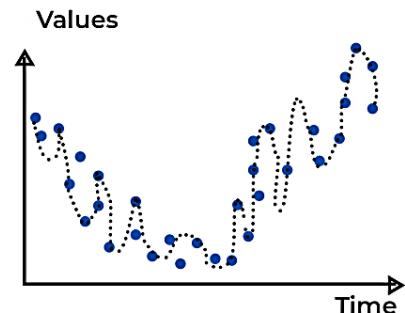
## Generalization and Overfitting



**Underfitted**  
(High bias error)



**Good Fit/R robust**  
(Balance between bias and variance)



**Overfitted**  
(High variance error)

Fonte: <https://analystprep.com/study-notes/cfa-level-2/quantitative-method/overfitting-methods-addressing/>

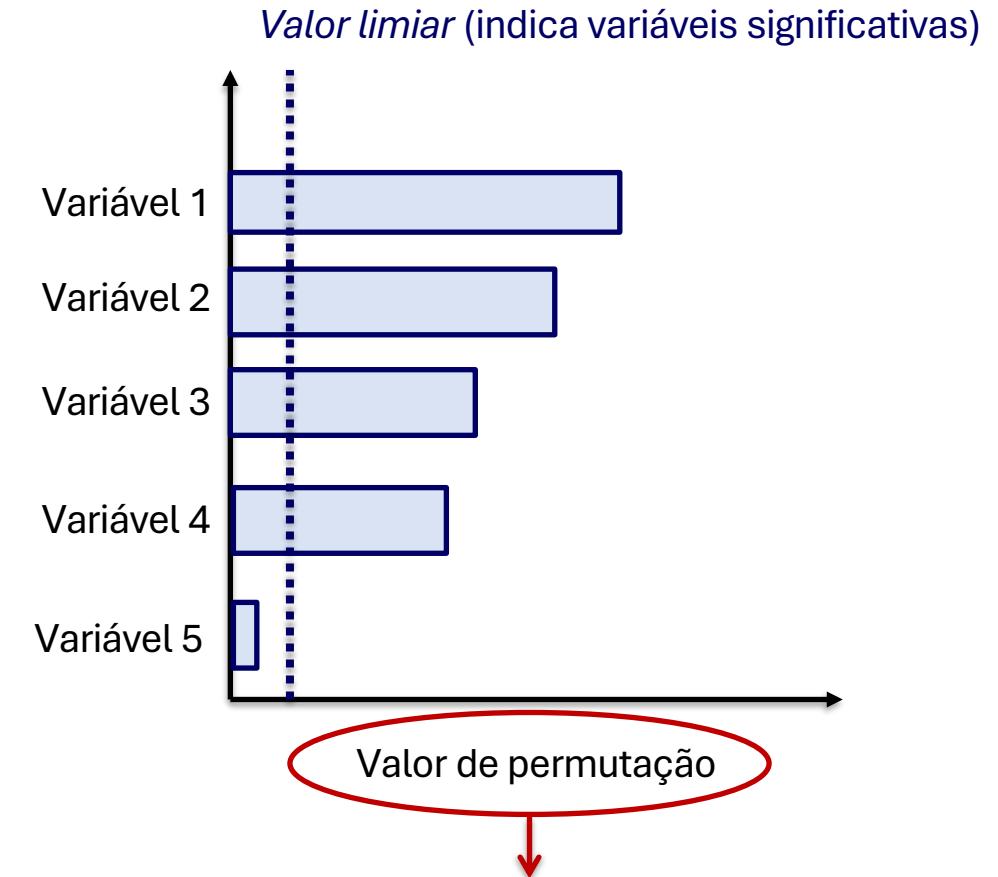
# Métricas para validação dos algoritmos e estudo de importância

## Métricas para validação de algoritmos de regressão

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_{i,exp} - y_{i,pred})^2}{\sum_{i=1}^N (y_{i,exp} - \hat{y}_{i,pred})^2} \quad (1)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_{i,exp} - \hat{y}_{i,pred})^2}{N}} \quad (2)$$

Onde:  $R^2$  é o coeficiente de determinação; RMSE é a raíz do erro quadrático médio;  $y_{i,exp}$  e  $\hat{y}_{i,pred}$  correspondem ao valor observado e valor predito para a variável resposta (duração do tratamento, expresso em semanas), N é o número de dados alimentados no modelo de predição.



# Métricas para validação dos algoritmos e estudo de importância

## Métricas para validação de algoritmos de classificação

$$\text{Accurácia} = \frac{PC}{N} \quad (3)$$

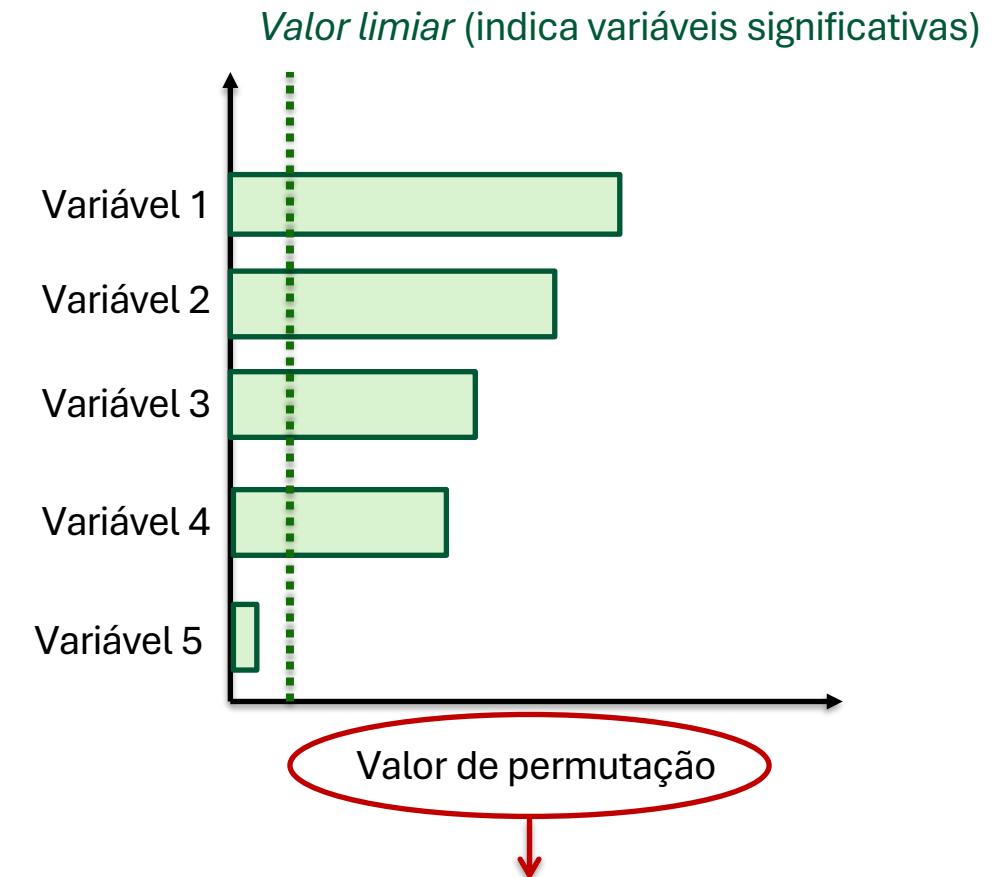
$$\text{Precisão} = \frac{TP}{TP + FP} \quad (4)$$

$$\text{Revocação} = \frac{TP}{TP + FN} \quad (5)$$

$$F1 = 2 \times \frac{(\text{precisão} \times \text{revocação})}{(\text{precisão} + \text{revocação})} \quad (6)$$

Onde: PC = previsões corretas; N = número total de previsões;

TP = total de positivos; FP = falsos positivos; FN = falsos negativos.



## Métricas para validação dos algoritmos e estudo de importância

---

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (1)$$

where  $y_i$  is the actual value,  $\hat{y}_i$  is the predicted value, and  $n$  is the number of data points. Good prediction accuracy corresponds to small  $MAE$  values. Mean squared error ( $MSE$ ) can be a valuable alternative to  $MAE$ :

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

However,  $MSE$  emphasizes larger errors more than smaller ones because of the squaring, and it is more sensitive than  $MAE$  to outliers. Root mean squared error ( $RMSE$ ) represents the square root of  $MSE$ :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

# Métricas para validação dos algoritmos e estudo de importância

---

This statistical metric transforms the units to match those of the original data. Also, lower values of *RMSE* indicate better accuracy. *R-Squared* ( $R^2$ ) indicates the proportion of the variance included in the dependent variable that is possible to predict from the independent variable:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2} \quad (4)$$

where  $\bar{y}$  is the mean of actual values.  $R^2$  can assume values ranging from 0 to 1, with 1 referring to a very reliable prediction. Particularly, a high  $R^2$  reveals that the model well explains most of the variance in the target. Mean absolute percentage error (*MAPE*) can be very useful; it immediately gives an idea about the prediction accuracy of the model as a percentage:

$$MAPE = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (5)$$

The adoption of such a statistical metric is suggested when the actual values are very small. Due to their definitions, *MSE*, *MAE*, and  $R^2$  are mostly suitable for regression tasks. Concerning classification tasks, the final objective is to predict discrete labels, and thus the accuracy factor is generally employed to evaluate the prediction performance of the algorithm:

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{True Positives} + \text{True Negatives}}{\text{Total Instances}} \quad (6)$$

# Apresentação de artigo científico – Estudo de casos

## Review que explora as aplicações e principais avanços na IA aplicado à tecnologia sol-gel

**Fonte:** Bifulco e Malucelli (2025) / doi: <https://doi.org/10.3390/molecules30143043>



Review

### AI/Machine Learning and Sol-Gel Derived Hybrid Materials: A Winning Coupling

Aurelio Bifulco<sup>1</sup> and Giulio Malucelli<sup>2,3,\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Chemical, Materials and Industrial Production Engineering (DICMaPI), University of Naples Federico II, Piazzale Tecchio 80, 80125 Napoli, Italy; aurelio.bifulco@unina.it

<sup>2</sup> Department of Applied Science and Technology, Politecnico di Torino, Viale Teresa Michel 5, 15121 Alessandria, Italy

<sup>3</sup> Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali (INSTM) Unit, Via G. Giusti 9, 50121 Florence, Italy

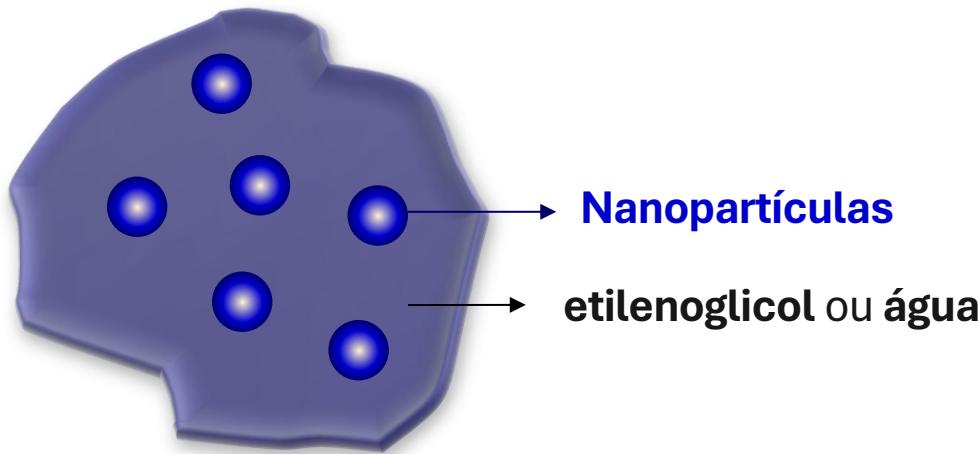
\* Correspondence: giulio.malucelli@polito.it; Tel.: +39-013-122-9369

#### Abstract

Experimental research in the field of science and technology of polymeric materials and their hybrid organic-inorganic systems has been and will continue to be based on the execution of tests to establish robust structure-morphology-property-processing correlations. Although absolutely necessary, these tests are often time-consuming and require specific efforts; sometimes, they must be repeated to achieve a certain reproducibility and reliability. In this context, the introduction of methods like the Design of Experiments (DoEs) has made it possible to drastically reduce the number of experimental tests required for a complete characterization of a material system. However, this does not seem enough. Indeed, further improvements are being observed thanks to the introduction of a very recent approach based on the use of artificial intelligence (AI) through the exploitation of a “machine learning (ML)” strategy: this way, it is possible to “teach” AI how to use literature data already available (and even incomplete) for material systems similar to the one being explored to predict key parameters of this latter, minimizing the error while maximizing the reliability. This work aims to provide an overview of the current, new (and up-to-date) use of AI/ML strategies in the field of sol-gel-derived hybrid materials.

**Keywords:** sol-gel method; hybrid materials; artificial intelligence; machine learning; decision trees; neural networks

# Explorando o review selecionado para investigação

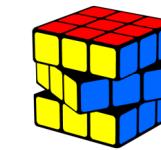


- $\text{Fe}_3\text{O}_4 + \text{TiO}_2$  (sol-gel) + rGO (Hummers) / etilenoglicol
  - Grande volume de dados (não lineares)
  - Diferentes T,
  - concentrações de *fillers* (% em volume)

Boosted Regression Tree (**BRT**)

Artificial Neural Network (**ANN**)

Support Vector Machine (**SVM**)



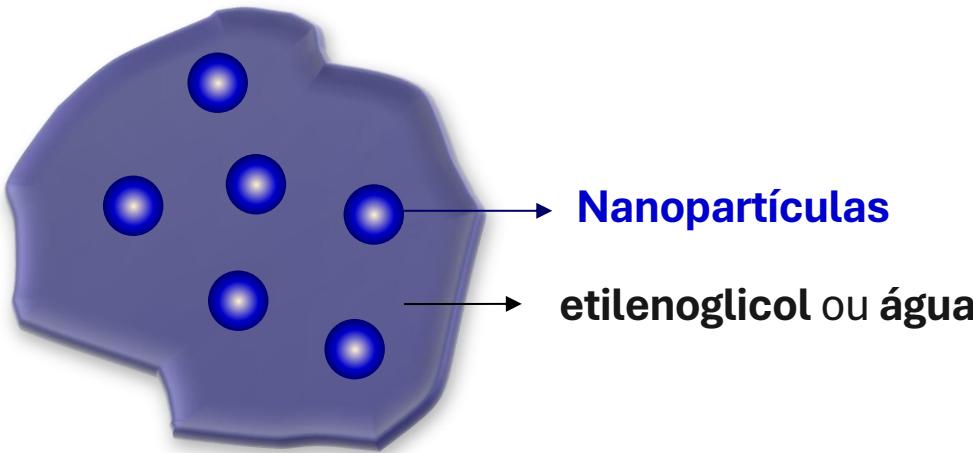
Predição

## Nanofluidos

- Utilizados em sistemas de refrigeração
- Armazenamento de energia
- Aquecimento

- Predição da **viscosidade** ( $\mu$ ) e **densidade** ( $\rho$ ) do nanofluido
- **Algoritmo de melhor desempenho:** BRT
- **Métricas:**  $R^2_{\text{treino}} = 0,9989$  /  $R^2_{\text{teste}} = 0,9979$

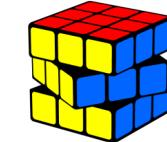
# Explorando o review selecionado para investigação



- $\text{Al}_2\text{O}_3$  (sol-gel) + GO (método Hummers) / água
  - Utilização de 3 surfactantes,
  - Investigação de diferentes T (30 – 60 °C),
  - concentrações de *fillers* (0,1 – 1% em volume)

Bayesian optimized support vector machine (**BoA-SVM**)

Bayesian optimized wide neural network (**BoWNN**)



Predição

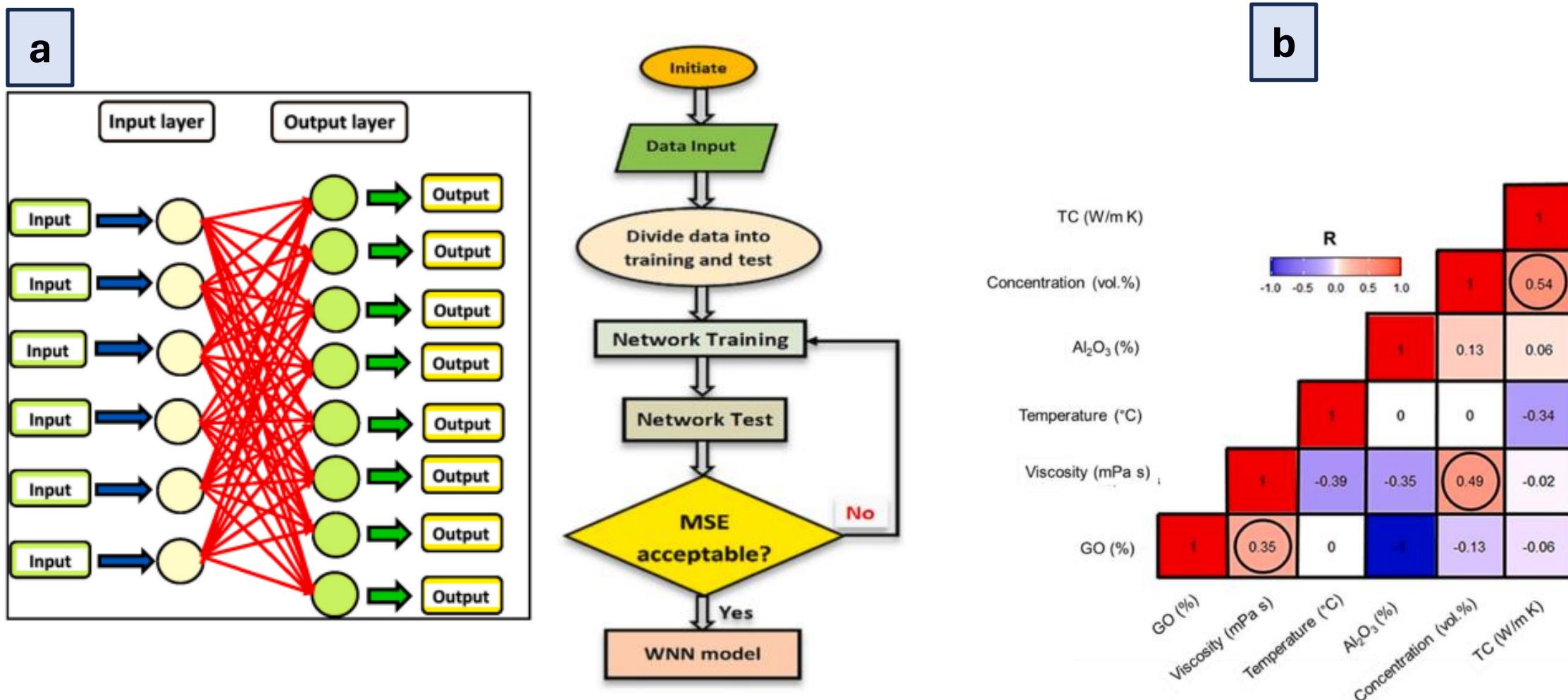
## Nanofluidos

- Utilizados em sistemas de refrigeração
- Armazenamento de energia
- Aquecimento

- Predição da **condutividade térmica** (k) e **viscosidade** ( $\mu$ ) do nanofluido
- **Algoritmo de melhor desempenho:** BRT
- **Métricas:**  $R^2_{\text{treino}} = 0,9991$  /  $R^2_{\text{teste}} = 0,9715$

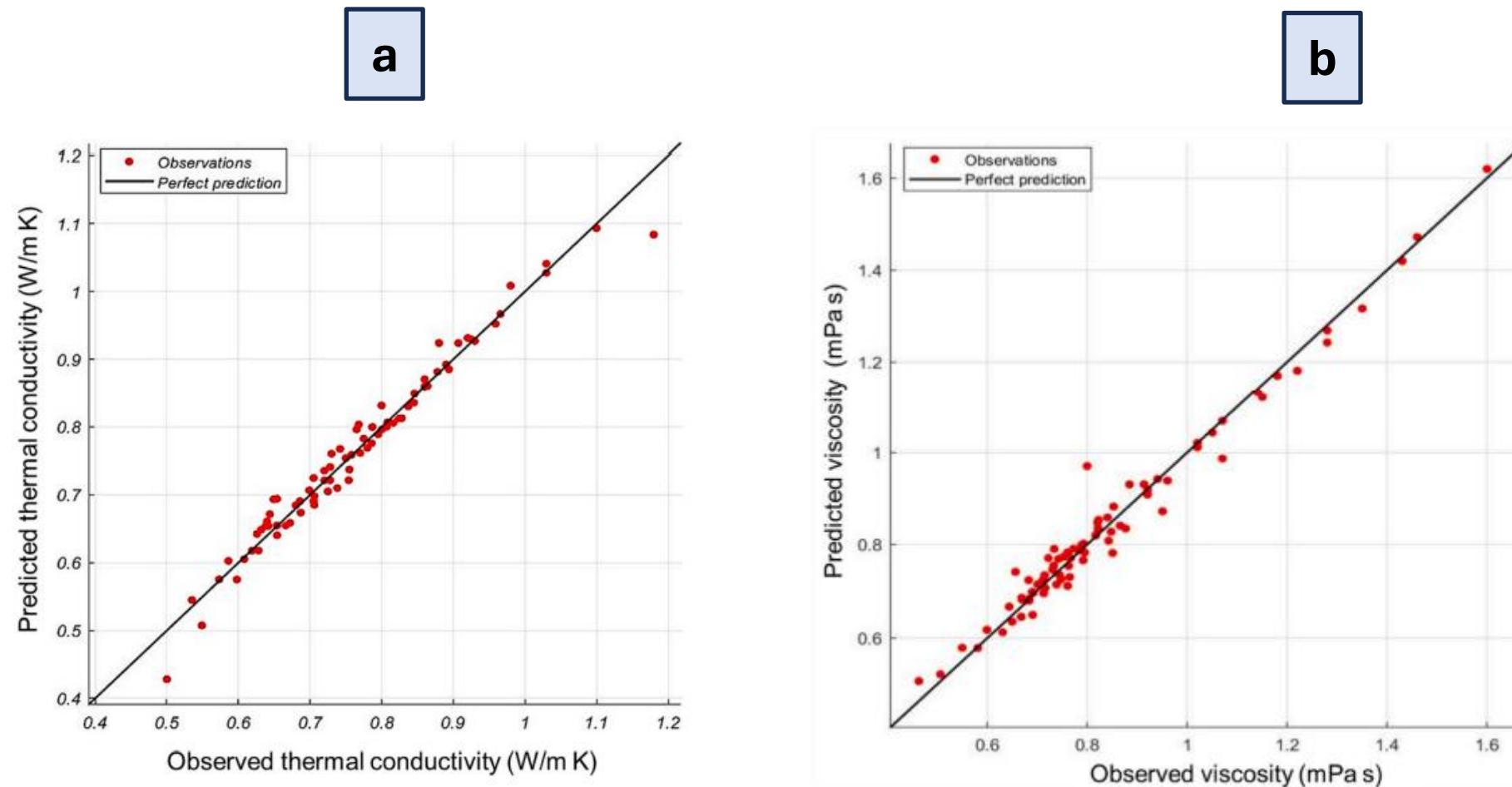
# Explorando o review selecionado para investigação

**Figura 5.** (a) Arquitetura e funcionamento do Wide Neural Network e (b) análise de correlação das variáveis.



# Explorando o review selecionado para investigação

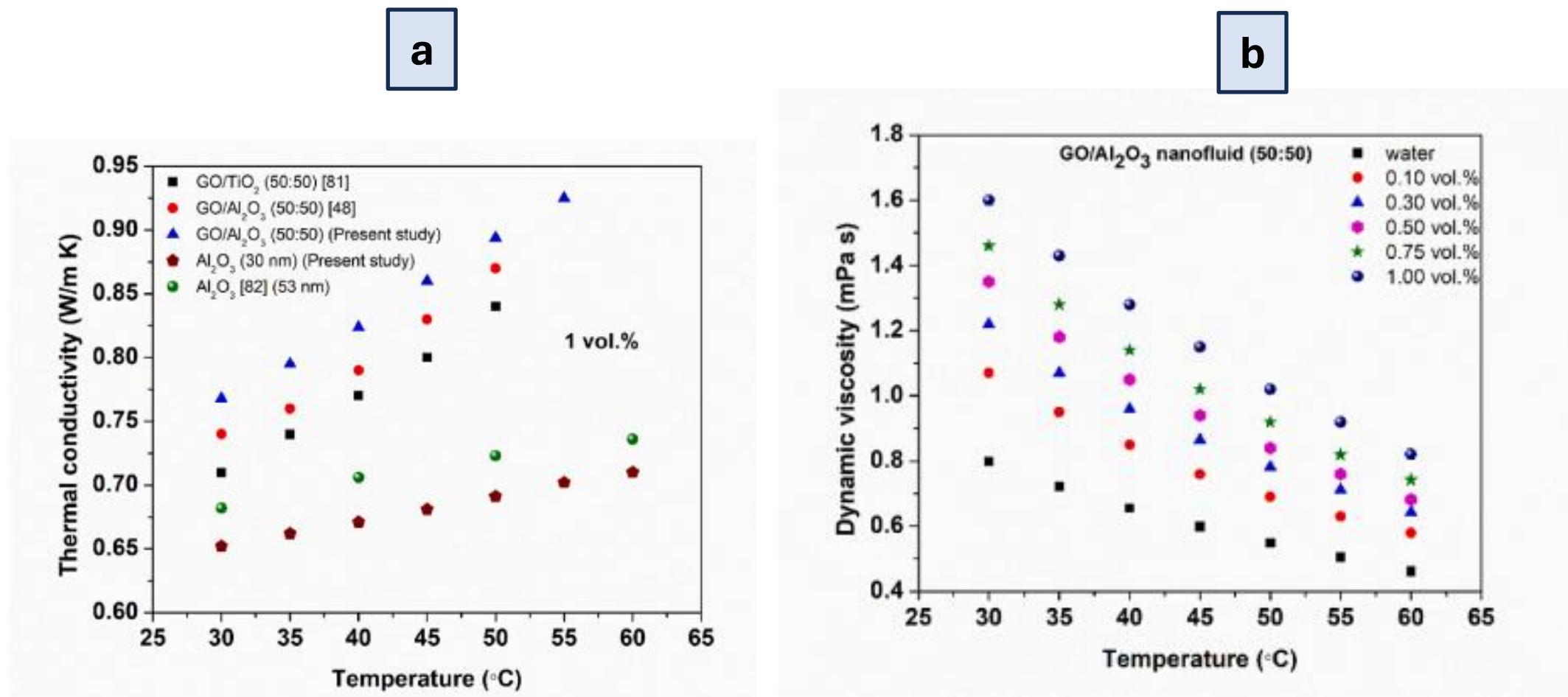
**Figura 6.** Parity plot para a predição da (a) condutividade térmica e (b) viscosidade do nanofluido.



Fonte: Kanti et al. (2022) / doi: <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2023.112207>

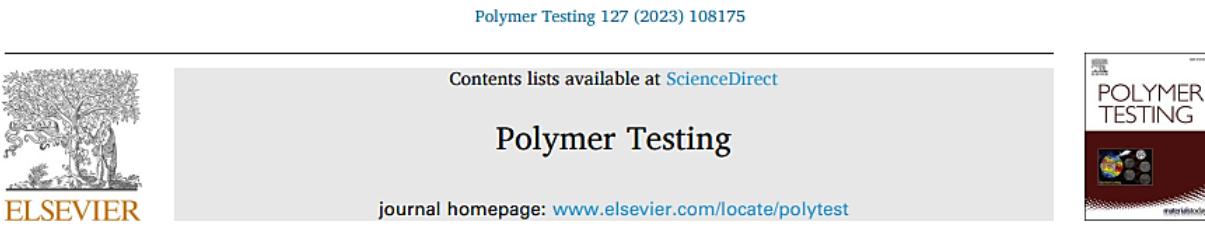
## Explorando o review selecionado para investigação

**Figura 7.** Predição da (a) condutividade térmica e comparação com a literatura; (b) predição viscosidade do nanofluido (50% carga).



Fonte: Kanti et al. (2022) / doi: <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2023.112207>

# Explorando o review selecionado para investigação



A machine learning tool for future prediction of heat release capacity of in-situ flame retardant hybrid Mg(OH)<sub>2</sub>-Epoxy nanocomposites

Aurelio Bifulco <sup>a</sup>, Angelo Casciello <sup>a</sup>, Claudio Imparato <sup>a</sup>, Stanislao Forte <sup>b</sup>, Sabyasachi Gaan <sup>c</sup>, Antonio Aronne <sup>a</sup>, Giulio Malucelli <sup>d,\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemical Materials and Production Engineering (DICMaPI), University of Naples Federico II, Piazzale V. Tecchio 80, 80125, Naples, Italy

<sup>b</sup> Software Care Srl, Via Servio Tullio, 106, 80126, Naples, Italy

<sup>c</sup> Laboratory for Advanced Fibers, Empa Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Lerchenfeldstrasse 5, 9014, St. Gallen, Switzerland

<sup>d</sup> Department of Applied Science and Technology, Politecnico di Torino, Viale Teresa Michel 5, Alessandria, 15121, Italy

doi: <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2023.108175>

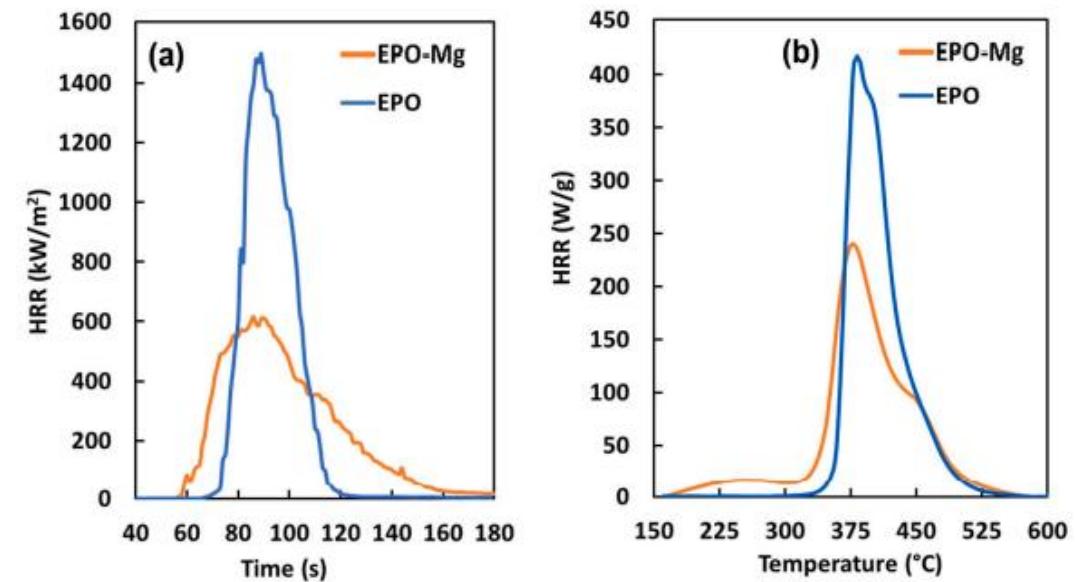


Fig. 2. Heat release rate (HRR) curves of samples measured using (a) cone calorimeter and (b) pyrolysis combustion flow calorimetry (PCFC).

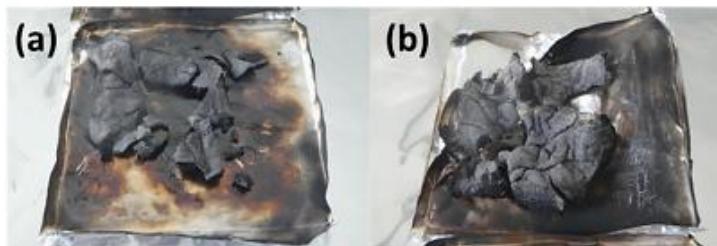
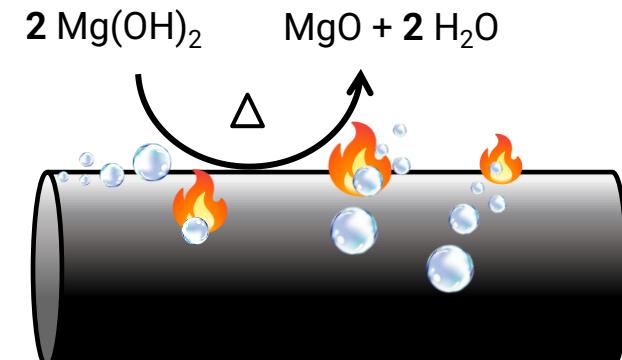
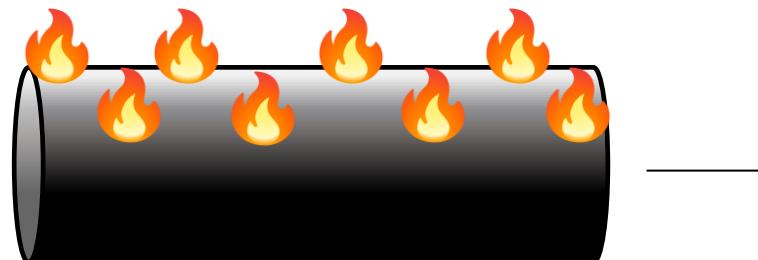


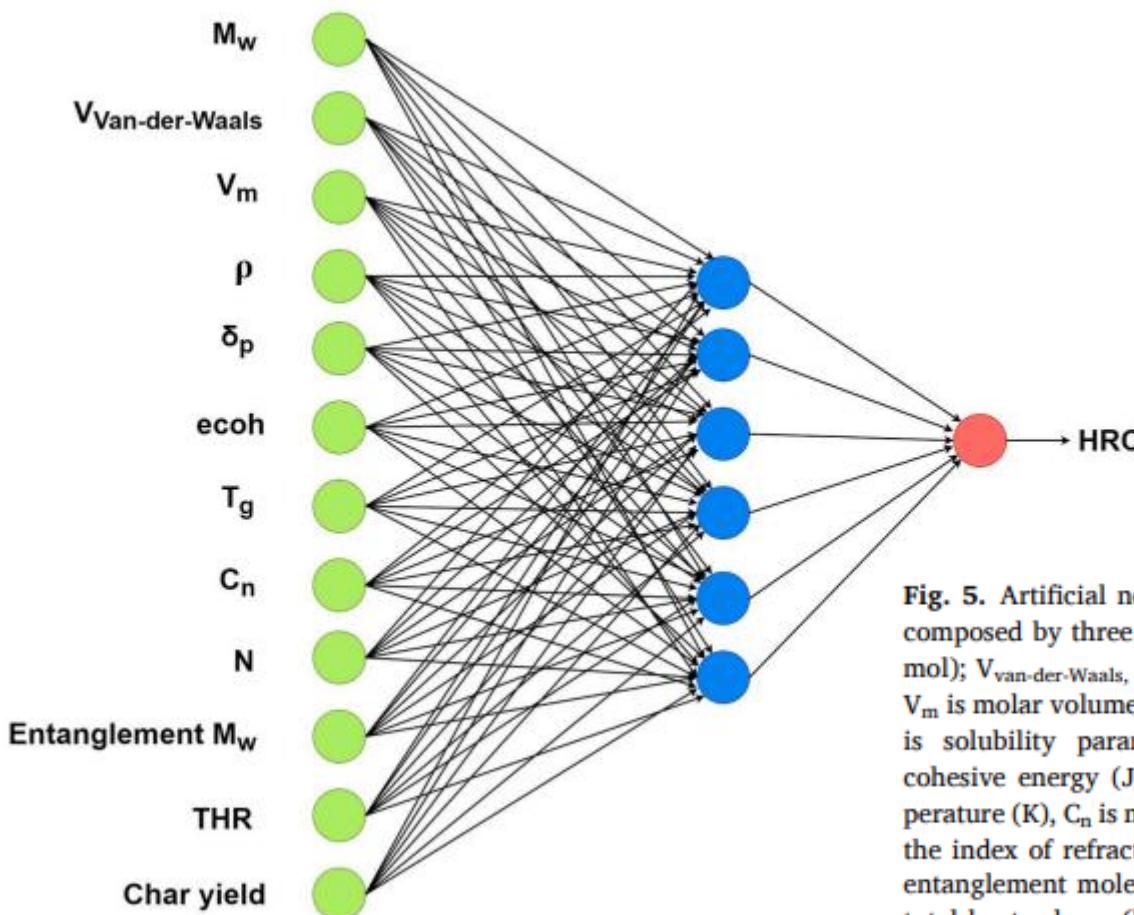
Fig. 3. Photographs of the char residues obtained after cone calorimetry tests for (a) EPO and (b) its hybrid nanocomposite (EPO-Mg).



Polímero (epóxi) contendo retardante de chamas

# Explorando o review selecionado para investigação

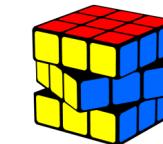
**Figura 8.** Arquitetura da rede neural artificial utilizada para prever a capacidade de liberação de calor do antichamas.



**Fig. 5.** Artificial neural network model architecture composed by three layers.  $M_w$ , molecular weight (g/mol);  $V_{\text{Van-der-Waals}}$ , Van-der-Waals volume (mL/mol),  $V_m$  is molar volume (mL/mol),  $\rho$  is density (g/mL),  $\delta_p$  is solubility parameter ( $\text{MPa}^{1/2}$ ),  $\text{ecoh}$  is molar cohesive energy (J/mol),  $T_g$  is glass transition temperature (K),  $C_n$  is molar heat capacity (J/mol-K),  $N$  is the index of refraction and entanglement,  $M_w$  is the entanglement molecular weight (g/mol), THR is the total heat release (kJ/g), HRC is the heat release capacity (J/g-K).

K-Nearest Neighbors (**KNN**)

Artificial Neural Network (**ANN**)



Predição

- Nanocompósito com melhor desempenho: **epóxi contendo 5% de nanopartículas de  $\text{Mg(OH)}_2$**
- Redução de 34% da **taxa de liberação de calor** do nanocompósito
- Obtenção de um bom supressores de fumaça

Métricas do algoritmo ANN:

- MAE = 145,6
- RMSE = 186,1
- Valor predito para **HRC = 273 J/(g.K)**
- Valor experimental para **HRC = 281 J(g.K)**

# Explorando o review selecionado para investigação

Food Bioscience 56 (2023) 103313



Contents lists available at ScienceDirect

Food Bioscience

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/fbio](http://www.elsevier.com/locate/fbio)



## Enhancing salmon freshness monitoring with sol-gel cellulose nanocrystal colorimetric paper sensors and deep learning methods



Peihua Ma<sup>a</sup>, Xiaoxue Jia<sup>a</sup>, Wenhao Xu<sup>b</sup>, Yiyang He<sup>a</sup>, Kevin Tarwa<sup>a</sup>, Mazen O. Alharbi<sup>c</sup>,  
Cheng-I Wei<sup>a</sup>, Qin Wang<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Nutrition and Food Science, College of Agriculture and Natural Resources, University of Maryland, College Park, MD, 20742, United States

<sup>b</sup> Department of Chemistry and Biochemistry, College of Computer, Mathematical and Natural Science, University of Maryland, College Park, MD, 20742, United States

<sup>c</sup> King Abdulaziz City for Science and Technology, Riyadh, 11442, Saudi Arabia

doi: <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2023.103313>

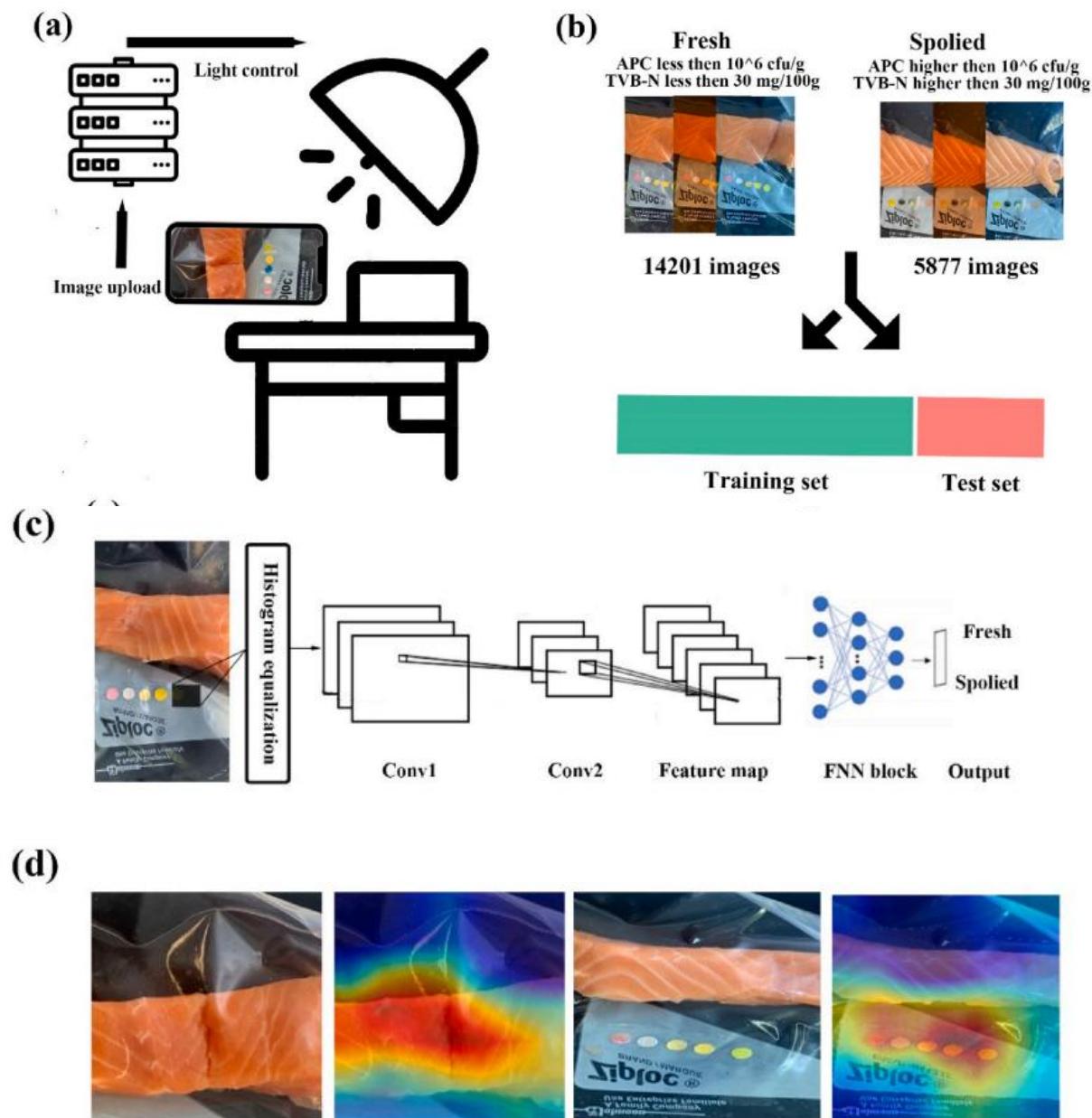
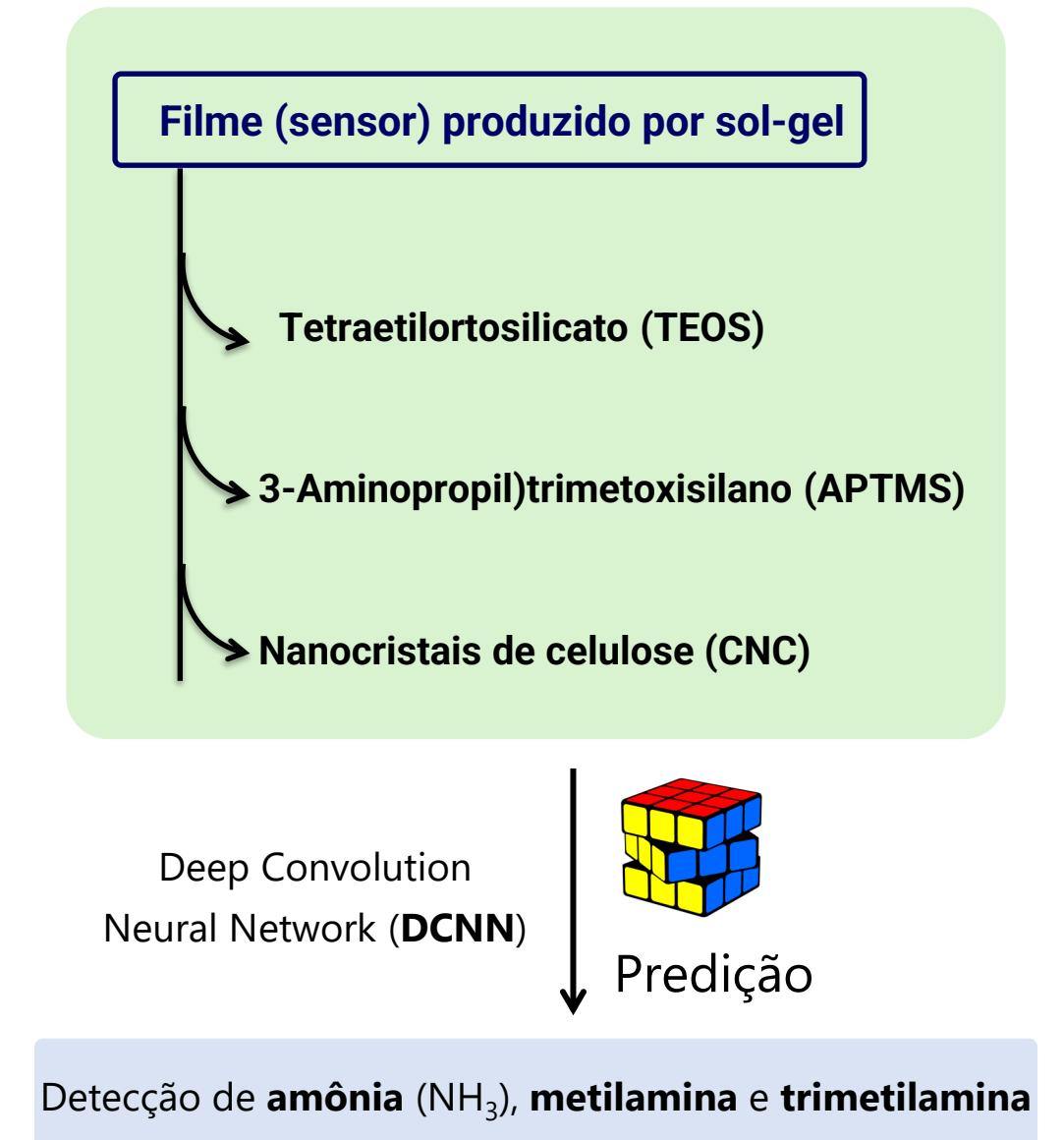


Fig. 5. Workflow of salmon freshness database construction and DCNN algorithm training.

GradCAM result of extract feature from image region. (a) The schematic diagram for image collection; (b) dataset preprocessing; (c) architecture of classifier DCNN models; (d) Grad-CAM result for solitary salmon (left two) and contact salmon with sensor array (right two).



Límite de detecção ( $\text{NH}_3$ ) ~17 ppm / precisão = 99,2%

# Explorando o review selecionado para investigação

Progress in Organic Coatings 174 (2023) 107296



Contents lists available at ScienceDirect

Progress in Organic Coatings

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/porgcoat](http://www.elsevier.com/locate/porgcoat)



Corrosion resistance enhancement of a sol-gel coating by incorporation of modified carbon nanotubes: Artificial neural network (ANN) modeling and experimental explorations

Sajjad Akbarzadeh <sup>a,b</sup>, Kazem Akbarzadeh <sup>c</sup>, Mohammad Ramezan-zadeh <sup>d</sup>, Reza Naderi <sup>a,\*</sup>, Mohammad Mahdavian <sup>d</sup>, Marie-Georges Olivier <sup>b,\*</sup>

<sup>a</sup> School of Metallurgy and Materials Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran

<sup>b</sup> Department of Materials Science, Faculty of Engineering, University of Mons, 20 Place du Parc, 7000 Mons, Belgium

<sup>c</sup> Abadan Faculty of Petroleum Engineering, Petroleum University of Technology, Abadan, Iran

<sup>d</sup> Department of Surface Coatings and Corrosion, Institute for Color Science and Technology, P.O. Box 16765-654, Tehran, Iran

doi: <https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2022.1072966>

Implementação de uma rede neural simples (ANN) para predição a parte imaginária da impedância do revestimento modificado com nanotubos de carbono  
(Predição da resistência à corrosão)

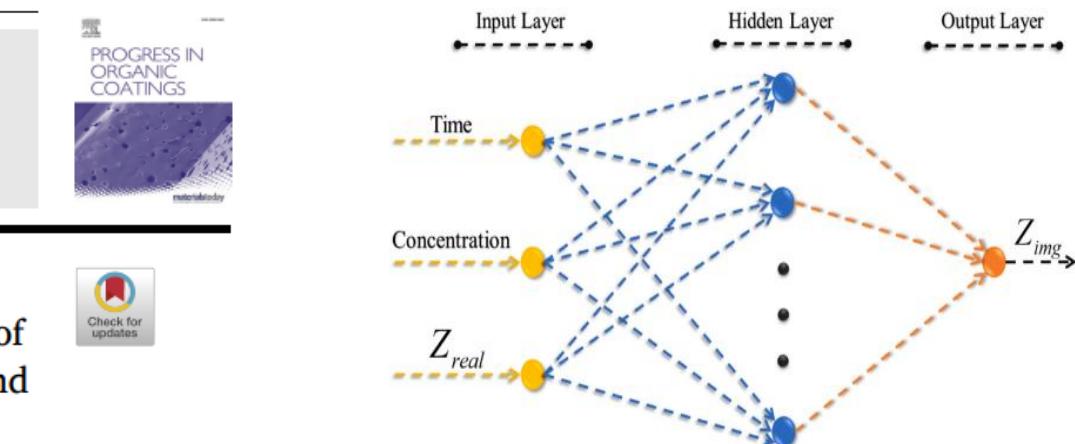


Fig. 10. The topological structure of the ANN model.

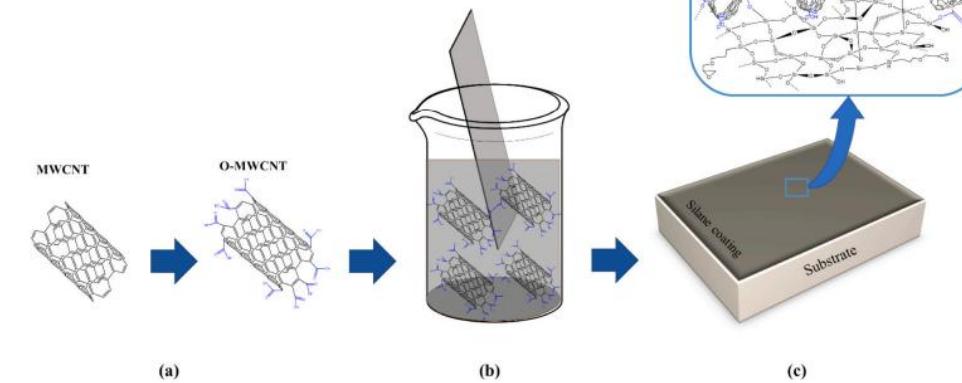
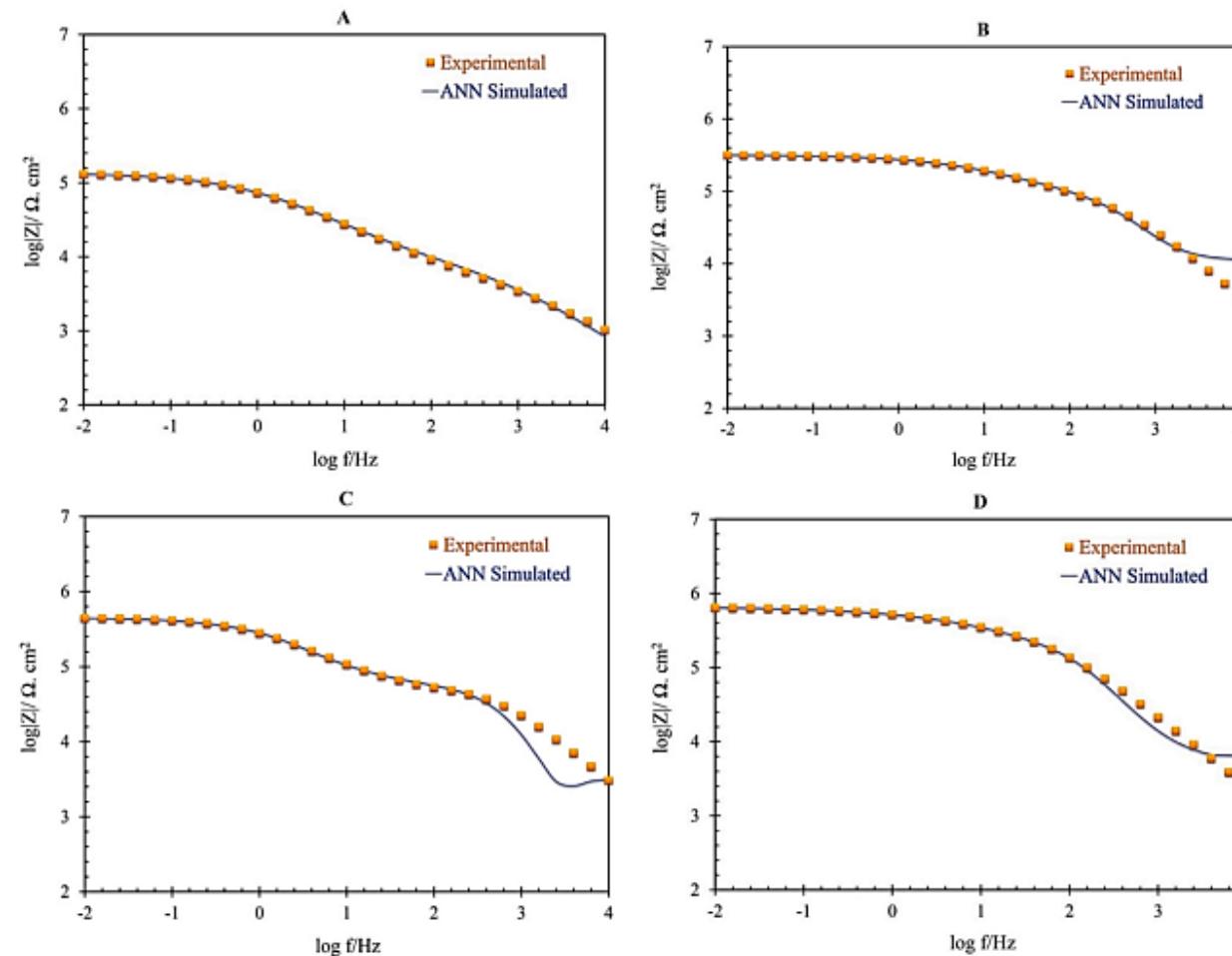


Fig. 1. Schematic illustration of the oxidizing step (a), dip-coating of mild steel panels in silane solution along with O-MWCNTs nanomaterials (b), and the fabricated silane-based nanocomposite coating (c).

# Explorando o review selecionado para investigação

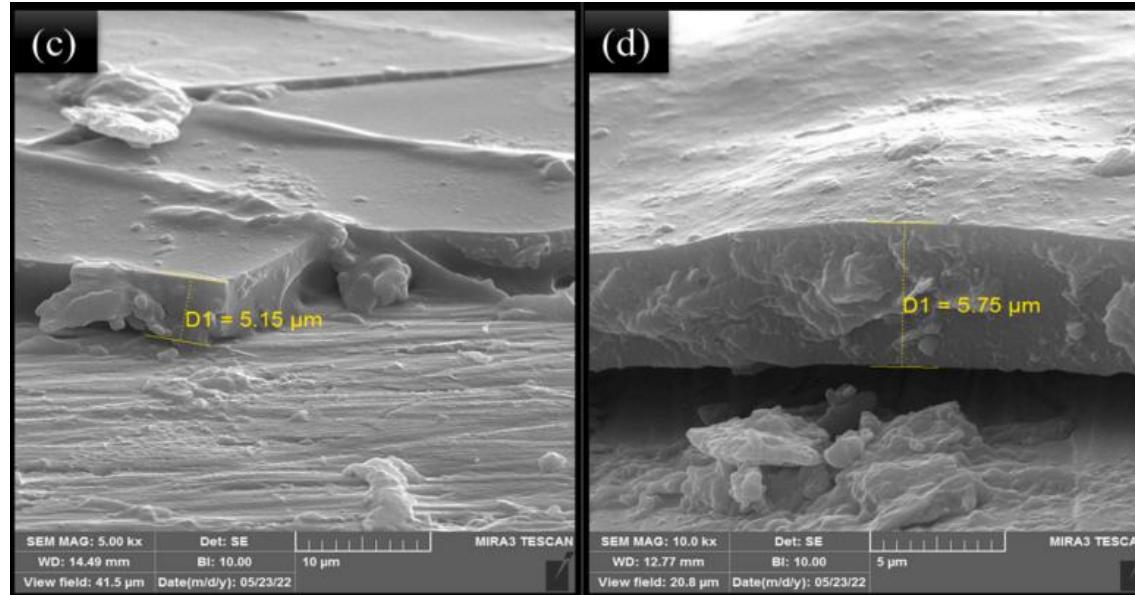
**Figura 9.** Comparação entre valores preditos pelo algoritmo ANN e valores experimentais.



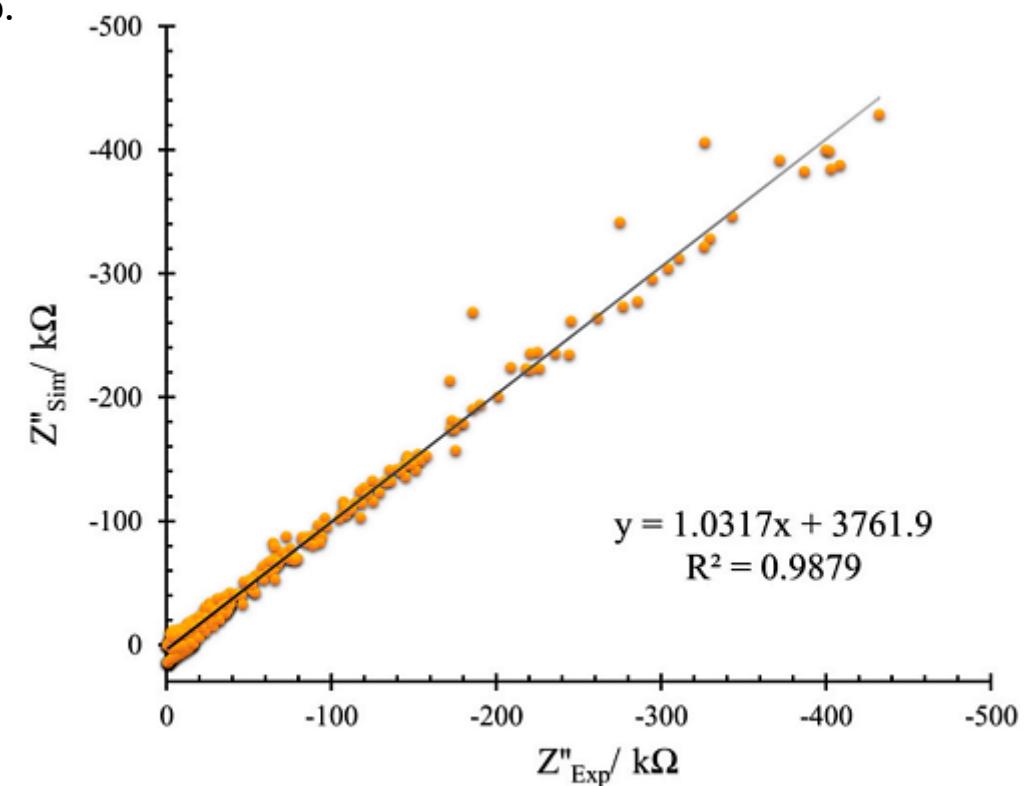
**Fig. 13.** The comparison of the simulated and experimental data in the Bode diagram related to Sil-C1 after 3 h (A), Sil-C2 after 6 h (B), Sil-C3 after 24 h (C), and Sil-C4 after 24 h (D).

# Explorando o review selecionado para investigação

**Figura 10.** MEV-FEG do material com revestimento resistente à corrosão; (c) nanotubo contendo 0,6% de silano; (d) nanotubos contendo 0,9% de silano.



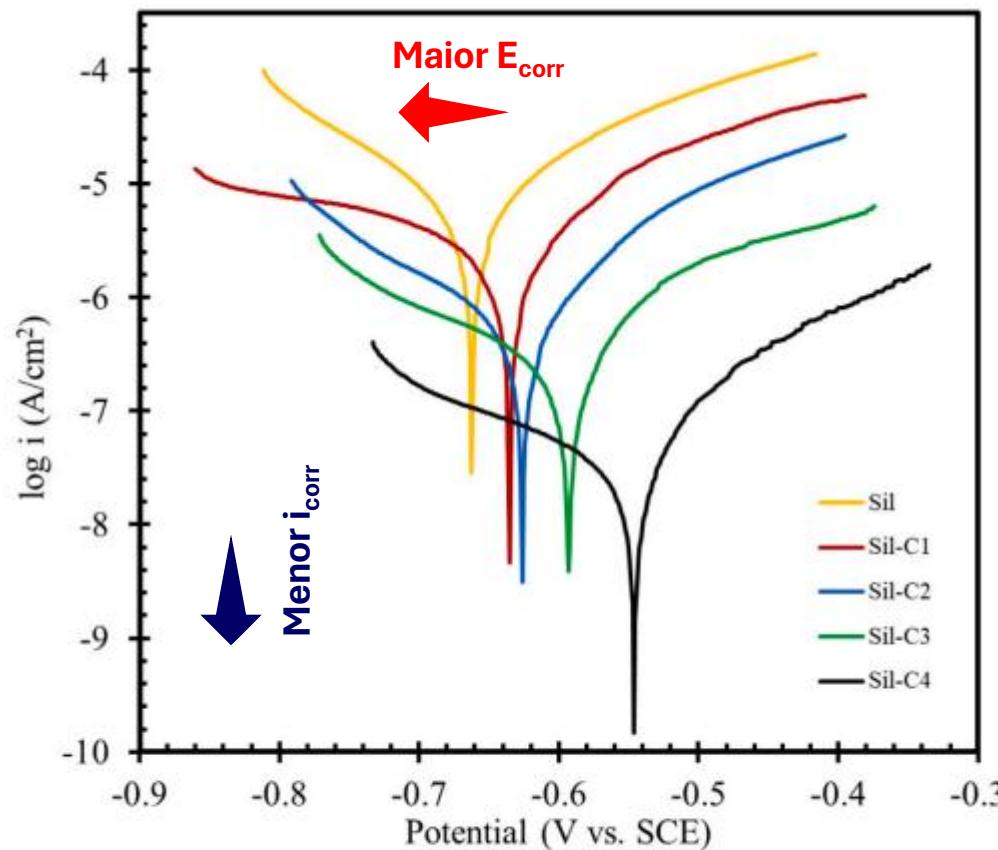
**Figura 11.** Parity plot para o componente reativo da impedância: Valores preditos versus valores experimentais



**Fig. 14.** The linear regression line between the predicted and experimental imaginary component of impedance.

# Explorando o review selecionado para investigação

**Figura 12.** Curvas de polarização dos revestimentos de sílica contendo NTCs.



**Sil** (silano) / Sem adição de MWCNTs.

**Sil-C1** (silano contendo **0,05%** de MWCNTs)

**Sil-C2** (silano contendo **0,3%** de MWCNTs)

**Sil-C3** (silano contendo **0,6%** de MWCNTs)

**Sil-C1** (silano contendo **0,9%** de MWCNTs)

A Fig. 15 confirma de forma inequívoca que a incorporação do modificador (**NTCs**) é **altamente eficaz**. A formulação **Sil-C4** é a que fornece a **melhor proteção contra a corrosão**, pois reduz drasticamente a taxa de corrosão do substrato metálico.

Imersão em **NaCl** (tempo de **24 h**)

**Fig. 15.** Polarization curves of different silane-based coatings after 24 h immersion in 0.1 M NaCl solution.

# GRATO PELA ATENÇÃO!



Contato | [leandro.oviedo@ufn.edu.br](mailto:leandro.oviedo@ufn.edu.br)

