

Programa de Pós-Graduação em
Nanociências



Introdução aos algoritmos de inteligência artificial (IA) na ciência dos materiais retardantes de chamas: *Machine* (ML) e *Deep Learning* (DL) aplicado à síntese e otimização de retardantes de chamas

EDITAL FAPERGS 06/2024 - PROGRAMA DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO VOLTADO A DESASTRES CLIMÁTICOS

Leandro Rodrigues Oviedo
Engenheiro Químico
Doutor em Nanociências – UFN



GRUPO DE PESQUISA
EM NANOMATERIAIS APLICADOS

Tópicos abordados

Conceitos gerais – Combustão / O que é aprendizado de máquina (*machine learning* – ML)

Retardantes de chamas e mecanismos de supressão de chamas

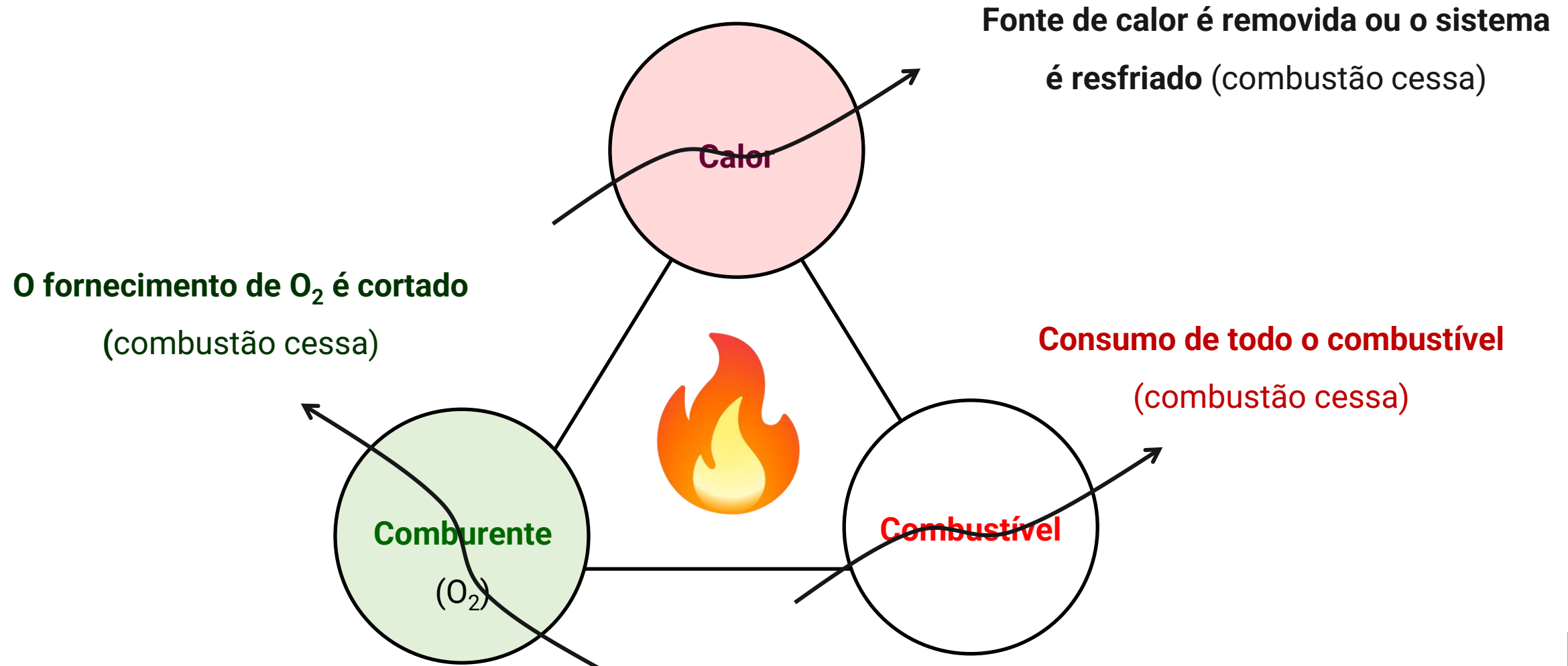
Funcionamento dos algoritmos de ML e DL

Quando utilizar algoritmos de IA?

Vantagens e limitações / Estudos de casos

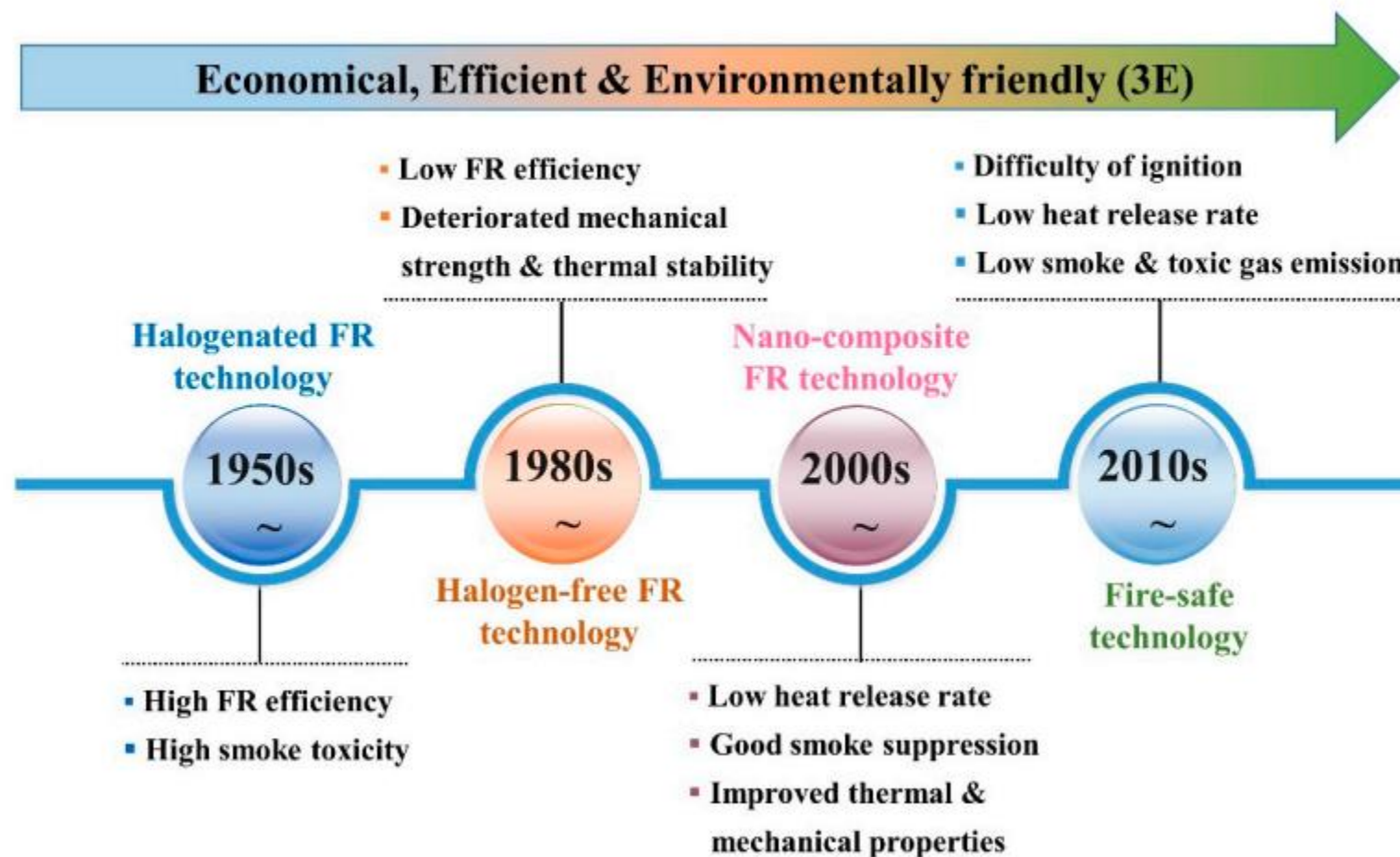
Combustão

Tríade da combustão



Retardante de chamas

Figura 1. Estágios de desenvolvimento de materiais poliméricos retardantes de chamas.



Retardante de chamas

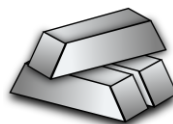
Hidróxidos metálicos

- $\text{Mg}(\text{OH})_2$
- $\text{Al}(\text{OH})_3$



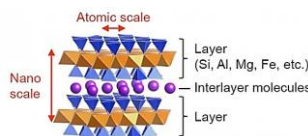
Óxidos metálicos e nanocristais

- MgO / PbS
- TiO_2 / SiO_2
- ZnO / CeO_2
- SnO



Argilas

- Bentonita modificada com montmorilonita
- Cloisite 30A
- Zeólitas



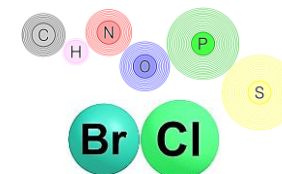
Compostos fosforados e nitrogenados

- Polifosfato de alumínio (APP)
- Algodão/fibras com aditivos
- Melamina



Compostos halogenados/organofosforados

- Polibromodifenil éteres (PBDEs)
- Tetrabromobisfenol A (TBBPA)
- Decabromodifenil éter (decaBDE)

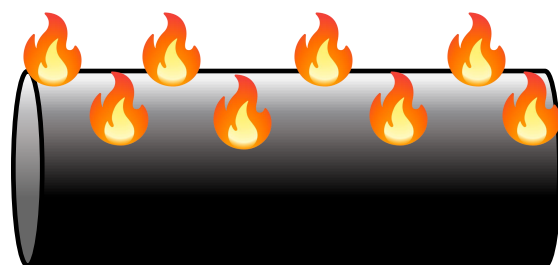


Mecanismos de supressão de chamas

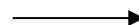
Formação de barreira física que bloqueiam o calor e oxigênio

Retardantes de chamas que atuam com esse mecanismo

- TiO_2
- MgO
- Argilas organofílicas

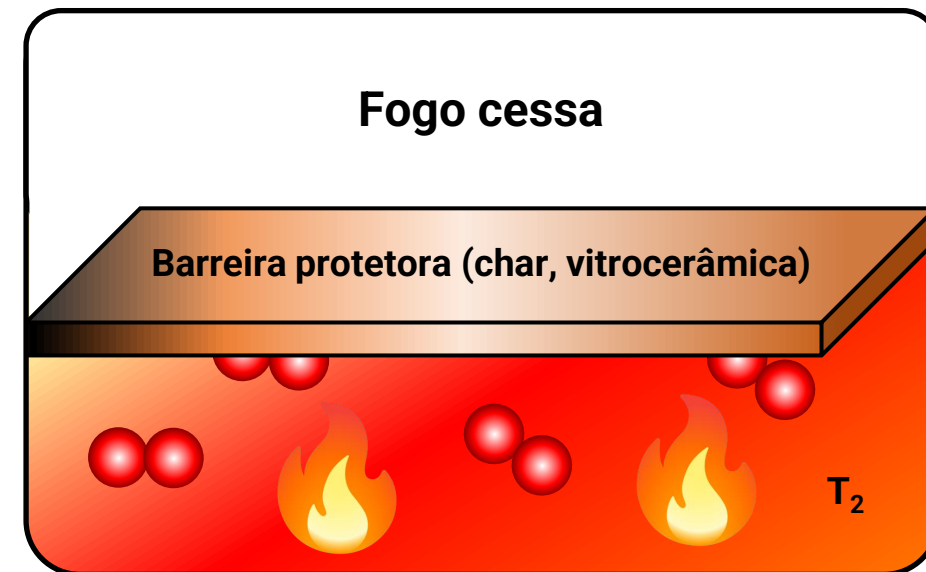


Polímero contendo
retardante de chamas



Formação de barreira protetora (física)

$$T_1 < T_2$$



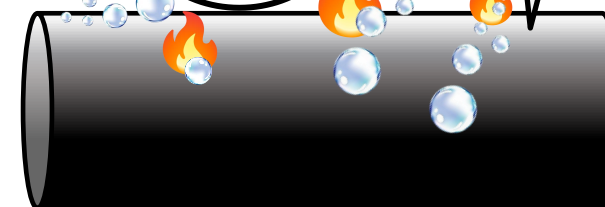
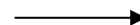
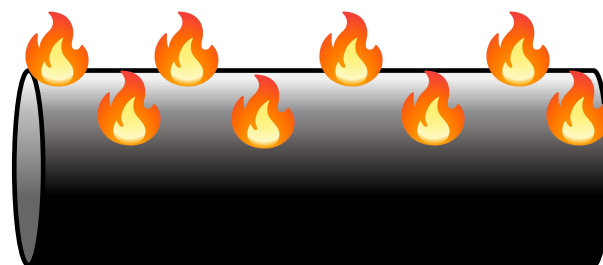
Mecanismos de supressão de chamas

Resfriamento por liberação de água ou gases inertes

Retardantes de chamas que atuam com esse mecanismo

- $\text{Mg}(\text{OH})_2$
- $\text{Al}(\text{OH})_3$

Polímero contendo
retardante de chamas



Reduz a temperatura e a concentração de gases combustíveis, retardando a ignição e a propagação da chama

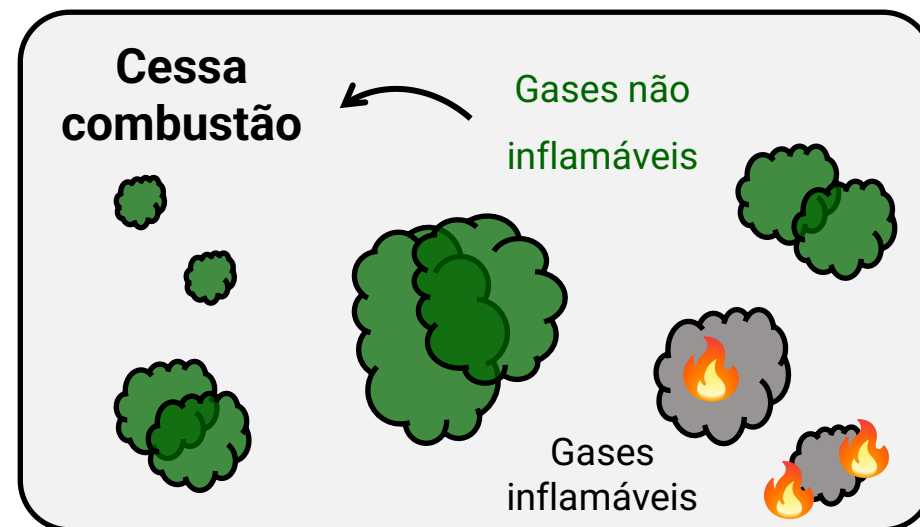
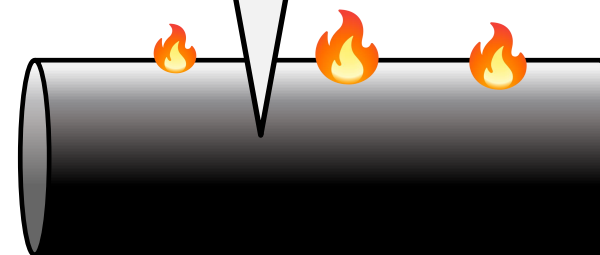
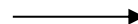
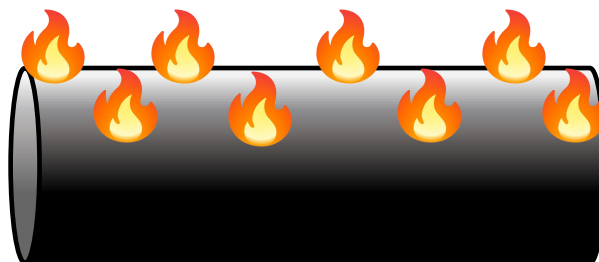
Mecanismos de supressão de chamas

Catalisadores que modificam o processo de decomposição térmica do polímero, formando produtos menos inflamáveis e mais estáveis.

Retardantes de chamas que atuam com esse mecanismo

- ZnO,
- Nb₂O₅
- PbS

Polímero contendo retardante de chamas



Os retardantes de chamas diminuem a geração de gases combustíveis e a velocidade da queima

Combustível + O₂ → CO₂ + H₂O + Energia + gases inflamáveis (Essa reação é inibida)

Combustível + O₂ → CO₂ + H₂O + Energia + gases não inflamáveis (Essa reação é favorecida)

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



Ferramenta de **Inteligência artificial** (IA)

O que é Machine Learning

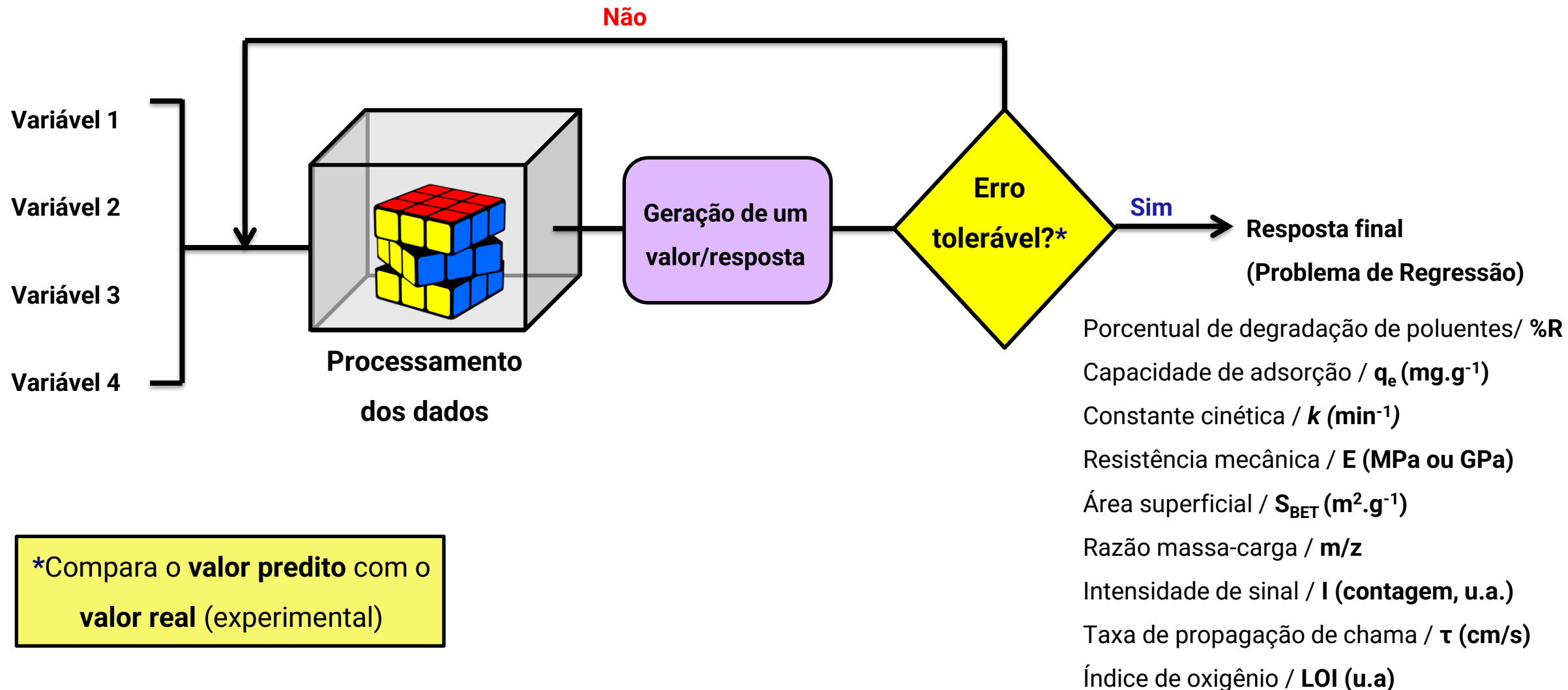
[Hands On Machine Learning with Scikit Learn and TensorFlow](#) (GÉRON, 2017):

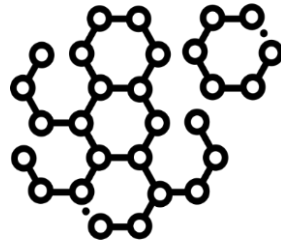
Ciência de programar computadores de forma que eles aprendam com os dados.

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

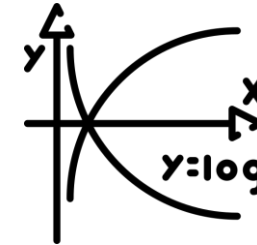
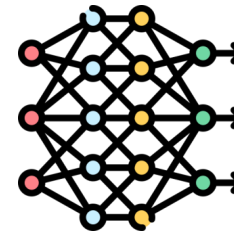
Machine Learning é o campo de estudo que dá aos computadores a capacidade de aprender sem ser explicitamente programado.

Funcionamento de um algoritmo de IA





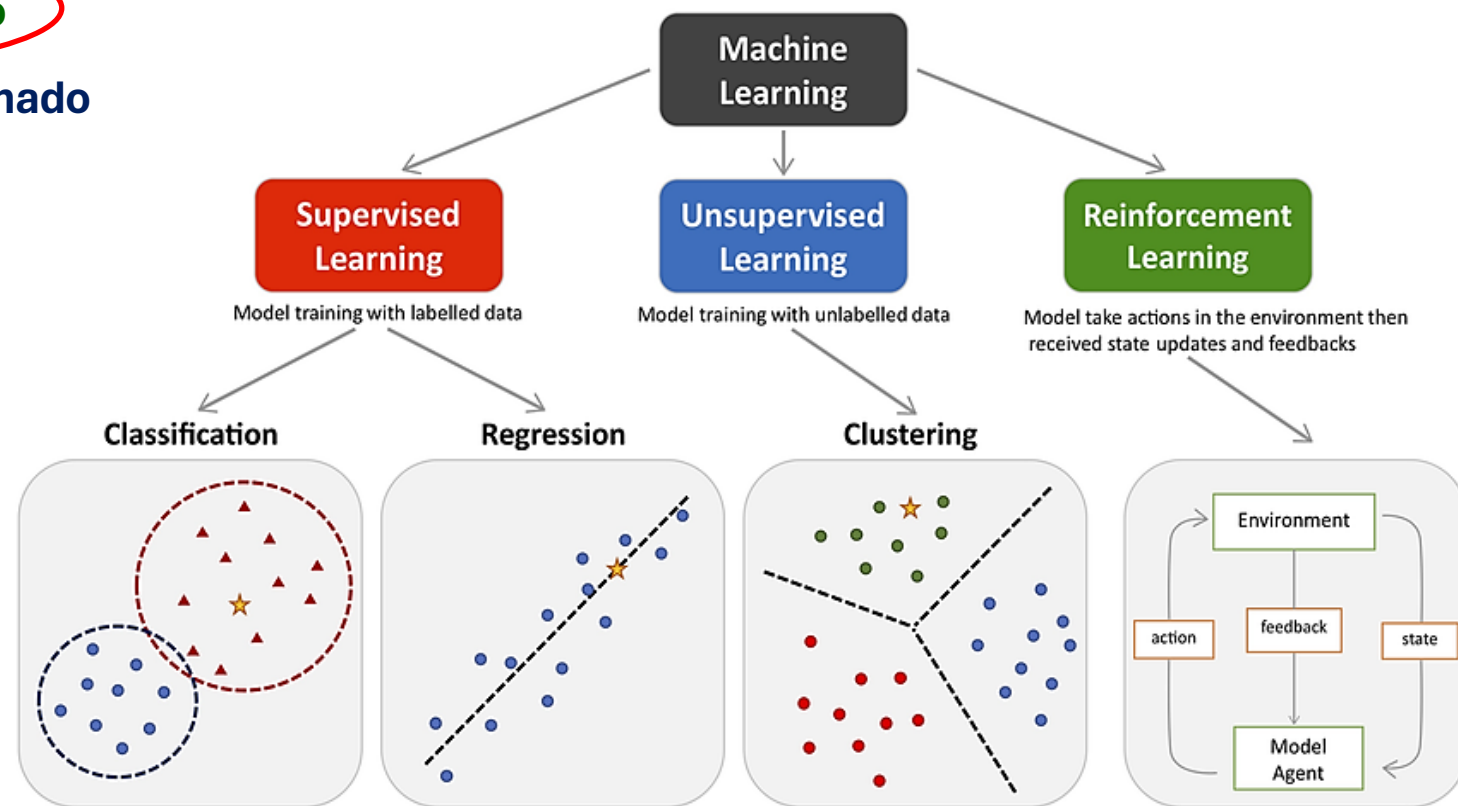
QUANDO UTILIZAR ALGORITMOS DE IA?



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

Tipos de aprendizado de máquina

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

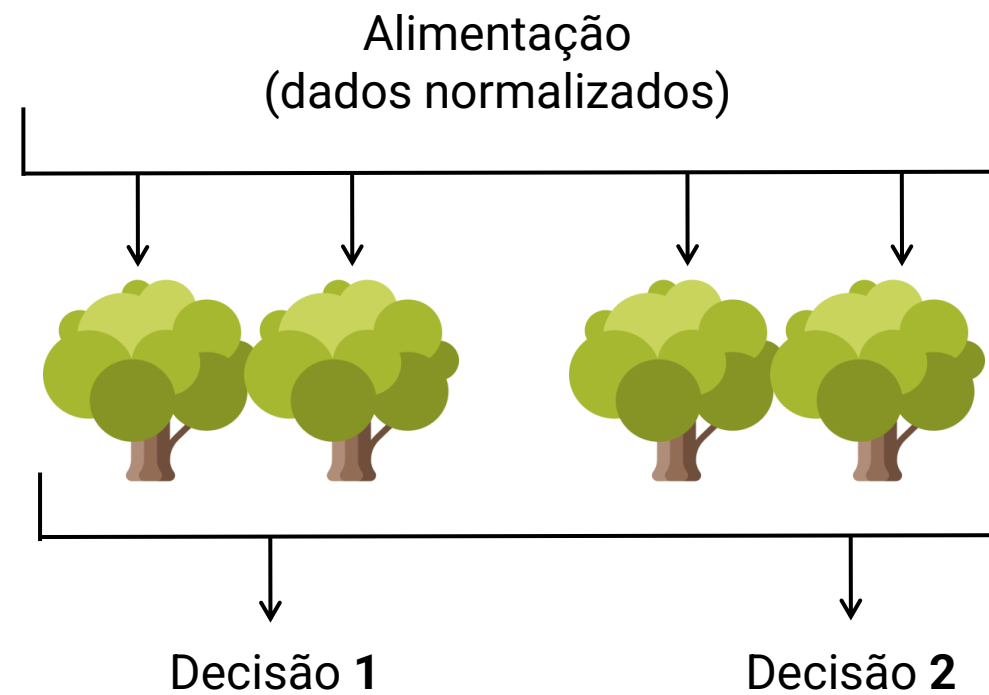
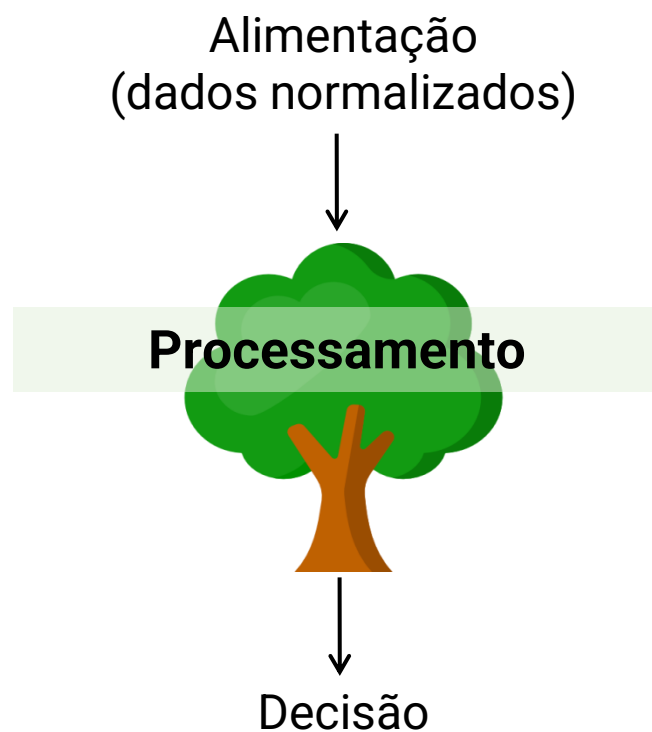


DOI: [10.3389/fphar.2021.720694](https://doi.org/10.3389/fphar.2021.720694)

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)



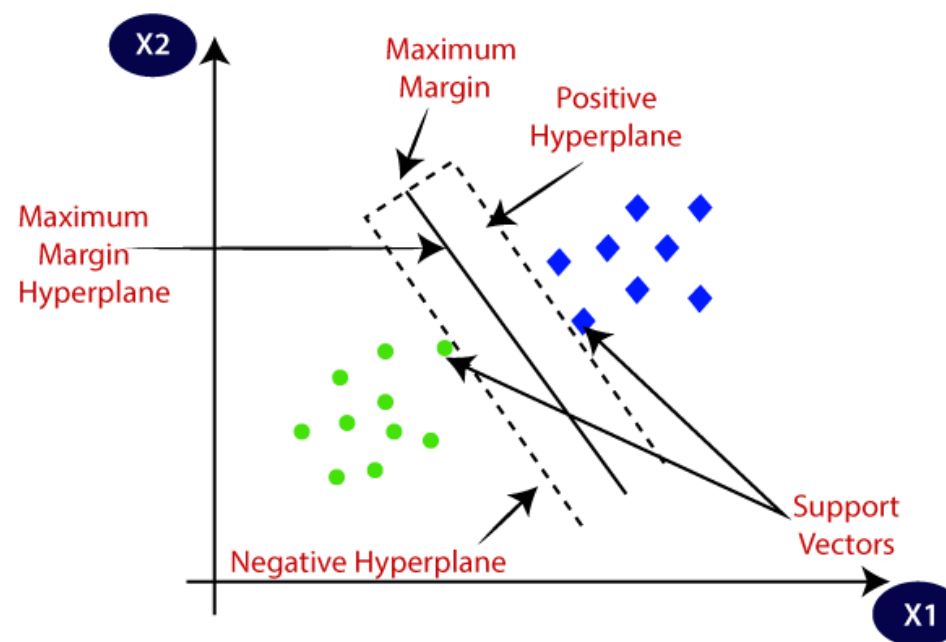
$(D1 + D2)/2 = \text{Média das decisões (Resposta do algoritmo)}$

Modelos vetoriais

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...**

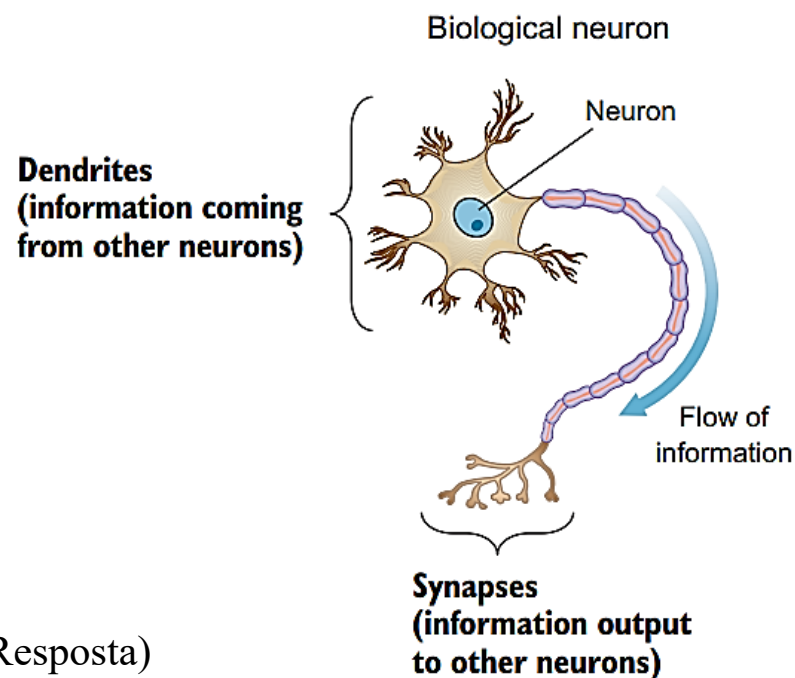
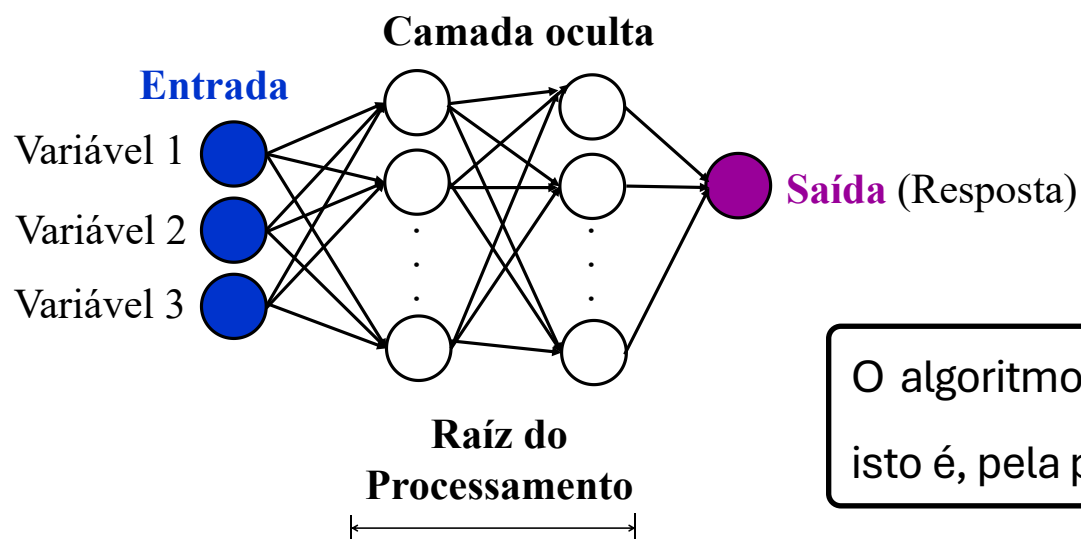
Modelos vetoriais

- **Euclidiana** $D(X, Y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$ $[0, \infty)$
- **Minkowski** $D(X, Y) = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$ $[0, \infty)$
- **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...

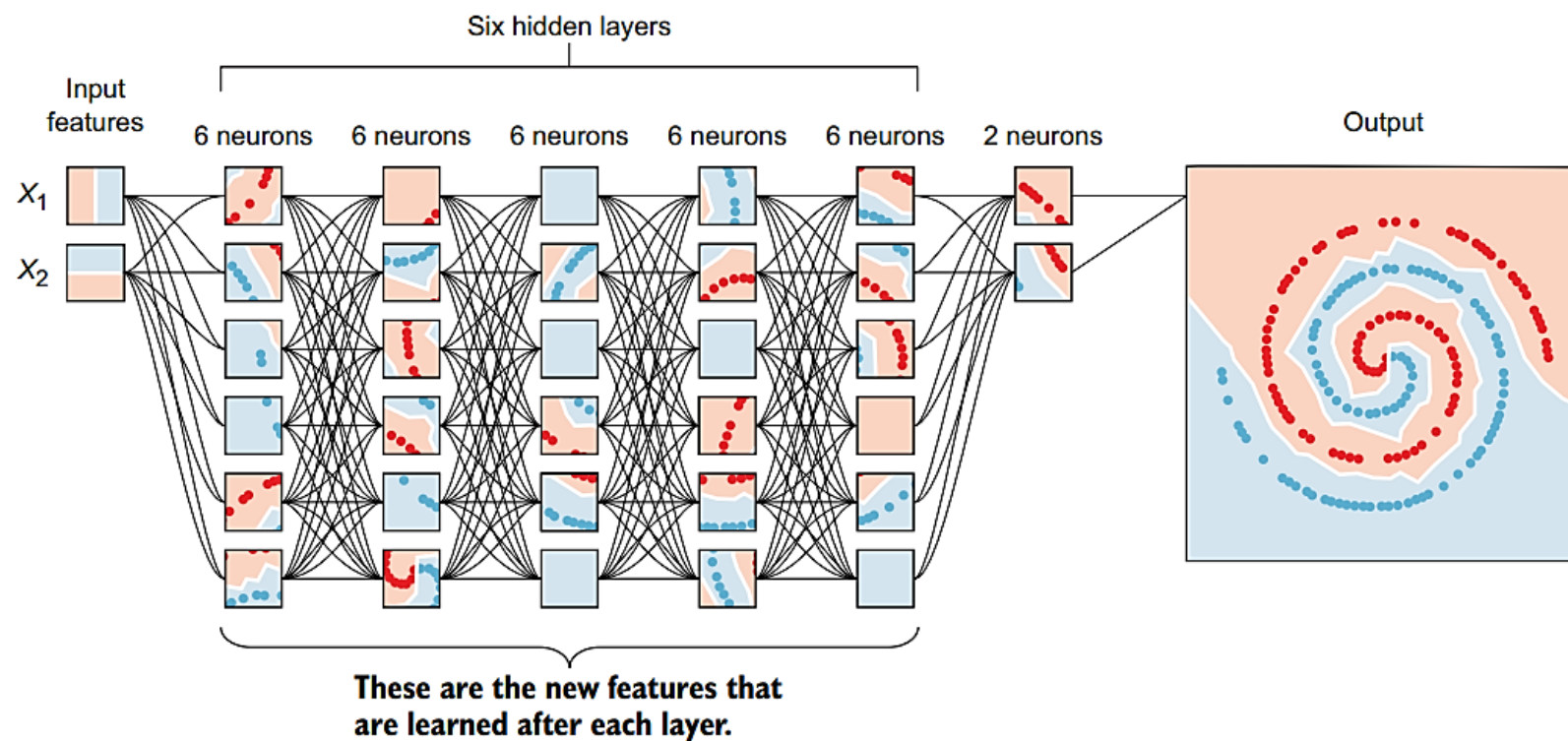


Modelo Perceptron

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

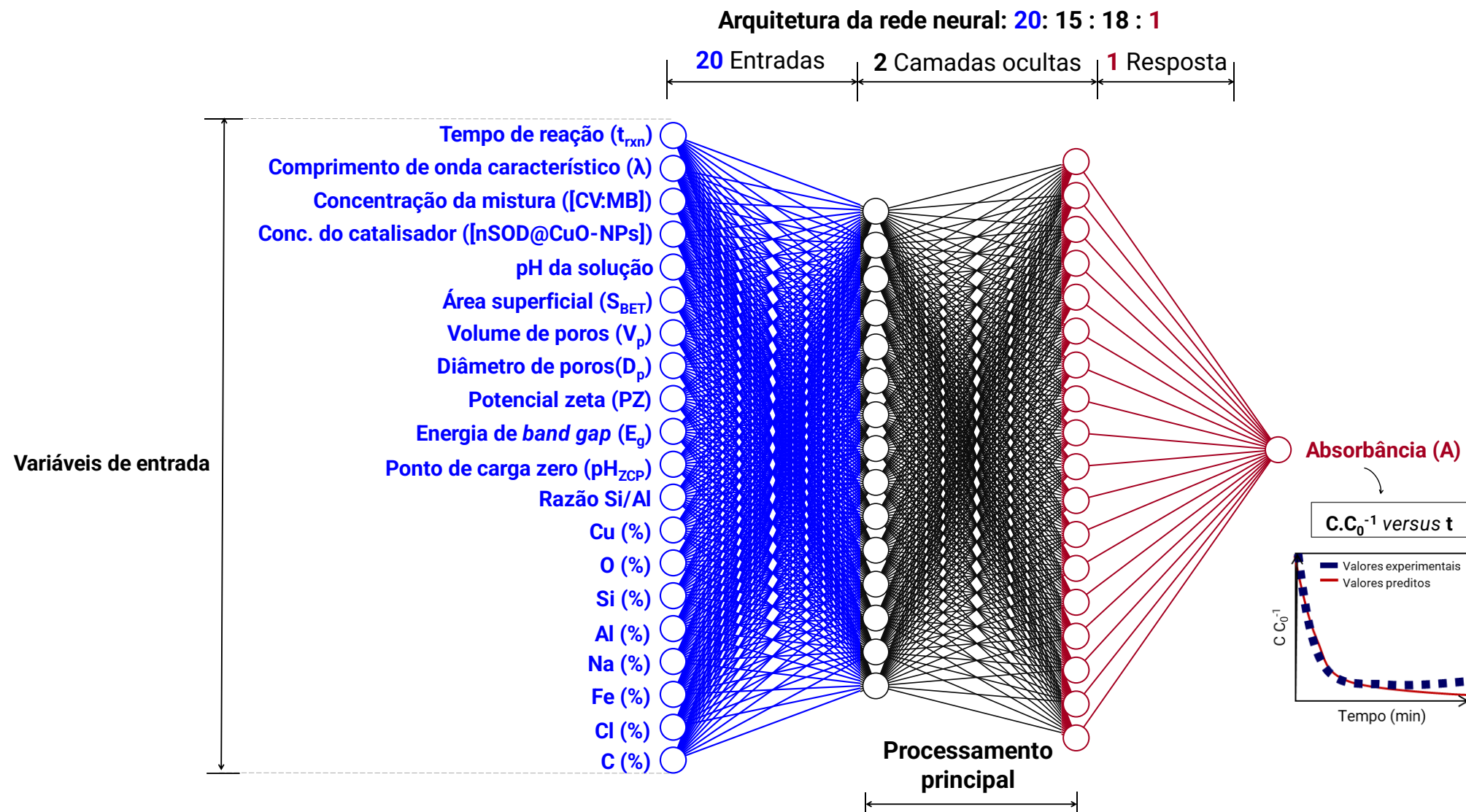
Perceptron multicamada (algoritmo MLP)

Reconhecimento de padrões: padrões mais simples nas primeiras camadas e mais complexos nas finais



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

Figura 2. Exemplo de arquitetura de uma rede neural multicamada.

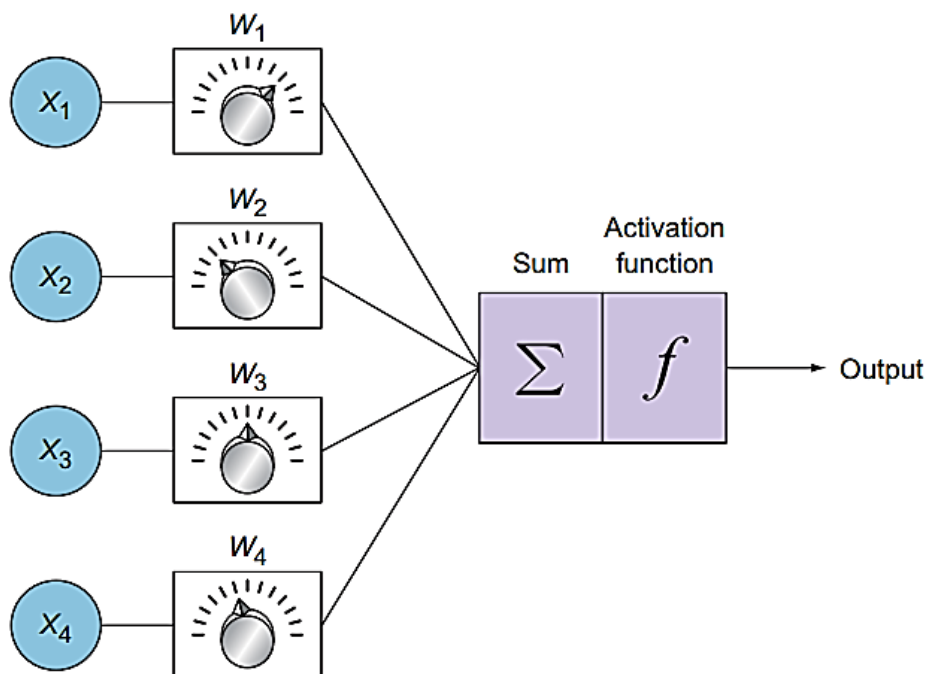


Fonte: Construção do autor (2025).

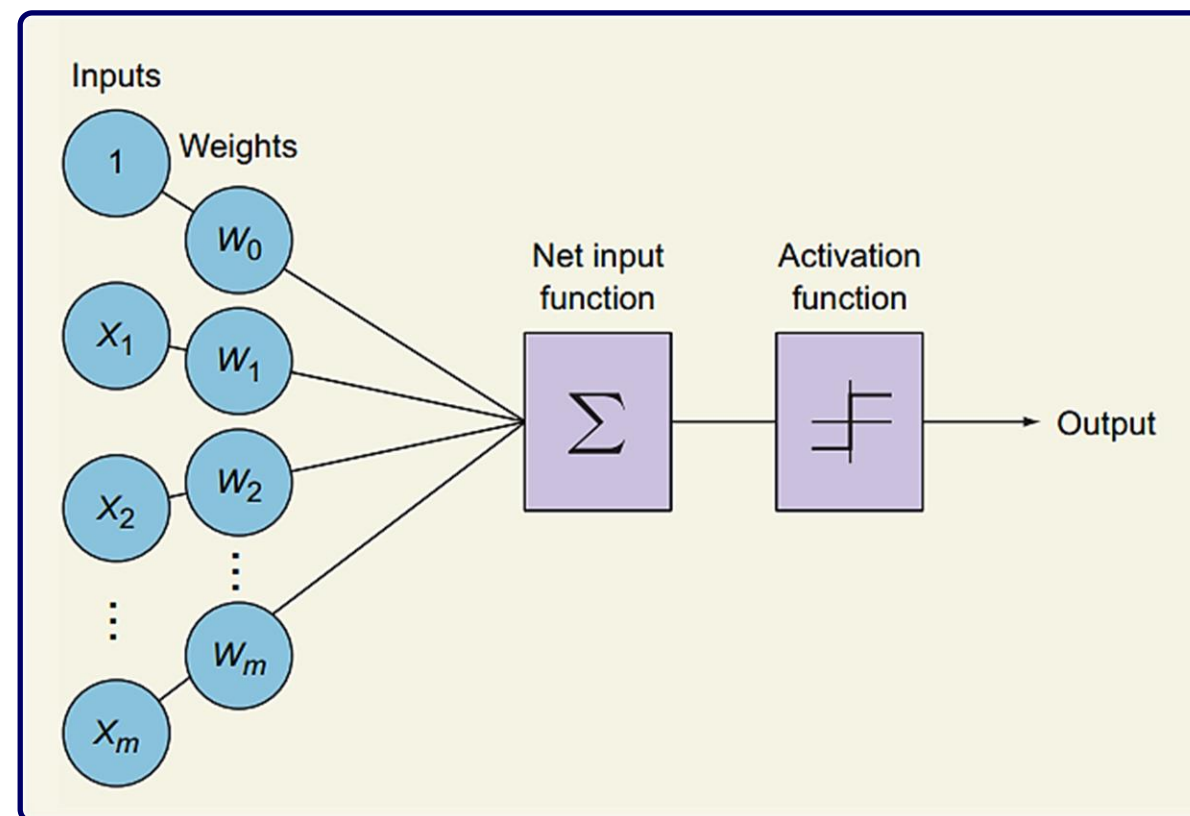
Modelos baseados em redes neurais artificiais

Ajuste dos pesos

(Contribuição de cada variável de entrada)



Funcionamento das redes neurais



Onde rodar a simulação com IA

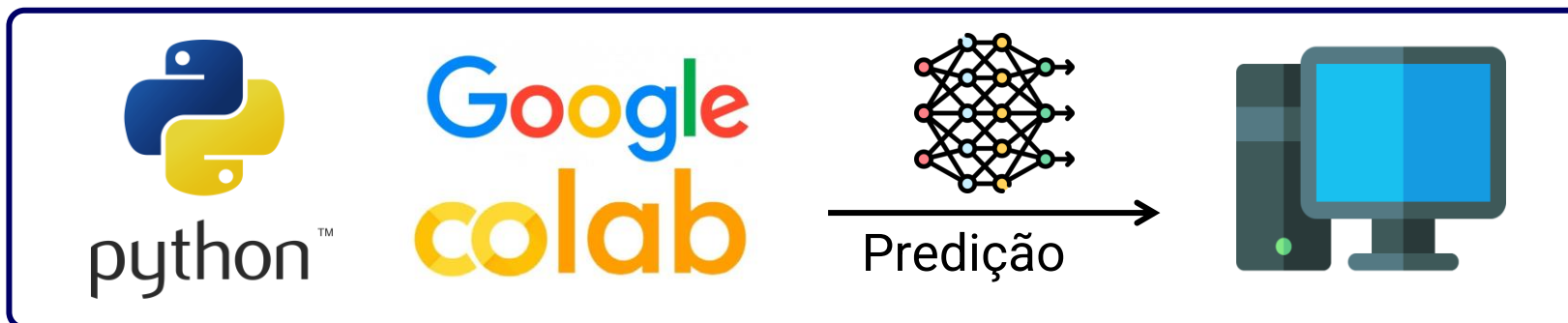
Software: Python 3.4.11

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.)

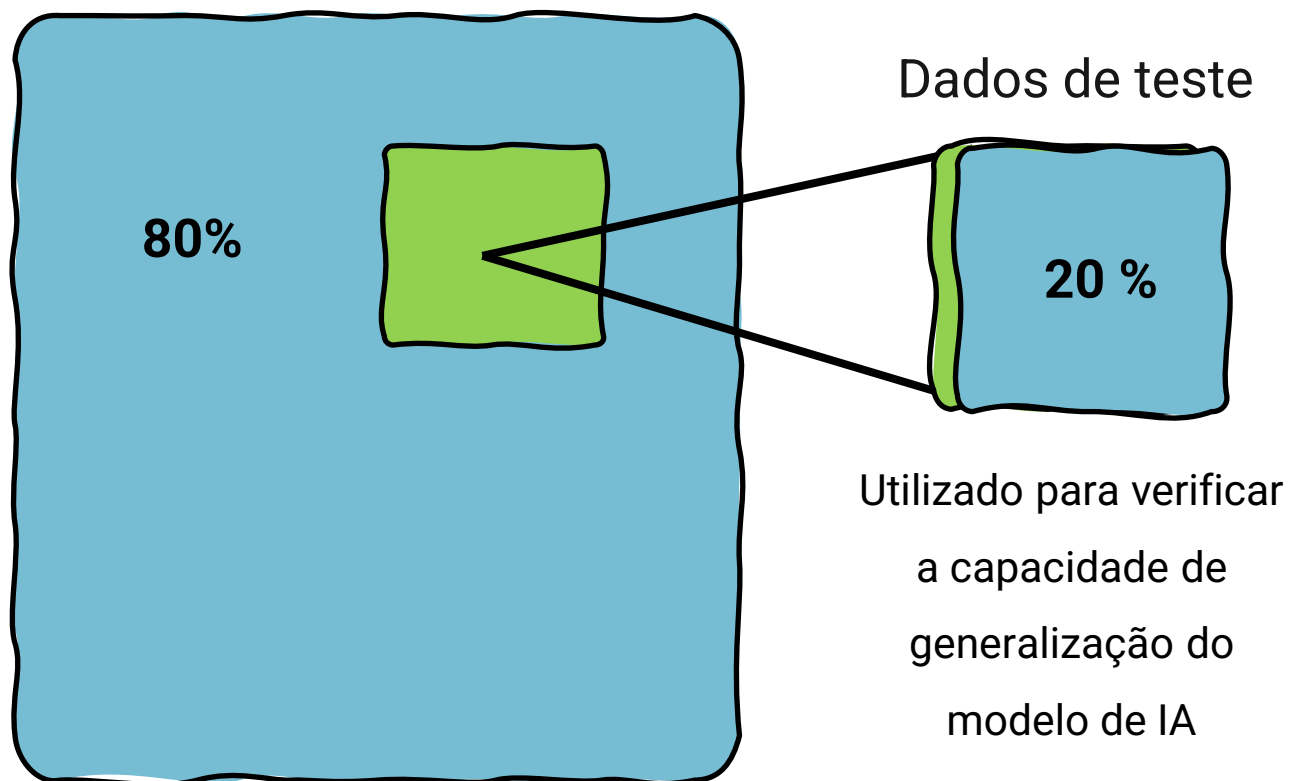
Bibliotecas: scikit-learn, tensorflow, keras, numpy, pandas, seaborn, matplotlib, plotly.

Algoritmos + utilizados: redes neurais artificial 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 verificar
a capacidade de
generalização do
modelo de IA

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

Google Colab for Python



Biblioteca sklearn: `train_test_split`

Métricas para medição de performance dos algoritmos (regressão)

Métricas

- R^2_{treino}
- R^2_{teste}
- $\text{RMSE}_{\text{treino}}$
- $\text{RMSE}_{\text{teste}}$

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

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

Onde: R^2 é o coeficiente de determinação; RMSE é a raiz do erro quadrático médio; $y_{i,\text{exp}}$ e $\hat{y}_{i,\text{pred}}$ 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.

Erros de overfitting/underfitting e seu impacto em generalizações

Underfitting

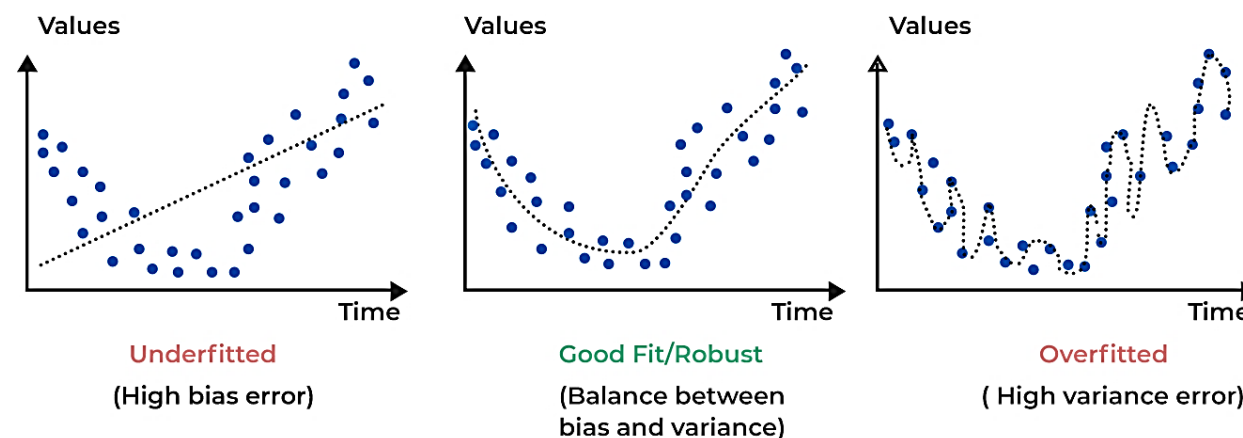
O modelo muito simples (algoritmo não aprende bem o padrão dos dados)

Overfitting

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



Generalization and Overfitting

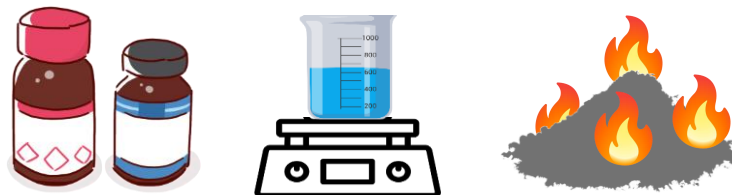


Fonte: <https://analystprep.com/study-notes/cfa-level-2/quantitative-method/overfitting-methods-addressing/>

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, conseqüentemente, 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).

Precursores	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

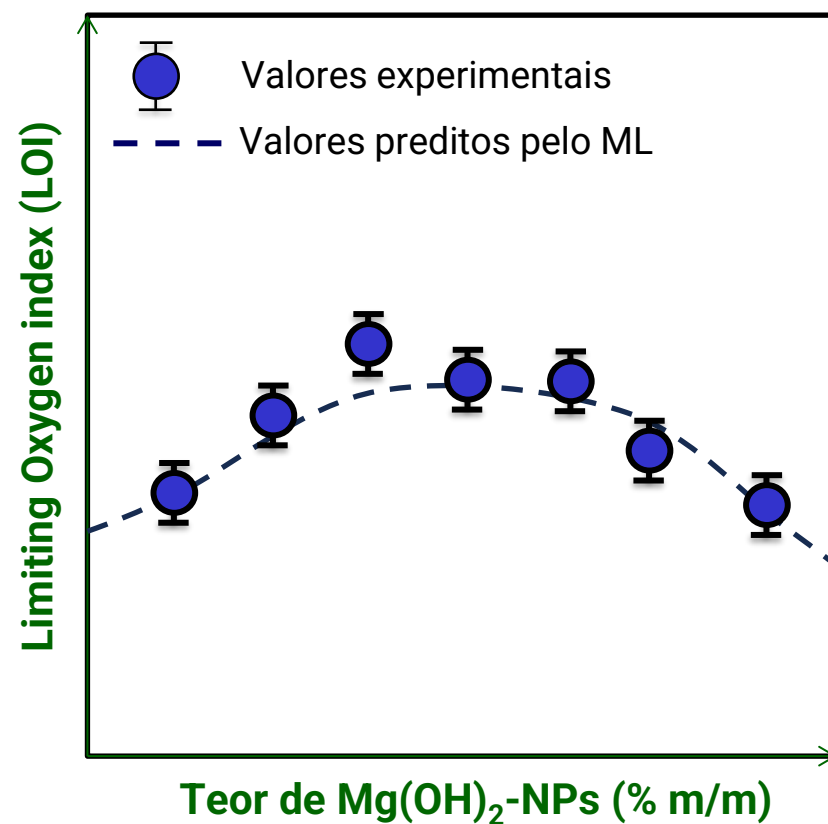
Predição das condições não testadas experimentalmente:

- **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.



Exemplos práticos

Estudo de Caso 2

Tempo até extinção (s)

Comprimento de
queima (cm)



Taxa de propagação de chama (cm/s)

Temática: Predição dos resultados do ensaio de inflamabilidade horizontal. Deseja-se prever a taxa de propagação de chama, tempo até a extinção e comprimento de queima para uma resina epóxi contendo diferentes teores de $\text{Mg}(\text{OH})_2$ -NPs produzidas por síntese sol-gel.

Deseja-se prever a **taxa de propagação de chama**, o **tempo até a extinção** e o **comprimento de queima** de um corpo de prova retangular de resina epóxi contendo **1,8%** e **2,5%** de $\text{Mg}(\text{OH})_2$.

 Resina epóxi

 Nanopartículas de hidróxido de magnésio, $\text{Mg}(\text{OH})_2$ -NPs

Estudo de Caso 2

ML/DL

→ Inflamabilidade reduz ????

Tabela 1 – Dados obtidos pelo ensaio de inflamabilidade horizontal.

Teor de $\text{Mg}(\text{OH})_2$ -NPs (% m/m)	Taxa de propagação de chama (cm/s)	Tempo até a extinção das chamas (s)	Comprimento da queima (cm)	Interpretação física
0,0	2,5	40	10,0	Material base sem retardante
0,5	2,3	42	9,5	Pequena redução na propagação
1,0	2,0	45	9,0	Melhor desempenho inicial
2,0	1,2	60	6,0	Melhor combinação: menor propagação, maior controle
3,0	1,1	62	5,8	Peak performance* próximo deste teor
5,0	1,5	56	7,1	Leve piora após pico
7,0	1,6	53	7,5	Diminuição na eficiência devido a aglomeração
8,0	1,8	50	8,2	Agregação das NPs prejudica a dispersão e retardância
10,0	2,0	48	8,5	Tendência continuada de piora no desempenho
12,0	2,2	45	9,0	Concentração alta negativa para nanopartículas

* faixa de concentração o retardante apresenta o melhor equilíbrio entre os parâmetros desejados: menor taxa de propagação da chama, maior tempo controlado até a extinção da chama e menor comprimento da área queimada.

- **Predição 1:** Resina epóxi contendo **1,8%** de $\text{Mg}(\text{OH})_2$ – Qual a taxa de propagação de chama, tempo até extinção e comprimento da queima?
- **Predição 2:** Resina epóxi contendo **2,5%** de $\text{Mg}(\text{OH})_2$ – Qual a taxa de propagação de chama, tempo até extinção e comprimento da queima?

Vantagens e limitações

Vantagens



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

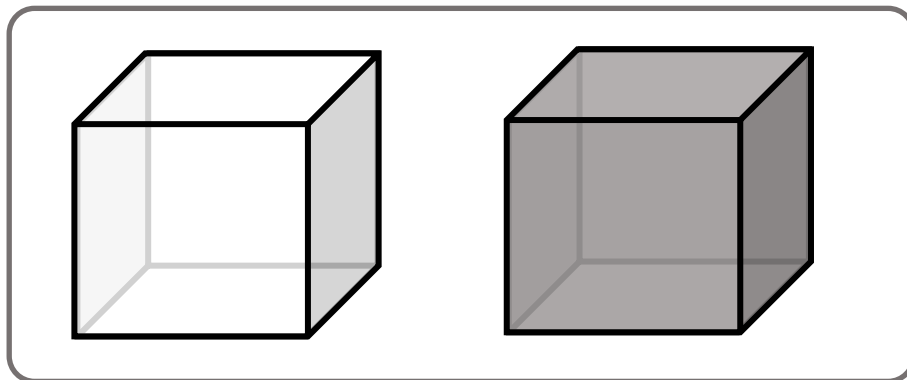
Limitações



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

Algoritmos e sua interpretabilidade quanto ao método de aprendizagem

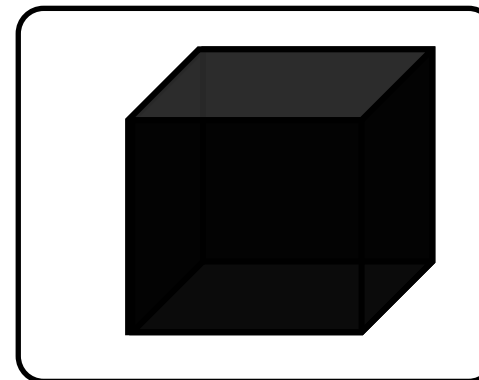
Machine Learning (ML)



Modelos de caixa branca e cinza

Funcionamento interno opaco e complexo

Deep Learning (DL) e SVM

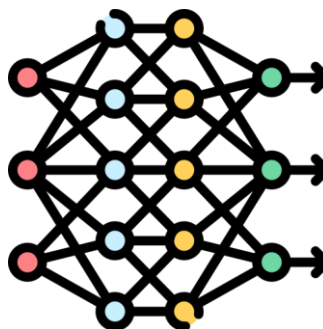


Modelos de caixa preta

Funcionamento interno opaco e complexo



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	Dado nº 5	Valor numérico 5	Dado nº 5	Valor 5
7	6	Valor numérico 6	Valor numérico 6	Dado nº 6	Valor numérico 6	Dado nº 6	Valor 6
8	7	Valor numérico 7	Valor numérico 7	Dado nº 7	Valor numérico 7	Dado nº 7	Valor 7
9	9	Valor numérico 9	Valor numérico 9	Dado nº 9	Valor numérico 9	Dado nº 9	Valor 9
10	10	Valor numérico 10	Valor numérico 10	Dado nº 10	Valor numérico 10	Dado nº 10	Valor 10
11	11	Valor numérico 11	Valor numérico 11	Dado nº 11	Valor numérico 11	Dado nº 11	Valor 11
12	12	Valor numérico 12	Valor numérico 12	Dado nº 12	Valor numérico 12	Dado nº 12	Valor 12
13	13	Valor numérico 13	Valor numérico 13	Dado nº 13	Valor numérico 13	Dado nº 13	Valor 13
14	14	Valor numérico 14	Valor numérico 14	Dado nº 14	Valor numérico 14	Dado nº 14	Valor 14
15	15	Valor numérico 15	Valor numérico 15	Dado nº 15	Valor numérico 15	Dado nº 15	Valor 15
16	16	Valor numérico 16	Valor numérico 16	Dado nº 16	Valor numérico 16	Dado nº 16	Valor 16
17	17	Valor numérico 17	Valor numérico 17	Dado nº 17	Valor numérico 17	Dado nº 17	Valor 17
18	18	Valor numérico 18	Valor numérico 18	Dado nº 18	Valor numérico 18	Dado nº 18	Valor 18
19	19	Valor numérico 19	Valor numérico 19	Dado nº 19	Valor numérico 19	Dado nº 19	Valor 19
20	20	Valor numérico 20	Valor numérico 20	Dado nº 20	Valor numérico 20	Dado nº 20	Valor 20
21	21	Valor numérico 21	Valor numérico 21	Dado nº 21	Valor numérico 21	Dado nº 21	Valor 21
22	22	Valor numérico 22	Valor numérico 22	Dado nº 22	Valor numérico 22	Dado nº 22	Valor 22
23	23	Valor numérico 23	Valor numérico 23	Dado nº 23	Valor numérico 23	Dado nº 23	Valor 23
24	24	Valor numérico 24	Valor numérico 24	Dado nº 24	Valor numérico 24	Dado nº 24	Valor 24

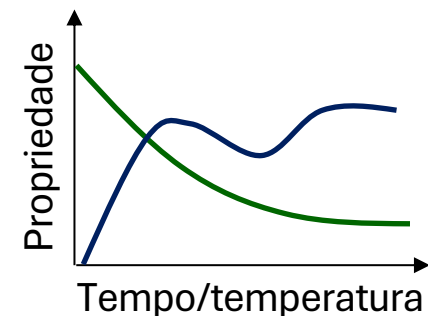
Condição 1 → Valor X

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	0,0	Valor numérico 1	Valor numérico 1	Valor 1
3	2	10,0	Valor numérico 2	Valor numérico 2	Valor 2
4	3	20,0	Valor numérico 3	Valor numérico 3	Valor 3
5	4	30,0	Valor numérico 4	Valor numérico 4	Valor 4
6	5				Valor 5
7	6				Valor 6
8	7				Valor 7
9	9				Valor 8
10	10				Valor 9
11	11				Valor 10
12	12				Valor 11
13	13				Valor 12
14	14				Valor 13
15	15				Valor 14
16	16				Valor 15
17	17	330,0	Valor numérico 16	Valor numérico 16	Valor 16
18	18	360,0	Valor numérico 17	Valor numérico 17	Valor 17
19	19	390,0	Valor numérico 18	Valor numérico 18	Valor 18
20	20	420,0	Valor numérico 19	Valor numérico 19	Valor 19
21	21	450,0	Valor numérico 20	Valor numérico 20	Valor 20
22	22	480,0	Valor numérico 21	Valor numérico 21	Valor 21
23	23	510,0	Valor numérico 22	Valor numérico 22	Valor 22
24	24	540,0	Valor numérico 23	Valor numérico 23	Valor 23



GRATO PELA ATENÇÃO!

