



Universidade Federal de Ouro Preto  
Escola de Minas  
CECAU - Colegiado do Curso de  
Engenharia de Controle e Automação



Rafael Christian Fonseca da Paixão

**Comparação de técnicas de aprendizado de máquina para prever a  
resistência à compressão do concreto**

Monografia de Graduação

Ouro Preto, 2023

Rafael Christian Fonseca da Paixão

## **Comparação de técnicas de aprendizado de máquina para prever a resistência à compressão do concreto**

Trabalho apresentado ao Colegiado do Curso de Engenharia de Controle e Automação da Universidade Federal de Ouro Preto como parte dos requisitos para a obtenção do Grau de Engenheira(o) de Controle e Automação.

Universidade Federal de Ouro Preto

Orientador: Profa. Júlia Castro Mendes

Coorientador: Profa. Adrielle de Carvalho Santana

Ouro Preto

2023

## SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

P149c Paixao, Rafael Christian Fonseca da.  
Comparação de técnicas de aprendizado de máquina para prever a resistência à compressão do concreto. [manuscrito] / Rafael Christian Fonseca da Paixao. - 2023.  
49 f.: il.: , gráf., tab..

Orientadora: Profa. Dra. Júlia Castro Mendes.  
Coorientadora: Profa. Dra. Adrielle de Carvalho Santana.  
Monografia (Bacharelado). Universidade Federal de Ouro Preto. Escola de Minas. Graduação em Engenharia de Controle e Automação .

1. Aprendizado do computador. 2. Concreto - Dosagem. 3. Resistência de materiais - Concreto - Resistência a Compressão. 4. Banco de dados - Concreto. I. Mendes, Júlia Castro. II. Santana, Adrielle de Carvalho. III. Universidade Federal de Ouro Preto. IV. Título.

CDU 658.5

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO  
REITORIA  
ESCOLA DE MINAS  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL



## FOLHA DE APROVAÇÃO

Rafael Christian Fonseca da Paixão

### Comparação de técnicas de aprendizado de máquina para prever a resistência à compressão do concreto

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Controle e Automação da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Engenheiro de Controle e Automação

Aprovada em 15 de Fevereiro de 2023

#### Membros da banca

Prof. D.Sc. Júlia Castro Mendes - Orientadora (Universidade Federal de Ouro Preto)  
Prof. D.Sc. Adrielle de Carvalho Santana - Co-orientadora (Universidade Federal de Ouro Preto)  
Eng. M.Sc. Vitor Freitas Mendes - (Universidade Federal de Ouro Preto / Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil)  
Eng. D.Sc. Rafaele Piazzaroli Finotti Amaral - (Universidade Federal de Juiz de Fora / Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional)

Prof. D.Sc. Júlia Castro Mendes, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 27/02/2023



Documento assinado eletronicamente por **Julia Castro Mendes, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 27/02/2023, às 10:59, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [http://sei.ufop.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **0480183** e o código CRC **DEAED653**.

# Resumo

A resistência à compressão do concreto é uma propriedade essencial para garantir a segurança de uma estrutura. No entanto, estimar este valor é atualmente um processo trabalhoso e impreciso, uma vez que a dosagem é baseada em métodos empíricos e sua confirmação em laboratório demanda tempo e recursos. Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo avaliar modelos de Aprendizado de Máquina (ML) para prever a resistência à compressão do concreto a partir de seus componentes. Para tanto, um banco de dados da literatura foi utilizado como entrada para quatro modelos de ML: *Extreme Gradient Boosting* (XGBoost), Regressão de Vetor de Suporte (SVR), Redes Neurais Artificiais (RNA) e Processo Gaussiano de Regressão (GPR). A precisão dos modelos foi avaliada por meio de validação cruzada (*10-fold*) e medida com as métricas de  $R^2$ , Erro Médio Absoluto (MAE) e a Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE). Posteriormente, um novo banco de dados foi montado com traços da literatura e utilizado para validar os modelos anteriores. Na etapa de criação do modelo, todos os algoritmos obtiveram resultados semelhantes e satisfatórios, com MAE entre 1,96-2,26 MPa e  $R^2$  variando de 0,79 a 0,83. No entanto, na etapa de validação, no qual utilizou-se um conjunto de dados que continha traços de diversas fontes diferentes, a precisão dos modelos caiu drasticamente, com o MAE crescendo para 3,04-4,04 MPa e o  $R^2$  diminuindo para 0,37-0,59. As RNA e o GPR mostraram os melhores resultados, enquanto a SVR teve as piores previsões. Este trabalho mostrou que as ferramentas de ML são técnicas promissoras para prever e otimizar os processos de dosagem de concreto, porém, deve-se ter cuidado com os dados de entrada para garantir que os modelos não sejam ajustados a uma determinada região, conjunto de materiais ou tipo de concreto.

**Palavras-chaves:** aprendizado de máquina; dosagem de concreto; habilidade de generalização; resistência a compressão; banco de dados de concreto

# Abstract

The compressive strength of concrete is an essential property to ensure the safety of a concrete structure. However, estimating this value is usually a laborious and uncertain process since the mix design is based on empirical methods and its confirmation in the laboratory demands time and resources. In this context, this work aims to evaluate Machine Learning (ML) models to predict the compressive strength of concrete from its constituents. For this purpose, a dataset from the literature was used as input to four ML models: Extreme Gradient Boosting (XGBoost), Support Vector Regression (SVR), Artificial Neural Networks (ANN) and Gaussian Process Regression (GPR). The accuracy of the models was evaluated through 10-fold cross-validation, and quantified by  $R^2$ , Mean Absolute Error (MAE), and Root-Mean-Square Error (RMSE) metrics. Subsequently, a new dataset was put together with mixtures from the literature and used to validate the previous models. In the model creation step, all algorithms obtained similar and positive results, with MAE between 1.96-2.26 MPa and  $R^2$  varying from 0.79 to 0.83. However, in the validation step, the accuracy of the models dropped sharply, with MAE growing to 3.04-4.04 MPa and  $R^2$  decreasing to 0.37-0.59. ANN and GPR showed the best results, while SVR had the worst predictions. This work showed that ML tools are promising techniques to predict the compressive strength of concrete. However, care must be taken with the input data to guarantee that models are not fitted to a given region, set of materials, or type of concrete.

**Key-words:** machine learning; concrete mix design; generalization ability; compressive strength; concrete database

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Rompimento de Corpo de Prova à Compressão. . . . .	11
Figura 2 – Curvas de Abrams - Método ABCP . . . . .	16
Figura 3 – Campos do aprendizado de máquina. . . . .	18
Figura 4 – Visão Geral da Metodologia . . . . .	20
Figura 5 – Estrutura de uma Árvore de Decisão . . . . .	21
Figura 6 – Exemplo de uma separação realizada pelo SVR. . . . .	24
Figura 7 – Representação de um perceptron . . . . .	25
Figura 8 – Representação de uma MLP com uma camada oculta. . . . .	26
Figura 9 – Esquema do processo de validação cruzada para $k=10$ . . . . .	31
Figura 10 – Frequência de erros (diferença entre os valores preditos e observados) para as 329 amostras avaliadas. . . . .	35
Figura 11 – Importância relativa de cada recurso de entrada na previsão da resistên- cia à compressão, de acordo com o modelo Extreme Gradient Boosting Decision Tree. . . . .	37

# Lista de tabelas

Tabela 1	–	Visão geral do dataset do Yeh's (1998) depois do pré-processamento.	29
Tabela 2	–	Visão geral do <i>dataset</i> de validação do autor depois do pré-processamento.	29
Tabela 3	–	Avaliação dos 4 modelos de aprendizado de máquina desenvolvidos: Extreme Gradient Boosting (XGBoost), Máquinas de Vetor de Suporte para Regressão (SVR), Redes Neurais Artificiais (RNA), Modelo Gaussiano de Regressão (GPR).	33
Tabela 4	–	Os 10 piores valores observados para cada modelo em relação ao erro absoluto.	36
Tabela 5	–	Resultados da etapa de validação do modelo realizada com o novo conjunto de dados desenvolvido pelo autor.	38



# Lista de abreviaturas e siglas

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ACI	American Concrete Institute
ABCP	Associação Brasileira de Cimento Portland
IPT	Instituto Brasileiro de Pesquisas Tecnológicas
ACI	American Concrete Institute
ML	Machine Learning
IA	Inteligência Artificial
MLP	Multilayer perceptron
RNA	Redes Neurais Artificiais
GPR	Processo Gaussiano de Regressão
SVR	Máquina de Vetores de Suporte para Regressão
MAE	Erro médio absoluto
$R^2$	Coefficiente de determinação
RMSE	Raiz quadrada do erro-médio

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>11</b>
<b>1.1</b>	<b>Justificativas e Relevância</b>	<b>11</b>
<b>1.2</b>	<b>Objetivos</b>	<b>13</b>
1.2.1	Objetivo Geral	13
1.2.2	Objetivos Específicos	14
1.2.2.1	Significância dos recursos de entrada	14
1.2.2.2	Generalização dos modelos	14
<b>2</b>	<b>REVISÃO DA LITERATURA</b>	<b>15</b>
<b>2.1</b>	<b>Concreto</b>	<b>15</b>
<b>2.2</b>	<b>Indústria 4.0</b>	<b>16</b>
<b>2.3</b>	<b>Aprendizado de Máquina</b>	<b>18</b>
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>20</b>
<b>3.1</b>	<b>Técnicas de aprendizado de máquina</b>	<b>21</b>
3.1.1	Extreme Gradient Boosting (XGBoost)	21
3.1.1.1	Principais Conceitos	21
3.1.1.2	Definições para o presente projeto	23
3.1.2	Máquina de Vetores de Suporte para Regressão (SVR)	23
3.1.2.1	Principais Conceitos	23
3.1.2.2	Definições para o presente projeto	25
3.1.3	Redes neurais artificiais (RNA)	25
3.1.3.1	Principais Conceitos	25
3.1.3.2	Definições para o presente projeto	26
3.1.4	Processo Gaussiano de Regressão (GPR)	27
3.1.4.1	Principais Conceitos	27
3.1.4.2	Definições para o presente projeto	27
<b>3.2</b>	<b>Análise de dados</b>	<b>28</b>
3.2.1	Conjunto de dados de treino	28
3.2.2	Conjunto de dados de validação	29
3.2.3	Redimensionamento de dados	29
3.2.4	Validação Cruzada	30
3.2.5	Métricas de avaliação	31
3.2.6	Significância dos recursos de entrada	32
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>33</b>

4.1	Criação e avaliação dos modelos . . . . .	33
4.2	Significância dos recursos de entrada . . . . .	37
4.3	Considerações sobre a generalização dos modelos . . . . .	37
5	<b>CONCLUSÃO</b> . . . . .	39
	Referências . . . . .	41
	<b>APÊNDICES</b>	<b>47</b>

# 1 Introdução

## 1.1 Justificativas e Relevância

A resistência à compressão do concreto é uma de suas propriedades mais importantes. Essa característica impacta diretamente no projeto estrutural. A resistência é geralmente relacionada ao custo, segurança e estabilidade de uma estrutura de concreto. A resistência é geralmente expressa em MPa, e é tradicionalmente obtida a partir da ruptura de corpos de prova cilíndricos ou cúbicos em prensa hidráulica, procedimento normatizado em todo o mundo, representado na Figura 1 (NEVILLE, 2015; BS, 2019). Devido à evolução da hidratação do cimento ao longo do tempo, os engenheiros civis convencionaram estabelecer que a resistência-alvo é alcançada após 28 dias de cura na maioria dos projetos convencionais.



Figura 1 – Rompimento de Corpo de Prova à Compressão. Fonte: Bezerra (2007)

Como os projetos estruturais exigem uma determinada resistência à compressão, os engenheiros responsáveis pelos canteiros precisam estabelecer uma proporção otimizada entre os constituintes do concreto para garantir a segurança da edificação. Isso é feito por meio de métodos de dimensionamento do traço, como os desenvolvidos pelo American Concrete Institute (ACI), pela Associação Brasileira de Cimento Portland (ABCP) e pelo Instituto Brasileiro de Pesquisas Tecnológicas (IPT). Esses métodos buscam atingir uma resistência alvo média (acima do mínimo) para que o valor mínimo seja atendido com margem de segurança (STANDARD..., 2002). Este valor médio é obtido estatisticamente, pois é possível que um corpo de prova de concreto obtenha uma resistência inferior à especificada, dada a natureza heterogênea de seus componentes e procedimento de mistura (NEVILLE, 2015). Portanto, na prática, a resistência alvo economicamente viável é definida como o valor a ser excedido por uma certa proporção de todos os resultados (geralmente 95% quando um único teste é considerado, ou 99% quando uma média de 3 ou 4 testes é feita) (NEVILLE, 2015).

Esses métodos ainda hoje são realizados por meio de gráficos e fórmulas empíricas (NEVILLE, 2015; K. W. DAY; HUDSON, 2013). Além disso, eles são válidos apenas para concretos convencionais. Para outros tipos de concreto, como concretos de alta resistência, autoadensáveis, leves e reciclados, o cenário é ainda mais incerto, com técnicas de dimensionamento de traços escassas e divergentes (BONIFÁCIO et al., 2019; TUTIKIAN; PACHECO, 2012).

Assim como a avaliação de resistência, outras áreas relacionadas à engenharia lidam com processos empíricos e testes demorados. Para melhorar esses processos, ou pelo menos reduzir a necessidade de testes experimentais, a automação dos processos é uma grande aliada. A utilização de sistemas de automação hoje em dia ocorre principalmente onde se deseja otimizar e padronizar os processos. A utilização dessas técnicas pode proporcionar uma redução dos custos e um alto nível de padronização do produto final (TAGLIARI et al., 2010). No entanto, o uso dessas técnicas depende principalmente de uma alta quantidade de dados, algo que vem sendo possibilitado devido aos últimos avanços tecnológicos que proporcionaram sensores e sistemas capazes de supervisionar e realizar a coleta de uma grande quantidade de dados em tempo real (TAGLIARI et al., 2010).

Devido a esses avanços da tecnologia, diversos estudos têm ganhado notoriedade na área de automação e otimização de processos, principalmente ligados à inteligência artificial, como, por exemplo, o estudo de técnicas de aprendizado de máquina (ML, do inglês *Machine Learning*). Essas técnicas consistem em modelos computacionais capazes de adquirir conhecimento de forma autônoma. Esses modelos tomam decisões e podem prever novos resultados com base em padrões adquiridos de dados anteriores. Como exemplos, podemos citar Frota (2017), que aplicou modelos de aprendizado de máquina para a automação de testes de sistema *web*, mostrando como essas técnicas são eficazes para diminuir o envolvimento humano nos processos repetitivos. Tem-se ainda o trabalho de Lima e Corso (2020), que utilizaram esses algoritmos para previsão de demanda de materiais em uma indústria do ramo de plástico, destacando que essas técnicas possuem potencial para aprimorar os métodos utilizados hoje na indústria.

Seguindo no uso dessas técnicas pode-se destacar ainda os diversos estudos desenvolvidos com o uso de ML aplicados a problemas de engenharia civil. Como exemplos, podemos citar Yaseen et al. (2018), que aplicaram técnicas de ML para medir a resistência ao cisalhamento de vigas de concreto armado e concluíram que esses algoritmos podem ser ferramentas úteis para profissionais. Pettres e Lacerda (2010) obtiveram resultados positivos no reconhecimento de padrões de defeitos no concreto com o uso de Redes Neurais Artificiais (RNA). Algoritmos baseados em ML também estão sendo usados com sucesso no campo de Monitoramento da Saúde Estrutural, especialmente em aplicações que envolvem detecção de danos em estruturas de concreto de grande escala, como pontes, barragens e edifícios (ALVES; CURY, 2021; ALMEIDA CARDOSO; CURY; BARBOSA, 2018).

Alguns autores também tentaram prever a resistência à compressão do concreto usando técnicas de ML. Por exemplo, [Hoang et al. \(2016\)](#) aplicaram o Processo Gaussiano de Regressão (GPR) para prever a resistência do concreto usando um conjunto de dados de 246 traços, definidos de acordo com o padrão vietnamita. Os autores alcançaram um  $R^2$  (coeficiente de determinação) de 0,90, concluindo que esses modelos são uma alternativa promissora para auxiliar engenheiros em canteiros de obras. Por sua vez, [Dao et al. \(2020\)](#) testaram a acurácia de RNA e GPR para o conjunto de dados montado por [Yeh \(1998\)](#), atualmente um dos mais utilizados mundialmente, utilizando simulação de Monte Carlo. O conjunto de dados foi simplesmente dividido em 70% das observações para treinamento e 30% para teste. Os autores obtiveram um  $R^2$  de 0,89 com o GPR e indicaram que esses algoritmos podem contribuir para o processo de desenvolvimento de traços. Da mesma forma, [Mustapha e Mohamed \(2017\)](#), também usaram o conjunto de dados de [Yeh \(1998\)](#) sem validação cruzada e obtiveram um  $R^2$  de 0,93 aplicando a Máquina de Vetor de Suporte para Regressão (SVR). Por fim, [Cui et al. \(2021\)](#) utilizaram um modelo de árvore de decisão para esta mesma finalidade, obtiveram um  $R^2$  acima de 0,80, e concluíram que esses modelos são adequados para auxiliar no dimensionamento de concretos.

Assim, as técnicas de ML são ferramentas promissoras para prever a resistência à compressão do concreto. No entanto, nenhum artigo foi encontrado comparando o XG-Boost, GPR, SVR e RNA para este propósito dentro do mesmo conjunto de dados e condições de contorno. Além disso, para o melhor conhecimento do autor, nenhum artigo validou os modelos treinados a partir do conjunto de dados tradicional de [Yeh \(1998\)](#) com um conjunto de dados diferente para testar a capacidade de generalização dos modelos. Nesse sentido, o presente trabalho compara a precisão dessas quatro técnicas de ML na previsão da resistência à compressão de corpos de prova convencionais de concreto e avalia os modelos resultantes em termos de sua capacidade de generalização para um conjunto de dados diferente. Procura-se, assim, encontrar a técnica mais adequada para usar em previsões futuras e refletir sobre as limitações da aplicação desses modelos a concretos e contribuir para uma maior automação do processo de definição de traços de concreto.

## 1.2 Objetivos

### 1.2.1 Objetivo Geral

Comparar o desempenho de quatro técnicas de ML na previsão da resistência à compressão de corpos de prova convencionais de concreto e avaliar os modelos resultantes em termos de sua capacidade de generalização para um conjunto de dados diferente daquele utilizado para treino.

## 1.2.2 Objetivos Específicos

### 1.2.2.1 Significância dos recursos de entrada

Mensurar a importância de cada parâmetro de entrada para a previsão final dos modelos de aprendizado de máquina.

### 1.2.2.2 Generalização dos modelos

Testar o poder de generalização dos modelos treinados para prever a resistência à compressão dos concretos de traços gerados no mundo todo.

## 2 Revisão da Literatura

### 2.1 Concreto

Segundo [Neville \(2013\)](#) o concreto é um material composto por uma mistura de cimento, agregados, água, aditivos e adições. Para que se obtenha as características desejadas para a finalidade específica do concreto, é realizado o que é chamado de dosagem do concreto. No processo de dosagem, define-se a quantidade ideal de cada um dos materiais a fim de obter um concreto com as propriedades necessárias para a realização da obra.

No processo de dosagem, cada constituinte citado irá possuir uma característica para contribuir no produto final, sendo o meio cimentício o principal material de construção. O fator água/cimento define a resistência à compressão do concreto, essa propriedade impacta diretamente na segurança da obra, pois influencia o comportamento e a durabilidade do concreto frente aos esforços solicitantes (ex. peso-próprio da estrutura, dos usuários, dos móveis, do vento, chuva, neve, calor, etc.). Dessa forma, quanto menos água e mais cimento, mais resistência aquele concreto possuirá ( a [Figura 2](#) demonstra essa relação). Já os agregados cumprem o papel de enchimento mais barato que reduz o efeito das variações volumétricas que são provocadas pela retração ([NEVILLE, 2013](#)). Por fim, os aditivos possuem um considerável papel na melhoria da trabalhabilidade e no adensamento do concreto ([NEVILLE, 2013](#)).

No entanto, como grande parte dos métodos da engenharia, tanto a dosagem quanto a aferição das propriedades do concreto, são feitas por meio de métodos empíricos e de extrema complexidade. O processo de dosagem, por exemplo, se baseia em padrões estabelecidos nos anos 80 ([BOGGIO, 2000](#)). Da mesma forma, a resistência à compressão é obtida por meio de métodos empíricos que demoram dias para serem realizados. Por consequência, diversos estudos de novos métodos para substituir os atuais, como por exemplo as técnicas de aprendizado de máquina têm sido realizados.



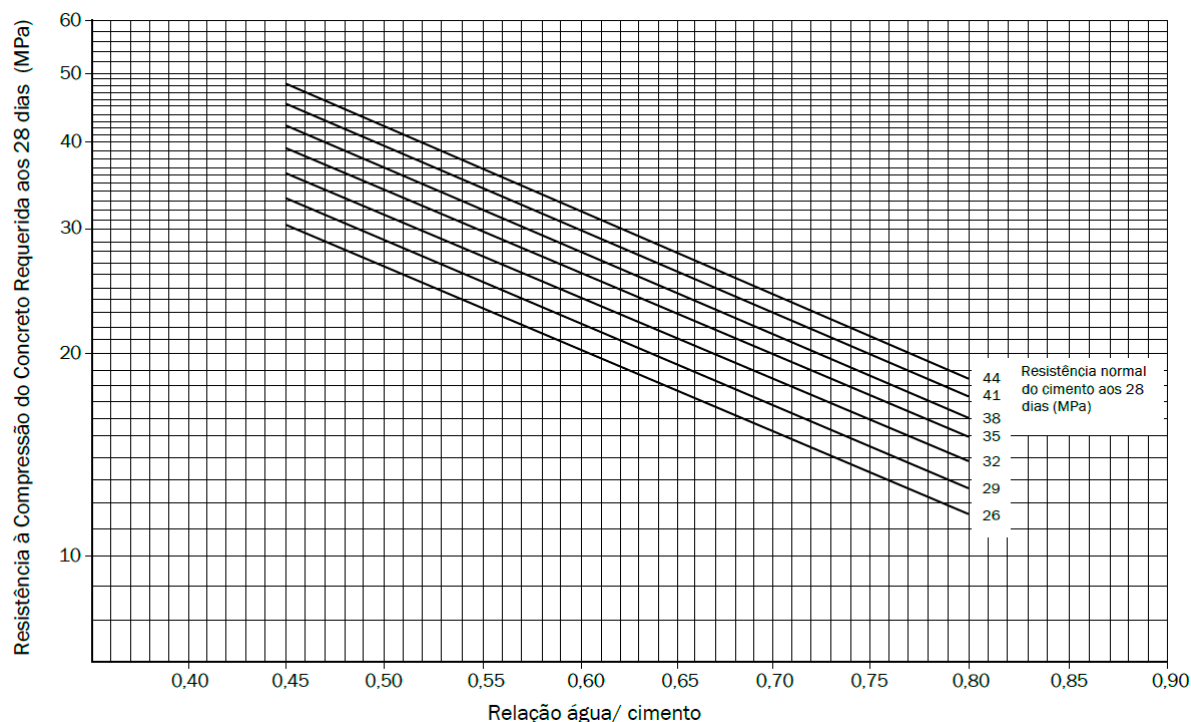


Figura 2 – Curvas de Abrams - Método ABCP. Fonte: Rodrigues (1990)

## 2.2 Indústria 4.0

A indústria 4.0 é um conceito importante que alterou todo o modelo de produção conhecido. Esse termo surgiu na Alemanha em 2011 para caracterizar um conjunto de estratégias que englobam o uso de alta tecnologia realizado pelo governo alemão (SANTOS, B. P. et al., 2018). Essa nova concepção tem como base a tecnologia, mais precisamente a digitalização das atividades, integrando a automação industrial com as novas técnicas como a computação em nuvem, inteligência artificial e a internet das coisas (BORLIDO, 2017; SANTOS, B. P. et al., 2018).

Podemos definir de acordo com Rüßmann et al. (2015) os nove pilares no qual a quarta geração industrial se baseia: Big data, Computação em nuvem, Integração de sistemas vertical e horizontal, Inteligência artificial, Internet das coisas, Realidade virtual, Robôs Autônomos, Segurança Cibernética, Simulação e Impressão 3D (PEREIRA; OLIVEIRA SIMONETTO, 2018; SILVA, 2017). O conjunto desses nove pilares são responsáveis por definir esse novo conceito de indústria, o qual transformou toda a concepção de produção que conhecemos, criando processos mais eficientes no qual as máquinas possuem um papel fundamental no processo (PEREIRA; OLIVEIRA SIMONETTO, 2018).

O avanço desse novo modelo de produção só foi possível devido a algumas evoluções no campo tecnológico. O núcleo da 4ª revolução industrial se baseia em sensores

interligados a sistemas que conseguem realizar ações a partir de observações anteriores de forma direta, ou seja, sem a necessidade de um humano para realizar a tomada de decisão (PEDROSA; NOGUEIRA, 2011; SANTOS, B. P. et al., 2018). Para que isso seja realizado, se faz necessário o armazenamento de uma grande quantidade de dados, algo que foi facilitado com o auxílio da computação em nuvem (SOUSA; MOREIRA; MACHADO, 2009; BORLIDO, 2017).

A computação em nuvem é um novo conceito tecnológico que tem como objetivo fornecer recursos computacionais de forma prática e sob demanda (PEDROSA; NOGUEIRA, 2011). O desenvolvimento dessa prática permite o armazenamento de grande quantidade de dados sem a necessidade de grandes espaços físicos, além de possibilitar o incremento dos recursos sem a complexidade dos *data centers* físicos, algo essencial na indústria 4.0 (SOUSA; MOREIRA; MACHADO, 2009; PEDROSA; NOGUEIRA, 2011). No entanto, não basta apenas uma infraestrutura que contemple o armazenamento de uma grande quantidade de dados, também se faz necessário uma forma para a análise desses conjuntos, fator principal para o uso de inteligência artificial nesse novo conceito de indústria (LEE, 2019).

A inteligência Artificial (IA) é uma ideia que se baseia em sistemas computacionais capazes de tomarem decisões de forma semelhante a seres humanos. Essas técnicas são usadas desde dos anos 50, no entanto, se limitavam a investigações acadêmicas. Todavia, os recentes avanços tecnológicos contribuíram para que essa ideia saísse da área acadêmica e fosse utilizada em larga escala, se tornando uma ferramenta essencial da indústria (LEE, 2019).

## 2.3 Aprendizado de Máquina

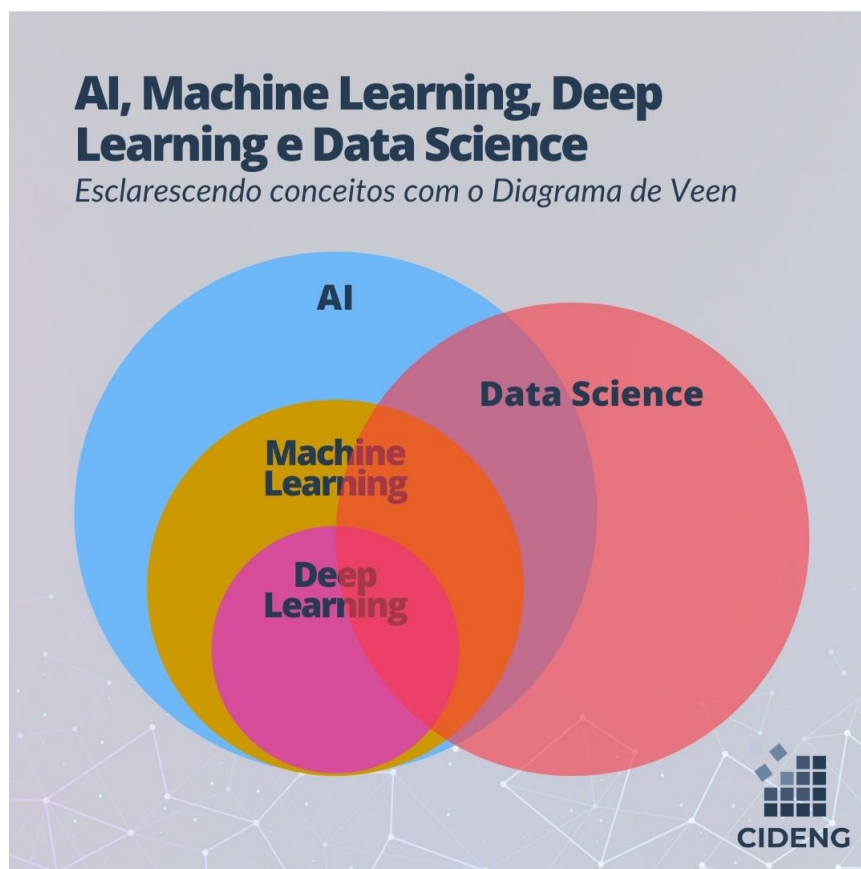


Figura 3 – Campos do aprendizado de máquina. Fonte: CIDENG (2022)

O aprendizado de máquina é um campo da Inteligência artificial, conforme mostrado na Figura 3, que se baseia em técnicas computacionais que são capazes de obter conhecimento de maneira automática. Esses algoritmos realizam a tomada de decisão por meio da análise de dados anteriores. Para que esses modelos funcionem de uma forma adequada é necessária uma grande quantidade de dados. Pode-se dividir os modelos de aprendizado de máquina em duas categorias principais: os supervisionados e os não supervisionados.

Os modelos de aprendizado supervisionados podem ser definidos como modelos que aprendem a partir de resultados pré-definidos. Para esses modelos, é fornecido um conjunto de dados para treinamento que possui o resultado que se espera na saída dado uma determinada entrada. Esses algoritmos podem ser utilizados para problemas de regressão, aqueles nos quais, obtém-se números contínuos na saída e problemas de classificação, aqueles cuja saída recebe valores discretos. Já os modelos não supervisionados são aqueles no qual o modelo não recebe nenhuma categorização para aprendizado, ou seja, o algoritmo irá agrupar os dados de acordo com as relações encontradas entre eles, sem que haja nenhuma influência predefinida.

Escolher a técnica certa, bem como definir um conjunto de dados adequado, são etapas essenciais na estrutura do aprendizado de máquina. Por exemplo, usar uma ferramenta com bom desempenho em vários problemas, mas treiná-la com dados não representativos resultará em previsões ruins (BATISTA et al., 2003; KARAHOCA, 2012).

Atualmente, essas técnicas são aplicadas em diversos campos da indústria. Pode-se citar, por exemplo, o trabalho de Chaves (2012), em que o autor adotou modelos de aprendizado de máquina em sensores e sistemas embarcados. No estudo, foi possível perceber uma melhora significativa na precisão e sensibilidade dos sensores utilizando o auxílio dessas técnicas. Pode-se citar ainda o trabalho de Bodo et al. (2015), no qual os autores obtiveram sucesso utilizando aprendizado de máquina para analisar indicadores na engenharia de *software*. Dessa forma, é possível perceber que essas técnicas estão bem difundidas atualmente em diversas áreas.

Assim como os campos citados anteriormente, a engenharia civil vem se beneficiando de técnicas de aprendizado de máquina para o aprimoramento de seus métodos. O presente estudo tratará da aplicação desses métodos para prever a resistência à compressão do concreto. No trabalho de Muro (2022), o autor abordou diversas técnicas de *Machine Learning* como Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP, do inglês *Multilayer Perceptron*) e regressão polinomial no intuito de comparar a previsão da resistência à compressão do concreto autoadensável nesses métodos. O estudo apresentou uma confiabilidade de 65% a 83% ( $R^2$ ) dos modelos e obteve uma média absoluta variando de 4,9 a 8,60. Apesar dos resultados não serem tão precisos, pode-se perceber que tais modelos apresentam um potencial interessante para a área. Em outro estudo recente, Nguyen et al. (2021) mostraram a eficiência dos modelos de aprendizado de máquina para prever a resistência à compressão do concreto de alto desempenho. Os autores utilizaram diversos modelos, entre eles Redes Neurais e Árvores de Decisão, sendo que os modelos baseados em árvores de decisão obtiveram melhores resultados com menor esforço computacional. Com base nessas evidências apresentadas, pode-se perceber a difusão e a importância dessas técnicas na área da engenharia.

### 3 Metodologia

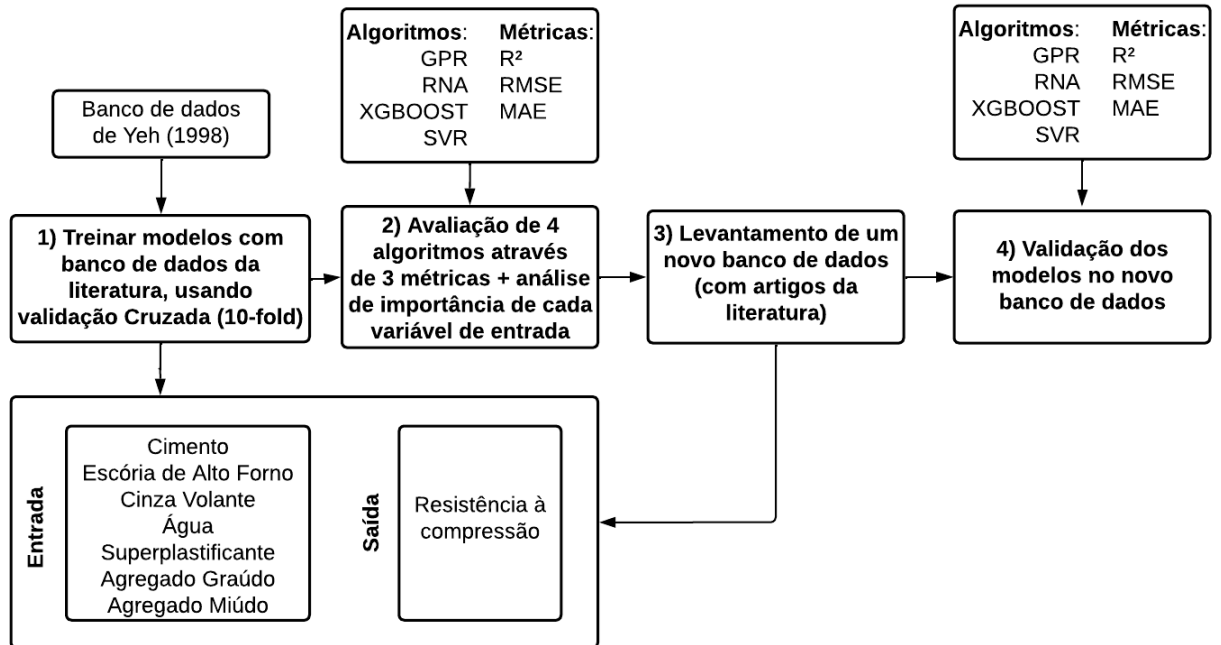


Figura 4 – Visão Geral da Metodologia. Fonte: Autor

A Figura 4 mostra uma visão geral do presente trabalho. Inicialmente, foram desenvolvidos quatro modelos de ML supervisionados para relacionar as características de entrada (componentes e proporções do concreto) com a variável alvo (resistência à compressão). Esses modelos foram construídos usando um conjunto de dados clássico disponível na literatura, reunido por Yeh (1998), um pesquisador taiwanês. Em seguida, avaliamos a qualidade da predição por meio de validação cruzada e três métricas estatísticas: coeficiente de determinação ( $R^2$ ), erro absoluto médio (MAE) e erro quadrático médio (RMSE). A significância de cada variável de entrada (componente de concreto) na previsão da resistência à compressão final também foi investigada. Em uma segunda etapa, para validação desses modelos, o autor montou um segundo conjunto de dados de 11 artigos de todo o mundo, com 22 novas observações. Este conjunto de dados foi então usado como valores de teste para os modelos criados anteriormente. A precisão desta previsão foi novamente avaliada usando as 3 métricas citadas anteriormente.

## 3.1 Técnicas de aprendizado de máquina

Como não existe um único modelo geral perfeitamente adaptável a todos os problemas de engenharia, quatro modelos supervisionados foram escolhidos para serem aplicados ao presente estudo: XGBoost, SVR, RNA e GPR. Eles foram selecionados com base em uma análise preliminar da literatura, na qual reuniu-se as técnicas que possuíam características de aprendizados distintas. Dentre eles, XGBoost, SVR, RNA e GPR foram os que apresentaram desempenho mais promissor para lidar com problemas complexos semelhantes.

Optou-se por ajustar manualmente os hiperparâmetros das técnicas sem focar em métodos de otimização específicos para cada uma. Os experimentos foram realizados em um computador com processador Intel Core i5-10210U e 8GB de RAM. Os algoritmos foram implementados em Python (versão 3.8.6) usando a biblioteca Pandas para analisar e manipular conjuntos de dados, e as bibliotecas scikit-learn, TensorFlow e XGBoost para aplicar os modelos de ML.

As seções a seguir forneceram uma descrição resumida desses métodos. Para explicações mais detalhadas, o leitor pode consultar as referências apresentadas no final de cada seção.

O repositório contendo todo o código desenvolvido e as bases de dados utilizadas estão disponíveis em [https://github.com/cidengcnpq/concrete\\_compressive\\_strength](https://github.com/cidengcnpq/concrete_compressive_strength).

### 3.1.1 Extreme Gradient Boosting (XGBoost)

#### 3.1.1.1 Principais Conceitos

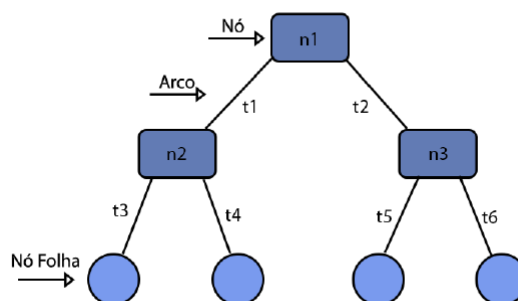


Figura 5 – Estrutura de uma Árvore de Decisão. Fonte: Penido (2022)

O XGBoost tem sido cada vez mais utilizado em diversas áreas de pesquisa por apresentar previsões acuradas e uma rápida execução para resolver problemas de classifi-

cação e regressão (CHEN; GUESTRIN, 2016). Este algoritmo é baseado na técnica clássica de árvore de decisão.

A estrutura de uma árvore de decisão pode ser descrita da seguinte forma: a árvore começa com um nó principal chamado “raiz” que se divide em vários outros nós, conforme pode-se ver na Figura 5. Cada um desses nós carrega uma condição para separar o conjunto de dados em subconjuntos que possuem características semelhantes (REZENDE, 2003). Geralmente, usar apenas uma árvore de decisão leva a previsões ruins; portanto, técnicas de *ensemble* são usualmente adotadas para melhorar o desempenho desses modelos (BAUER; KOHAVI, 1999). Os métodos *ensemble* consistem em combinar várias árvores para obter resultados mais confiáveis.

Um exemplo de *ensemble* é a técnica de boosting, que usa “n” árvores fracas sequencialmente para criar um preditor mais robusto ao final do treinamento (WOŹNIAK; GRANA; CORCHADO, 2014). O foco do método *boosting* é reduzir o viés e a variância a cada novo modelo criado, com base nas dificuldades enfrentadas pelo modelo anterior (SUEN; MELVILLE; MOONEY, 2005). O viés poderia ser definido como o quanto as predições são diferentes dos valores reais enquanto que a variância define a sensibilidade do modelo para realizar predições em outros conjuntos de dados. O XGBoost utiliza *gradient boosting*, uma extensão do método anterior, no qual um gradiente descendente é aplicado para melhorar as árvores, de acordo com o erro dos modelos anteriores.

O XGBoost pode ser descrito brevemente da seguinte forma: para um determinado conjunto de dados  $D = (x_i, y_i) (|D| = n, x_i \in \mathbb{R}^m, y_i \in \mathbb{R})$ , com  $x_i, y_i$  (entradas e saídas, respectivamente),  $m$  características e  $n$  observações, o modelo usa  $K$  funções aditivas para prever saídas (CHEN; GUESTRIN, 2016):

$$\hat{y}_i = \emptyset(X_i) = \sum_{k=1}^k f_k(x_i), f_k \in F. \quad (3.1)$$

com  $\hat{y}_i$  sendo a saída do modelo e  $F$  o espaço da árvore de regressão, definida como:

$$F = \{f(x) = w_{q(x)}\} (q : \mathbb{R}^m \rightarrow T, w \in \mathbb{R}^T) \quad (3.2)$$

A estrutura de cada árvore é representada por  $q$ , enquanto o número de folhas e seus pesos são representados por  $T$  e  $w$ , respectivamente. Além disso, o termo  $f_k$  representa uma estrutura de árvore independente com pesos de folha  $w$ . No processo de

otimização da árvore de regressão, a seguinte função objetivo deve ser minimizada (CHEN; GUESTRIN, 2016):

$$L(\emptyset) = \sum_i l(\hat{y}_i, y_i) + \sum_k \Omega(f_k) \quad (3.3)$$

Existe também uma função de perda convexa  $l$  que mede a diferença entre  $\hat{y}_i$  e  $y_i$  que são, respectivamente, a previsão dada pelo modelo e o valor real. O termo  $\Omega$  penaliza a complexidade das árvores de regressão e é dado por (CHEN; GUESTRIN, 2016):

$$\Omega(f_k) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \|w\|^2 \quad (3.4)$$

No entanto, os modelos que usam aumento de gradiente são treinados de forma aditiva. Nesses casos, a seguinte função objetivo é minimizada:

$$L(\emptyset) = \sum_i l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)) + \Omega(f_t) \quad (3.5)$$

o número de iterações  $f_t$  é adicionado na função objetivo (CHEN; GUESTRIN, 2016).

### 3.1.1.2 Definições para o presente projeto

Em relação à implementação do algoritmo, este modelo não necessita de muitos ajustes. Assim, realizou-se alguns testes preliminares para definir seus hiperparâmetros ótimos. Para uma explicação mais detalhada sobre este método, recomenda-se as referências Chen e Guestrin (2016) e Suen, Melville e Mooney (2005).

## 3.1.2 Máquina de Vetores de Suporte para Regressão (SVR)

### 3.1.2.1 Principais Conceitos

Máquina de vetores de suporte (Support Vector Machine - SVM, do inglês) é um modelo de aprendizado supervisionado que cria um hiperplano capaz de separar dados em classes distintas (MEYER; WIEN, 2015). Existem infinitos hiperplanos capazes de realizar esta tarefa. No entanto, este algoritmo busca encontrar aquele que produz a maior distância entre as classes. Para isso, o SVM encontra os pontos localizados nas margens (os vetores de suporte) e maximiza a margem (FINOTTI; CURY; BARBOSA, 2019). Em outras palavras, o algoritmo define inicialmente um hiperplano que separa os dados para posteriormente determinar os pontos de cada classe que estão mais próximos desse separador. Por fim,



busca-se o hiperplano que conduz à maior distância entre as duas classes, denominado hiperplano “ótimo”, conforme é possível ver na Figura 6 (NOBLE, 2006).

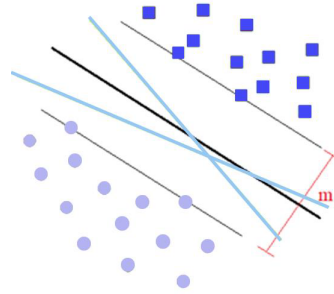


Figura 6 – Exemplo de uma separação realizada pelo SVR. Fonte: Penido (2022)

Além de problemas lineares, esses algoritmos podem ser usados para resolver problemas não lineares, usando *kernels*. A aplicação do *kernel* ao modelo aumenta o número de dimensões do espaço de entrada, transformando assim os dados inicialmente não separáveis em dados separáveis pelo algoritmo (NOBLE, 2006).

Dado que a previsão da resistência do concreto é um problema de regressão, o autor utilizou a variante Máquina de Vetores de Suporte para Regressão (Support Vector Regression - SVR, do inglês) neste trabalho. Ele tem o mesmo princípio do SVM, mas se concentra na resolução de problemas de regressão.

O SVR pode ser descrito resumidamente da seguinte forma: para um conjunto de dados  $(X_1, y_1), \dots, (X_i, y_i) \subset X \times \mathbb{R}$ , onde  $X_i$  representa o espaço das variáveis de entrada, o objetivo da regressão é encontrar uma função  $f(x)$  que tenha no máximo um desvio  $\epsilon$  dos valores reais  $y_i$ . Para a função linear (SMOLA; SCHÖLKOPF, 2004):

$$f(x) = \langle w, x \rangle + b \quad \text{com } w \in X, b \in \mathbb{R} \quad (3.6)$$

o SVR transformará este problema em um problema de otimização restrita:

$$\min \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad (3.7)$$

sujeito às seguintes restrições:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_i - \langle w, X_i \rangle - b \leq \epsilon \\ \langle w, X_i \rangle + b - y_i \leq \epsilon \end{array} \right\} \quad (3.8)$$

O erro das previsões do modelo é tratado dentro das restrições. O modelo SVR adota uma função de perda insensível a *epsilon*, que penaliza as previsões que estão mais distantes que *epsilon* da saída desejada (SMOLA; SCHÖLKOPF, 2004).

### 3.1.2.2 Definições para o presente projeto

Para realizar o ajuste de hiperparâmetros para o modelo SVR, o autor variou o coeficiente de *kernel* (também conhecido como *gamma*) e o parâmetro de regularização ‘C’ aleatoriamente de  $10^{-2}$  a  $10^3$ . Os melhores resultados foram alcançados com *gamma* e C como 0,6 e 33, respectivamente. Para uma explicação mais detalhada sobre este método, o autor recomenda as referências Smola e Schölkopf (2004) e Garcia (2011).

## 3.1.3 Redes neurais artificiais (RNA)

### 3.1.3.1 Principais Conceitos

As Redes Neurais Artificiais (RNA) foram desenvolvidas com base em estudos do cérebro humano (GARCIA, 2011). Esses algoritmos têm sido amplamente aplicados para resolver problemas em diversas áreas ao redor do mundo, devido à sua robustez para lidar com tarefas complexas (SADEK et al., 2019; MOHAMMAD; MCCLUSKEY; THABTAH, 2013). As RNAs consistem em vários elementos de processamento, chamados neurônios, conectados uns aos outros. A Figura 7 representa o modelo de neurônio único, também conhecido como *perceptron*.

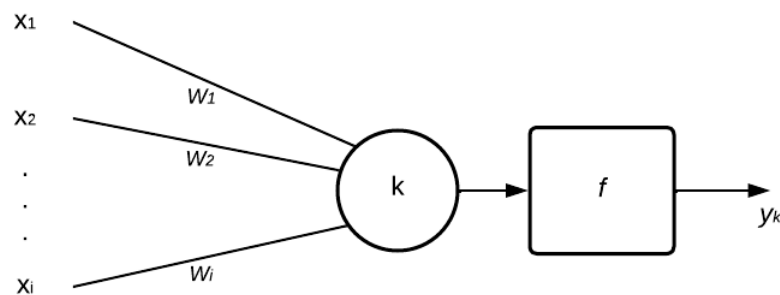


Figura 7 – Representação de um perceptron. Fonte: Autor

O neurônio receberá os valores de entrada  $X_i$ ; essas entradas são multiplicadas pelos pesos sinápticos  $w_i$ . Cada neurônio também tem um viés  $b$ . Esse viés não possui dados de entrada associados, permitindo que o neurônio altere a saída independentemente dos valores de entrada. O neurônio  $k$  realiza a soma ponderada dos sinais recebidos. Finalmente, essa soma passa pela função de ativação  $f$  para produzir a saída, conforme a equação (BARRETO, 2002):

$$y_k = f\left(\sum_{i=1}^n w_i X_i + b\right) \quad (3.9)$$

Uma das arquiteturas mais utilizadas pelos modelos de RNAs é o Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP). Nas MLPs, os neurônios são divididos em camada de entrada, camadas ocultas e camadas de saída, conforme mostrado na Figura 8 (BARRETO, 2002).

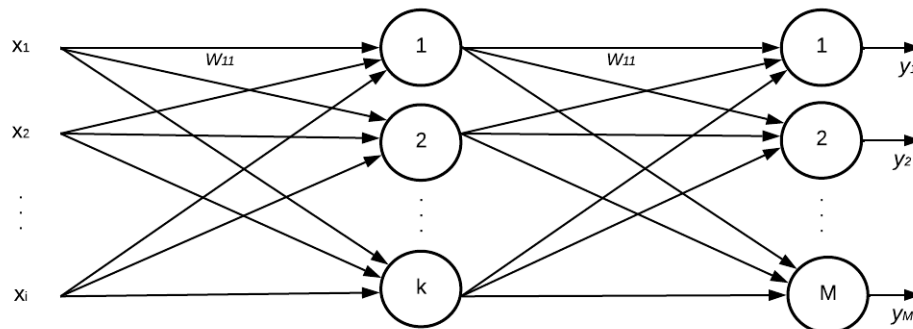


Figura 8 – Representação de uma MLP com uma camada oculta. Fonte: Autor

Para um MLP, como o representado na Figura 8, o mecanismo de apenas um neurônio é usado para cada uma das camadas (BARRETO, 2002):

$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^n w_{ij}^{(l-1)} X_i^{(l-1)} + b^{(l-1)}\right), \text{ para } j = 1, \dots, k^l \quad (3.10)$$

Portanto,  $y_j$  fornecerá a saída de cada neurônio em sua respectiva camada  $l$  (FINOTTI; CURY; BARBOSA, 2019). Para uma explicação mais detalhada sobre este método, recomenda-se as referências Garcia (2011) e (BARRETO, 2002).

### 3.1.3.2 Definições para o presente projeto

Para definir o número de camadas ocultas e o número de neurônios por camada de RNA para o presente trabalho, realizou-se uma análise de sensibilidade. O modelo foi treinado várias vezes com o conjunto de dados de Yeh (1998) variando o número de camadas de 1 a 7, e o número de neurônios de 4 a 512, por camada. A partir da análise das métricas de avaliação, foi implementado o modelo final com 5 camadas ocultas e 256 neurônios.

### 3.1.4 Processo Gaussiano de Regressão (GPR)

#### 3.1.4.1 Principais Conceitos

O Processo Gaussiano de Regressão (GPR) é uma técnica de regressão não-paramétrica que usa uma distribuição de probabilidade para prever o resultado. Por meio dos dados de treinamento fornecidos, esta técnica utiliza a regra de Bayes para atualizar as probabilidades de cada função que representa o modelo (RASMUSSEN, 2003). A principal vantagem do GPR é que ele fornece uma aproximação da incerteza de cada previsão (RASMUSSEN, 2003). O GPR pode ser definido da seguinte forma (RASMUSSEN, 2003):

$$f(x) \sim GP(m(x), k(x_i, x_j)) \quad (3.11)$$

onde  $m(x)$  é uma função média e  $k(x_i, x_j)$  uma função de covariância (ou *kernel*) da distribuição GP Gaussiana (RASMUSSEN, 2006) para amostras  $x_i$  e  $x_j$ . Escolher a função do *kernel* é uma das etapas mais importantes na implementação desse modelo. Assim como nos modelos SVR, essas funções são responsáveis por suavizar a função que está sendo modelada, o que afetará a qualidade da previsão (RASMUSSEN, 2006).

#### 3.1.4.2 Definições para o presente projeto

Este trabalho adotou o *kernel* Radial Basis Function (RBF). RBF é uma função de *kernel* estacionária que usa o quadrado da distância euclidiana entre dois vetores, como (STEINWART; HUSH; SCOVEL, 2006):

$$k(x_i, x_j) = \exp\left(-\frac{d(x_i, x_j)^2}{2l^2}\right) \quad (3.12)$$

com  $d(x_i, x_j)$  sendo a distância euclidiana e  $l$  a escala de comprimento da função *kernel*  $l$ . Com base em validações anteriores, considerando várias simulações diferentes, esta função mostrou-se a mais adequada para o presente estudo.

Assim como nos modelos anteriores, também foi realizada uma otimização de hiperparâmetros para o GPR. Para tanto, o parâmetro “alfa” do modelo foi variado aleatoriamente de  $10^{-3}$  a  $10^2$ . Este hiperparâmetro é o valor adicionado à diagonal da matriz do *kernel* durante o processo. O valor de 0,2 foi definido. Para uma explicação mais detalhada sobre este método, recomenda-se as referências Rasmussen (2003) e Rasmussen (2006).

## 3.2 Análise de dados

### 3.2.1 Conjunto de dados de treino

No presente trabalho, o conjunto de dados de composições de concreto foi coletado a partir de dados disponíveis na literatura. Para a primeira parte da construção dos modelos, o autor utilizou o “*Concrete Compressive Strength Data Set*” dos estudos realizados por [Yeh \(1998\)](#). Este conjunto de dados tem oito recursos de entrada: Cimento, Escória de Alto Forno, Cinzas volantes, Água, Superplastificante, Agregado Graúdo, Agregado Miúdo e Idade. O conjunto também possui o recurso de saída “Resistência à Compressão do Concreto”, variando de 2 a 82 MPa. O conjunto de dados completo tem 1030 observações distintas (entradas) e compreende amostras de 17 fontes diferentes, a maioria delas originadas de pesquisas realizadas entre 1987 e 1997 - em Taiwan. Esses traços compreendiam corpos de prova de diferentes formas e tamanhos. Assim, o autor original realizou uma padronização, por meio de índices de correlação da literatura, para que todos os resultados de resistência à compressão correspondessem a corpos de prova cilíndricos de 15 cm de base e altura. Além disso, o autor especificou que o agregado graúdo de todos os traços tinham dimensões inferiores a 20mm e que os superplastificantes eram originários de diversos fabricantes ([YEH, 1998](#)).

As etapas de pré-processamento incluem a preparação de dados antes de fazer previsões. Em geral, esta parte consiste em resolver problemas de dimensionamento, analisando os *outliers* e valores ausentes que impactam diretamente no desempenho dos modelos ([BAPTISTA et al., 2003](#)). No presente trabalho não foi utilizado o parâmetro responsável por informar o tempo de cura do concreto (idade). Devido à convenção de projeto de 28 dias para se atingir a resistência desejada do concreto para fins convencionais, foram utilizadas apenas instâncias que possuíam essa idade. Todos os dados referentes a outros tempos de cura foram removidos do conjunto para evitar vieses. Esta etapa reduziu o número de observações de 1030 para 419.

Um segundo ajuste incluiu a filtragem dos valores da variável de saída. Este trabalho tem como objetivo avaliar concretos estruturais de resistência normal, cujos valores variam entre 15-50 MPa ([ABNT., 2014](#)). Como os *outliers* são os grandes responsáveis por dificultar a modelagem do fenômeno, o autor decidiu remover todos os dados acima de 50 e abaixo de 15 MPa, buscando obter um modelo mais robusto para a faixa de resistência definida. Assim, no total, 329 observações (32% do conjunto de dados inicial) foram adotadas para a criação dos modelos. A Tabela 1 mostra as características do conjunto de dados final utilizado.

Tabela 1 – Visão geral do dataset do Yeh's (1998) depois do pré-processamento.

Parâmetro	Unidade	Min	Max	Média	D.P
Cimento Portland	kg/m <sup>3</sup>	102,00	516,00	242,66	87,72
Escória de Alto Forno	kg/m <sup>3</sup>	0,00	359,40	89,68	89,50
Cinzas volantes	kg/m <sup>3</sup>	0,00	200,10	64,73	65,82
Água	kg/m <sup>3</sup>	121,80	247,00	186,72	17,69
Superplastificante	kg/m <sup>3</sup>	0,00	22,10	6,18	5,03
Agregado Graúdo	kg/m <sup>3</sup>	801,00	1145,00	958,13	80,68
Agregado Miúdo	kg/m <sup>3</sup>	594,00	945,00	763,81	70,91
Resistência à Compressão	MPa	15,09	49,90	32,36	8,52

### 3.2.2 Conjunto de dados de validação

Para testar a capacidade de generalização dos modelos implementados, o autor montou um novo conjunto de dados com traços de concreto disponíveis na literatura. Os traços foram retiradas de 11 artigos (listados no Apêndice), originários de 8 países diferentes, incluindo o Brasil. Para que o conjunto de validação fosse compatível com o modelo, a resistência à compressão foi padronizada para corresponder a corpos de prova cilíndricos de 150×300mm (os mesmos usados no conjunto de dados de Yeh), usando as correlações de Yi, et al. (YI; YANG; CHOI, 2006). Além disso, a mesma filtragem de dados foi realizada para considerar apenas resistências entre 15 e 50MPa. Assim, o conjunto de validação final teve 22 observações, descritas na Tabela 2.

Tabela 2 – Visão geral do *dataset* de validação do autor depois do pré-processamento.

Parâmetro	Unidade	Min	Max	Média	D.P
Cimento	kg/m <sup>3</sup>	220,0	568,8	379,8	90,4
Escória de Alto Forno	kg/m <sup>3</sup>	0,0	410,5	81,0	112,7
Cinzas volantes	kg/m <sup>3</sup>	0,0	25,0	4,5	9,9
Água	kg/m <sup>3</sup>	138,0	250,3	204,9	28,8
Superplastificante	kg/m <sup>3</sup>	0,0	11,3	2,0	3,2
Agregado Graúdo	kg/m <sup>3</sup>	656,3	1029,0	879,2	126,9
Agregado Miúdo	kg/m <sup>3</sup>	477,7	1029,3	802,4	155,7
Resistência à Compressão	MPa	19,6	40,3	33,5	6,0

### 3.2.3 Redimensionamento de dados

Ao trabalhar com ML, outro fator importante é a escala dos dados. Alguns modelos, como as RNA, não funcionam bem com entradas que possuem escalas diferentes, o que pode levar o modelo a priorizar uma determinada entrada simplesmente por ter uma escala maior (FERREIRA; LE; ZINCIR-HEYWOOD, 2019). Em relação ao presente trabalho, a Tabela 1 mostra que os dados referentes ao superplastificante variam de 0 a 22 Kg/m<sup>3</sup>,

enquanto os valores de agregado graúdo variam de 801 a 1145 Kg/m<sup>3</sup>, evidenciando que os dados de diferentes características não estão na mesma magnitude. Assim, redimensionou-se os dados de entrada, usando a fórmula (FERREIRA; LE; ZINCIR-HEYWOOD, 2019):

$$x_i^{novo} = \frac{x_i^{original} - \mu}{\sigma} \quad (3.13)$$

onde  $x_i^{original}$  é o valor de entrada original,  $\mu$  é a média,  $\sigma$  é o desvio padrão e  $x_i^{novo}$  o valor de entrada modificado. Após a etapa de reescalonamento, todos os valores são centrados em zero com um desvio padrão igual a 1.

### 3.2.4 Validação Cruzada

A validação cruzada é uma técnica amplamente utilizada para auxiliar na avaliação de modelos de ML (SANTOS, M. S. et al., 2018). Ela consiste em dividir aleatoriamente os dados em “k” conjuntos, cada um dos quais é usado para validar o modelo uma vez (SHAO, 1993; BLOCKEEL; STRUYF, 2002). Essa estratégia fornece uma avaliação menos viesada em comparação com técnicas comuns, como apenas dividir os dados uma vez em treinamento e teste.

Este estudo adotou k=10, que é amplamente utilizado na literatura para problemas semelhantes (BONIFÁCIO et al., 2019; HOANG et al., 2016; FENG et al., 2020). Inicialmente, o conjunto de dados completo é dividido aleatoriamente em 10 subconjuntos ou dobras. Na primeira iteração, o primeiro subconjunto é usado para testar o modelo, após todos os outros terem sido usados para treiná-lo. Na próxima iteração, o algoritmo usa a segunda segmentação para testar o modelo depois de usar todo o resto para treinamento. Este procedimento é repetido até que todos os 10 conjuntos tenham sido utilizados para testar o modelo, conforme ilustrado na Figura 9. Os resultados apresentados neste trabalho correspondem à média das 10 iterações.



Figura 9 – Esquema do processo de validação cruzada para  $k=10$ . Fonte: Autor

### 3.2.5 Métricas de avaliação

Três métricas quantitativas foram utilizadas para avaliar o desempenho de cada modelo, visando, em conjunto, fornecer uma análise global de sua acurácia, são eles, o coeficiente de determinação ( $R^2$ ), o erro absoluto médio (MAE) e a raiz quadrada do erro médio (RMSE). Eles são amplamente utilizados para avaliar modelos de regressão para esse tipo de problema (BONIFÁCIO et al., 2019; DEEPA; SATHIYAKUMARI; SUDHA, 2010; YOUNG et al., 2019).

O  $R^2$  é calculado usando 3.14 (CAMERON; WINDMEIJER, 1997), onde  $\hat{y}$  é o valor previsto pelo modelo e  $y$  é o valor observado.  $R^2$  resulta em um número entre menos infinito e 1. Quando o modelo analisado se ajusta perfeitamente aos dados, o  $R^2$  assumirá o valor 1, indicando que os preditores são capazes de explicar toda a variabilidade dos dados (DEROUSSEAU et al., 2019). Como o  $R^2$  compara o desempenho do modelo testado com uma linha plana (um modelo de linha de base em que todas as previsões serão valor médio dos outputs), se o modelo avaliado apresentar um ajuste pior do que a linha que representa o valor médio, o  $R^2$  será negativo (DEROUSSEAU et al., 2019).

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (3.14)$$

O MAE mede a magnitude média dos erros (a diferença entre os valores observados e previstos), independentemente de sua direção. Pode ser determinado usando 3.15



(WILLMOTT; MATSUURA, 2005). No MAE, grandes erros causados por *outliers* não são tão importantes, porque esta métrica é absoluta e não quadrática (DEROUSSEAU et al., 2019).

$$MAE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (3.15)$$

Por fim, o RMSE 3.16 (WILLMOTT; MATSUURA, 2005) é uma métrica muito utilizada quando o pesquisador deseja medir a magnitude média e quando se deseja penalizar mais os erros maiores (DEROUSSEAU et al., 2019). Diferentemente do MAE, no RMSE, à medida que o erro de cada previsão aumenta, o RMSE aumenta consideravelmente (DEROUSSEAU et al., 2019).

$$RMSE(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3.16)$$

Tanto o MAE quanto o RMSE variam de zero a infinito positivo. Quanto menores essas métricas, melhor o modelo.

### 3.2.6 Significância dos recursos de entrada

Por fim, buscou-se entender o impacto que cada recurso teve nas previsões. Para esta avaliação, foi utilizada a técnica de árvore de decisão (XGBoost). Nesses modelos, cada nó tem a condição de dividir os valores para que instâncias semelhantes acabem no mesmo conjunto. A condição é baseada na impureza de Gini para problemas de classificação e na variância para problemas de regressão (ZHOU; HOOKER, 2021). Assim, quando um modelo baseado em árvore de decisão é treinado, ele calcula intrinsecamente o quanto cada variável contribui para a redução da variância e, conseqüentemente, pode estimar a utilidade de cada variável para a construção do modelo. Para um conjunto de dados L com classes j, a Equação 3.17 calcula a impureza Gini, com pi sendo a probabilidade de classe (TANGIRALA, 2020). A impureza Gini varia de 0 a 1, com 0 relacionado a um nó impuro. Quanto menor o Gini, mais importante essa variável é para a árvore (ZHOU; HOOKER, 2021).

$$Gini(L) = 1 - \sum_{i=1}^j p_i^2 \quad (3.17)$$

## 4 Resultados

### 4.1 Criação e avaliação dos modelos

A Tabela 3 resume as métricas de avaliação ( $R^2$ , MAE e RMSE) dos quatro modelos criados para prever a resistência à compressão de corpos de prova de concreto convencional. Nesta etapa inicial, os modelos foram treinados e validados de forma cruzada com o conjunto de dados [Yeh \(1998\)](#). O XGBoost obteve a melhor correlação entre os valores previstos e observados, atingindo um  $R^2$  de 0,83. Por outro lado, o SVR teve o pior desempenho ( $R^2 = 0,79$ ), embora tenha ficado muito próximo dos demais modelos ( $R^2 = 0,82$ ).

Como parte da avaliação dos melhores modelos para desenvolver estudos futuros, registrou-se o tempo necessário para processar cada algoritmo. Devido à pequena quantidade de dados disponíveis para treinamento, o tempo de execução variou de 0,15 (SVR) a 69,73 segundos (RNA). Apesar de ambos serem períodos relativamente curtos, o tempo de processamento para o modelo RNA foi aproximadamente 465 vezes o do SVR, 50 vezes o XGBoost e 19 vezes o GPR. Esse resultado significa que a aplicação de RNAs em conjuntos de dados maiores pode ser impraticável dependendo da situação ou exigiria um hardware mais avançado (e caro) que o utilizado neste trabalho.

Tabela 3 – Avaliação dos 4 modelos de aprendizado de máquina desenvolvidos: Extreme Gradient Boosting (XGBoost), Máquinas de Vetor de Suporte para Regressão (SVR), Redes Neurais Artificiais (RNA), Modelo Gaussiano de Regressão (GPR).

Modelo	Tempo de execução (s)	$R^2$	RMSE (MPa)	MAE (MPa)	Máximo erro absoluto (MPa)	Mínimo erro absoluto (MPa)
XGBoost	1,40	0,83	3,41	2,24	18,78	0,00
SVR	0,15	0,79	3,73	2,26	19,90	0,00
RNA	69,73	0,82	3,40	2,26	23,79	0,01
GPR	3,67	0,82	3,43	1,96	21,12	0,00

O melhor modelo obteve um  $R^2$  menor que o de outros autores que utilizaram o mesmo conjunto de dados reunido por [Yeh \(1998\)](#). Por exemplo, [Dao et al. \(2020\)](#) utilizaram GPR e RNA para obter a resistência à compressão do concreto e atingiram  $R^2$  de 0,89 (contra os 0,82 mostrados na Tabela 3). No entanto, ao contrário do trabalho atual, esses autores utilizaram o tempo de cura como uma das características e avaliaram todas as faixas de resistência. Isso significa que eles tiveram acesso a um conjunto de dados maior e suas métricas foram impulsionadas por previsões “mais fáceis” (já que a

variabilidade da resistência do concreto em 3 e 7 dias é geralmente muito menor do que em 28 dias). Para fins de comparação, ao se aplicar o conjunto de dados completo aos modelos desse trabalho, obteve-se um  $R^2$  variando de 0,87 a 0,93.

Da mesma forma, [Mustapha e Mohamed \(2017\)](#) aplicaram SVR ao conjunto de dados de [Yeh \(1998\)](#), obtendo  $R^2$  de até 0,93 (versus 0,79 neste trabalho). No entanto, [Mustapha e Mohamed \(2017\)](#) não apenas usaram o conjunto de dados completo (todas as idades e resistências), mas também não realizaram validação cruzada para remover possíveis vieses ao dividir os dados para treinamento e teste.

Também é possível comparar a precisão dos modelos deste trabalho com trabalhos em que os autores produziram seus próprios corpos de prova de concreto. Por exemplo, [Lam, Nguyen e Le \(2022\)](#) produziram 75 corpos de prova para obter os dados utilizados em seus algoritmos. Eles construíram um modelo baseado em RNA que obteve  $R^2 = 0,92$ , (versus  $R^2 = 0,82$  no trabalho atual). No entanto, esse tipo de abordagem pode limitar a capacidade de generalização do modelo, pois os algoritmos aprenderam de apenas uma fonte homogênea de concreto.

Em relação às demais métricas, os modelos XGBoost e RNA obtiveram resultados de RMSE e MAE muito semelhantes, em torno de 3,40 MPa e 2,24 MPa, respectivamente. O GPR obteve um MAE menor, 1,96 MPa, e um RMSE ligeiramente maior, 3,43 MPa. Assim como os resultados do  $R^2$ , o SVR apresentou os piores resultados, MAE de 2,26 MPa e RMSE de 3,73 MPa. Vale ressaltar que os modelos propostos no presente trabalho resultaram em valores de MAE e RMSE relativamente próximos. À primeira vista, esses resultados indicam um bom desempenho dos modelos.

Comparativamente, [Dao et al. \(2020\)](#), mencionado anteriormente, obtiveram um RMSE de 5,46 MPa e um MAE de 3,86 MPa – usando o conjunto de dados do [Yeh \(1998\)](#), incluindo resistências à compressão superiores a 50 MPa. Nas mesmas condições, [Mustapha e Mohamed \(2017\)](#) atingiram um MAE de 5,89 MPa. Também pode-se citar [Hoang et al. \(2016\)](#), que alcançaram um RMSE de 4,04 MPa, embora tenham criado seu próprio conjunto de dados de 246 corpos de prova (variando de 13,5 a 85,2 MPa).

É importante lembrar que o RMSE é influenciado pelo quadrado dos erros individuais ([DEROUSSEAU et al., 2019](#)). Assim, os erros grandes são mais penalizados do que os pequenos. Portanto, essa métrica é recomendada para avaliar modelos quando grandes erros são particularmente indesejáveis (neste caso da previsão da resistência do concreto). No entanto, [Willmott e Matsuura \(2005\)](#) defendem que o RMSE não deve ser utilizado para comparar dois ou mais modelos, pois esse valor varia de acordo com a escala dos erros. Os autores afirmam que o MAE é uma métrica que representa a magnitude do erro de forma mais natural e, portanto, as comparações entre diferentes modelos devem ser baseadas no MAE.

Dada a natureza heterogênea dos compósitos à base de cimento e da infraestrutura dos canteiros de obras, o cálculo da resistência média alvo do concreto geralmente é influenciado pelo controle de qualidade de sua preparação. No Brasil, esses parâmetros são definidos pela NBR 12655 (ABNT., 2015). O menor valor de desvio padrão para o cálculo desta resistência, considerando as melhores condições de preparo, concreto de resistência normal e sem experimentos prévios, é de 4,0 MPa (ABNT., 2015). Assim, os valores de RMSE e MAE para todos os modelos ficaram abaixo do desvio padrão indicado pela NBR 12655. Nota importante: esta comparação não é uma medida de segurança desta metodologia de projeto de traço, mas mostra que a média ponderada dos erros obtidos por meio dos algoritmos de ML são menores do que a variabilidade típica considerada entre corpos de prova em um canteiro de obras.

Em relação aos erros individuais, a Figura 10 mostra a distribuição de frequência dos erros absolutos (a diferença entre os valores previstos e observados) para todos os traços no conjunto de dados, independentemente da direção. Para todos os modelos, pelo menos 84% (275 instâncias) dos erros ficaram abaixo de 5MPa (para SVR), chegando a 91% (300 instâncias) (para RNA). Para qualquer algoritmo, menos de 3% das previsões (10 instâncias) desviaram mais de 10 MPa dos valores reais. No entanto, o erro absoluto máximo atingiu 18,78 – 21,12 MPa, que é um valor significativo para aplicações práticas.

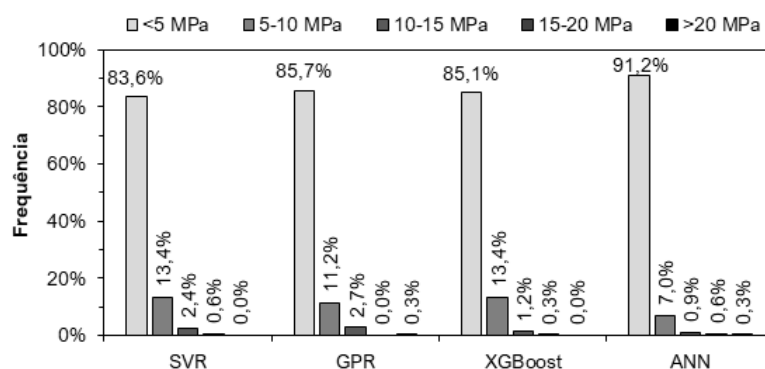


Figura 10 – Frequência de erros (diferença entre os valores preditos e observados) para as 329 amostras avaliadas. Fonte: Autor

Buscando entender os fatores que levaram a esses altos erros singulares, o autor reuniu os 10 traços de concreto que levaram os modelos aos maiores desvios, mostrados na Tabela 4. Essa tabela revela que 3 observações se repetem em todos os modelos (sendo os 3 principais erros do XGBoost, RNA e GPR); e outros 3 são repetidos em 3 modelos.

Ao analisar as observações que apresentaram os maiores erros, percebe-se que se referem a concretos com proporções não-convencionais de materiais. Por exemplo, o traço  $n^{\circ}$  1 de XGboost (que também foi  $n^{\circ}$  1 em SVR, RNA e GPR), possui apenas 200 kg/m<sup>3</sup> de cimento Portland (e outros 200 kg/m<sup>3</sup> de escória de alto-forno), um fator a/c incomum razão de 0,95, e ainda atingiu 49,25 MPa (contra uma média de 27,7 MPa, prevista pelos

algoritmos). Por outro lado, o traço 2 em XGBoost (que foi 3 em GPR e RNA, e 7 em SVR) tem um consumo de cimento de 436 kg/m<sup>3</sup>, relação a/c de 0,5 e atingiu apenas 23,85 MPa (enquanto os algoritmos previam aproximadamente 38,9 MPa). As outras observações que se repetiram nos 10 principais erros também mostraram proporções de traço que não são comumente encontradas em concretos convencionais (por exemplo, mais de 30% de adições minerais em relação à massa de cimento).

Tabela 4 – Os 10 piores valores observados para cada modelo em relação ao erro absoluto.

Algoritmo	#	Cimento	Escória de Alto Forno	Cinzas volantes	Água	Superplastificante	Agregado graúdo	Agregado Miúdo	Resistência observada	Resistência predita	Erro
XGBoost	1 <sup>1</sup>	200,00	200,00	0,00	190,00	0,00	1145,00	660,00	49,25	30,47	18,78
	2 <sup>1</sup>	436,00	0,00	0,00	218,00	0,00	838,40	719,70	23,85	38,46	14,61
	3 <sup>1</sup>	277,10	0,00	97,40	160,60	11,80	973,90	875,60	48,28	35,19	13,09
	4	165,00	0,00	150,00	182,00	12,00	1023,00	729,00	18,03	29,09	11,06
	5 <sup>3</sup>	194,70	0,00	100,50	170,20	7,50	998,00	901,80	37,27	26,87	10,40
	6	212,00	0,00	124,80	159,00	7,80	1085,40	799,50	38,50	29,18	9,32
	7	165,00	128,50	132,10	175,10	8,10	1005,80	746,60	46,39	37,36	09,03
	8 <sup>2</sup>	249,10	0,00	98,80	158,10	12,80	987,80	889,00	30,85	39,85	9,00
	9 <sup>3</sup>	297,20	0,00	117,50	174,80	9,50	1022,80	753,50	47,40	38,52	8,88
	10	164,60	0,00	150,40	181,60	11,70	1023,30	728,90	18,03	26,75	8,72
SVR	1 <sup>1</sup>	200,00	200,00	0,00	190,00	0,00	1145,00	660,00	49,25	29,35	19,90
	2 <sup>1</sup>	277,10	0,00	97,40	160,60	11,80	973,90	875,60	48,28	31,46	16,82
	3 <sup>2</sup>	249,10	0,00	98,80	158,10	12,80	987,80	889,00	30,85	44,99	14,14
	4 <sup>2</sup>	381,40	0,00	0,00	185,70	0,00	1104,60	784,30	22,49	36,14	13,65
	5 <sup>3</sup>	144,00	15,00	195,00	176,00	6,00	1021,00	709,00	15,34	27,84	12,50
	6 <sup>2</sup>	385,00	0,00	0,00	186,00	0,00	966,00	763,00	31,35	43,57	12,22
	7 <sup>1</sup>	436,00	0,00	0,00	218,00	0,00	838,40	719,70	23,85	35,97	12,12
	8	446,00	24,00	79,00	162,00	11,60	967,00	712,00	44,42	33,46	10,96
	9	142,00	167,00	130,00	174,00	11,00	883,00	785,00	44,61	34,10	10,51
	10	141,90	166,60	129,70	173,50	10,90	882,60	785,30	44,61	34,20	10,41
RNA	1 <sup>1</sup>	200,00	200,00	0,00	190,00	0,00	1145,00	660,00	49,25	25,46	23,79
	2 <sup>1</sup>	277,10	0,00	97,40	160,60	11,80	973,90	875,60	48,28	29,52	18,76
	3 <sup>1</sup>	436,00	0,00	0,00	218,00	0,00	838,40	719,70	23,85	42,52	18,67
	4 <sup>3</sup>	168,00	42,10	163,80	121,80	5,70	1058,70	780,10	24,24	36,01	11,77
	5 <sup>2</sup>	385,00	0,00	0,00	186,00	0,00	966,00	763,00	31,35	41,89	10,54
	6	142,00	167,00	130,00	174,00	11,00	883,00	785,00	44,61	34,59	10,02
	7 <sup>2</sup>	381,40	0,00	0,00	185,70	0,00	1104,60	784,30	22,49	32,34	9,85
	8 <sup>3</sup>	297,20	0,00	117,50	174,80	9,50	1022,80	753,50	47,40	37,80	9,60
	9	151,00	0,00	184,00	167,00	12,00	991,00	772,00	15,57	24,89	9,32
	10	400,00	0,00	0,00	187,00	0,00	1025,00	745,00	43,70	34,50	9,20
GPR	1 <sup>1</sup>	200,00	200,00	0,00	190,00	0,00	1145,00	660,00	49,25	28,13	21,12
	2 <sup>1</sup>	277,10	0,00	97,40	160,60	11,80	973,90	875,60	48,28	33,34	14,94
	3 <sup>1</sup>	436,00	0,00	0,00	218,00	0,00	838,40	719,70	23,85	38,45	14,60
	4 <sup>2</sup>	249,10	0,00	98,80	158,10	12,80	987,80	889,00	30,85	42,14	11,29
	5 <sup>2</sup>	381,40	0,00	0,00	185,70	0,00	1104,60	784,30	22,49	33,73	11,24
	6 <sup>3</sup>	144,00	15,00	195,00	176,00	6,00	1021,00	709,00	15,34	26,24	10,90
	7 <sup>3</sup>	168,00	42,10	163,80	121,80	5,70	1058,70	780,10	24,24	34,51	10,27
	8 <sup>2</sup>	385,00	0,00	0,00	186,00	0,00	966,00	763,00	31,35	41,60	10,25
	9	162,00	207,00	172,00	216,00	10,00	822,00	638,00	39,84	29,69	10,15
	10 <sup>3</sup>	194,70	0,00	100,50	170,20	7,50	998,00	901,80	37,27	27,23	10,04

<sup>1</sup> Observações que aparecem entre as 10 piores previsões de todas as técnicas

<sup>2</sup> Observações que aparecem entre as 10 piores previsões de 3 técnicas

<sup>3</sup> Observações que aparecem entre as 10 piores previsões de 2 técnicas

Assumindo que esses resultados não são devido a erros de digitação ou problemas experimentais, eles indicam:

- A relevância dos dados de entrada para a construção de modelos com previsões de

boa qualidade, tendo em vista que os dados devem ser semelhantes ao problema estudado.

- A necessidade de coletar múltiplas observações de traços de concreto de todos os tipos se deseja criar ferramentas de projeto de traços generalizáveis.

## 4.2 Significância dos recursos de entrada

A Figura 11 mostra a importância de cada característica para a construção do modelo *ensemble* baseado em árvores de decisão, obtidas com a técnica XGBoost. Quanto mais um recurso for usado para tomar decisões importantes durante a construção do modelo, maior será sua significância relativa. Como esperado, o cimento tem o maior impacto relativo entre as características de entrada, enquanto os agregados tiveram o menor. Seguindo o cimento, observa-se uma influência significativa de materiais cimentícios suplementares (adições, como escória de alto-forno e cinzas volantes). Isso se explica porque todos esses ligantes possuem características que aumentam significativamente a resistência do concreto (NEVILLE, 2015; MEHTA; MONTEIRO, 2014; CORDEIRO; DÉ SIR, 2010). Esses resultados indicam que o modelo teve uma boa interpretação dos dados.

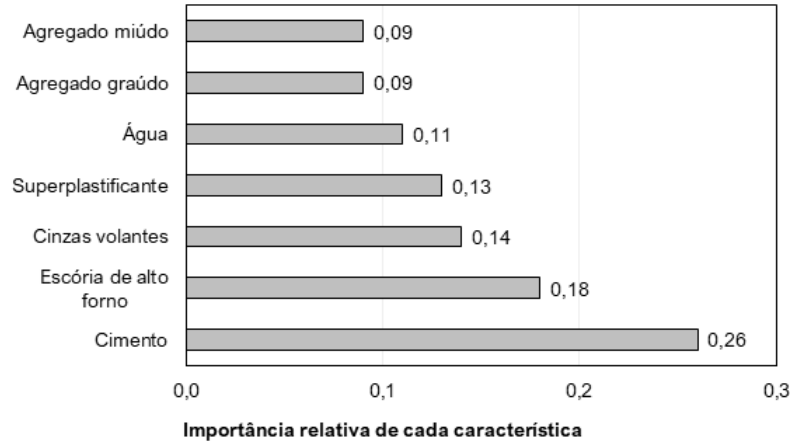


Figura 11 – Importância relativa de cada recurso de entrada na previsão da resistência à compressão, de acordo com o modelo XGBoost. Fonte: Autor

## 4.3 Considerações sobre a generalização dos modelos

A Tabela 5 apresenta o desempenho dos modelos treinados com o *dataset* de Yeh (1998), quando validados com o novo *dataset* com 22 instâncias elaborado pelo autor, retirada de 8 países diferentes. Nenhum modelo realizou uma boa previsão, com o  $R^2$  caindo de 0,79-0,83 Tabela 3 para 0,36-0,59. O MAE subiu de 1,96-2,26 MPa para 3,03-4,03 MPa e

o RMSE subiu de 3,40-3,73 MPa para 3,75-4,66 MPa. Este resultado demonstra a baixa capacidade de generalização dos modelos para avaliação de novos traços de concreto.

As características do conjunto de dados de [Yeh \(1998\)](#) podem explicar esse cenário. Primeiro, este conjunto de dados foi construído a partir de estudos relativamente antigos (entre 1987 e 1997), o que provavelmente é uma grande fonte de imprecisões devido aos avanços tecnológicos dos materiais de construção, especialmente cimento e aditivos. Além disso, a maioria desses trabalhos foi realizada em Taiwan, usando materiais locais relativamente homogêneos e agregados graúdos com tamanho máximo de 20 mm. Assim, o conjunto de dados é incapaz de representar a variabilidade dos concretos em escala global. E essa baixa capacidade de generalização é ainda mais preocupante porque uma parcela significativa dos artigos sobre a aplicação de inteligência artificial para dimensionamento de traços de concreto utiliza esse conjunto de dados.

Tabela 5 – Resultados da etapa de validação do modelo realizada com o novo conjunto de dados desenvolvido pelo autor.

Modelo	R <sup>2</sup>	RMSE (MPa)	MAE (MPa)	Máximo erro absoluto (MPa)	Mínimo erro absoluto (MPa)
XGBoost	0,42	4,46	3,57	9,75	0,26
SVR	0,37	4,67	4,04	9,22	0,67
RNA	0,51	4,09	3,23	9,75	0,13
GPR	0,59	3,75	3,04	8,40	0,07

As peculiaridades regionais dos componentes de concreto são bem conhecidas pelos profissionais da área. Por exemplo, mesmo no Brasil, cimentos e concretos da região Sul tendem a adotar adições pozolânicos, enquanto cimentos e concretos da região Sudeste comumente incorporam escória de alto-forno ([NATALLI et al., 2021](#)). No entanto, apesar dessa heterogeneidade ser conhecida empiricamente, ainda faltam estudos para mensurar seu impacto em algoritmos de dimensionamento de traços de concreto.

Para permitir o desenvolvimento de ferramentas de *design* de traços seguras, eficientes e econômicas, se vêem duas possibilidades: 1) cada país ou região deve trabalhar com seu próprio conjunto de dados para gerar modelos adaptados à realidade local ou 2) a criação de bancos de dados com mais recursos de entrada, como país de origem, tamanho máximo de agregado, tipo de cimento, etc., permitindo assim a criação de ferramentas altamente adaptáveis a diferentes tipos de concreto.

Além disso, são necessários mais estudos com o intuito de compreender os modelos de aprendizado de máquina utilizados nos processos de otimização. Atualmente, pouco se encontra na literatura trabalhos relacionados ao funcionamento por trás desses algoritmos, com isso, se torna mais difícil a realização das análises dos resultados e o uso das técnicas, visto que seus comportamentos não são amplamente conhecidos.

## 5 Conclusão

Este estudo comparou quatro técnicas de aprendizado de máquina para prever a resistência à compressão de corpos de prova de concreto convencionais a partir de seus componentes. Um conhecido banco de dados, elaborado por Yeh (1998), foi usado para treinar quatro modelos: Modelo Gaussiano de Regressão (GPR), *Extreme Gradient Boosting* (XGBoost), Redes Neurais Artificiais (RNA) e Máquinas de Vetor de Suporte para Regressão (SVR). Após a avaliação desses modelos, uma nova base de dados foi montada pelo autor para validá-los. Este teste buscou analisar a capacidade de generalização dos modelos para novos traços de concreto.

Na primeira etapa, os modelos GPR, XGBoost e RNA obtiveram  $R^2 > 0,82$ , enquanto SVR teve o pior desempenho,  $R^2 = 0,79$ . Para todos os algoritmos, o MAE ficou abaixo de 2,26 MPa e o RMSE, abaixo de 3,73 MPa, o que se considera como resultados relativamente positivos em relação ao desvio padrão mínimo prescrito em procedimentos de projeto de traço real. Embora melhores correlações tenham sido encontradas na literatura, o presente trabalho adotou uma abordagem mais conservadora, buscando apenas a resistência do concreto aos 28 dias.

Para identificar as causas das imprecisões nos modelos propostos, classificou-se os 10 maiores traços com os maiores desvios entre os resultados previstos e observados. A maioria deles apareceu em pelo menos 3 algoritmos, indicando que o problema provavelmente estava relacionado a esses traços específicas e não aos modelos propostos. De fato, observou-se que essas entradas apresentavam porcentagens não-convencionais de adições. Este resultado destaca a importância dos dados de entrada para o desenvolvimento de modelos de previsão de alta qualidade.

O número relativamente pequeno de observações fez com que o tempo de execução não fosse significativo para selecionar o melhor algoritmo. Nesse sentido, um estudo analisando como o tamanho do conjunto de dados afetaria o tempo de processamento dos modelos deve ser realizado futuramente.

Na etapa de validação, a qualidade dos modelos caiu drasticamente, sendo o melhor  $R^2$  de apenas 0,59 (para o modelo GPR). A provável principal contribuição para este resultado foi a diferença entre as características do conjunto de dados utilizado para validação e aquele utilizado para treinamento do modelo. Os modelos foram criados a partir do banco de dados clássico de Yeh (1998), que pode ser considerado relativamente homogêneo em termos de origem das observações e tamanhos de agregados.

Esse resultado mostra que a regionalização e a homogeneidade de alguns conjuntos de dados podem levar a resultados falso-positivos na busca por estratégias universais



de dimensionamento de traços de concreto. Em um estudo futuro, pretende-se avaliar quantitativamente essa capacidade de generalização de modelos. Além disso, iniciativas conjuntas são necessárias para construir um banco de dados mais abrangente e variado de propriedades do concreto. Até que isso aconteça, recomenda-se que os modelos de ML para dimensionamento de traços de concreto se limitem a prever a resistência dos corpos de prova dos mesmos laboratórios que os treinaram.

Em resumo, este estudo mostrou que as técnicas de ML são potencialmente viáveis para prever a resistência à compressão do concreto, reforçando a ideia de como a automação pode auxiliar na otimização dos processos industriais tradicionais. Por enquanto, são necessários mais estudos sobre a criação e validação de bases de dados maiores e mais variadas. Além disso, os processos desenvolvidos pelos modelos para realizarem as previsões não são tão intuitivos e claros, não possibilitando ainda que os usuários possuam uma visão clara das escolhas realizadas pelos algoritmos, área que necessita de um pouco mais de atenção para a utilização dessas técnicas. No entanto, em breve, essa abordagem poderá reduzir o tempo e os recursos atualmente gastos nos processos de projeto de traços e em muitos outros processos da engenharia.

# Referências

- ABNT. NBR 12655 - Concreto de cimento Portland — Preparo, controle, recebimento e aceitação — Procedimento. *Associação Brasileira de Normas Técnicas*, 2015. Citado 2 vezes na página 35.
- ABNT. NBR 6118 - Projeto de Estruturas de Concreto - Procedimento. *Associação Brasileira de Normas Técnicas*, 2014. Citado 1 vez na página 28.
- ALMEIDA CARDOSO, Rharã de; CURY, Alexandre; BARBOSA, Flávio. A clustering-based strategy for automated structural modal identification. *Structural Health Monitoring*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 17, n. 2, p. 201–217, 2018. Citado 1 vez na página 12.
- ALVES, Victor; CURY, Alexandre. A fast and efficient feature extraction methodology for structural damage localization based on raw acceleration measurements. *Structural Control and Health Monitoring*, Wiley Online Library, v. 28, n. 7, e2748, 2021. Citado 1 vez na página 12.
- BARRETO, Jorge M. Introdução às redes neurais artificiais. *Florianópolis: Ufsc*, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26.
- BATISTA, Gustavo Enrique de Almeida Prado et al. *Pré-processamento de dados em aprendizado de máquina supervisionado*. 2003. Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Citado 2 vezes nas páginas 19, 28.
- BAUER, Eric; KOHAVI, Ron. An empirical comparison of voting classification algorithms: Bagging, boosting, and variants. *Machine learning*, Springer, v. 36, n. 1, p. 105–139, 1999. Citado 1 vez na página 22.
- BLOCKEEL, Hendrik; STRUYF, Jan. Efficient algorithms for decision tree cross-validation. *Journal of Machine Learning Research*, v. 3, Dec, p. 621–650, 2002. Citado 1 vez na página 30.
- BODO, Leandro et al. Aprendizagem de máquina para análise de indicadores na engenharia de software. *Interciência & Sociedade*, p. 9–20, 2015. Citado 1 vez na página 19.
- BOGGIO, Aldo J. Estudo comparativo de métodos de dosagem de concretos de cimento Portland, 2000. Citado 1 vez na página 15.
- BONIFÁCIO, Aldemon L et al. Application of Support Vector Machine and Finite Element Method to predict the mechanical properties of concrete. *Latin American Journal of Solids and Structures*, SciELO Brasil, v. 16, 2019. Citado 3 vezes nas páginas 12, 30, 31.
- BORLIDO, David José Araújo. Indústria 4.0: Aplicação a Sistemas de Manutenção, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 16, 17.

- BS. EN 12390-3:2019 - Testing hardened concrete Compressive strength of test specimens. *BSI*, 2019. Citado 1 vez na página 11.
- CAMERON, A Colin; WINDMEIJER, Frank AG. An R-squared measure of goodness of fit for some common nonlinear regression models. *Journal of econometrics*, Elsevier, v. 77, n. 2, p. 329–342, 1997. Citado 1 vez na página 31.
- CHAVES, Bruno Butilhão. *Estudo do algoritmo AdaBoost de aprendizagem de máquina aplicado a sensores e sistemas embarcados*. 2012. Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Citado 1 vez na página 19.
- CHEN, Tianqi; GUESTRIN, Carlos. Xgboost: A scalable tree boosting system. In: PROCEEDINGS of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining. 2016. P. 785–794. Citado 6 vezes nas páginas 22, 23.
- CORDEIRO, Guilherme Chagas; DÉsir, Jean Marie. Potencial de argila caulinítica de Campos dos Goytacazes, RJ, na produção de pozolana para concreto de alta resistência. *Cerâmica*, SciELO Brasil, v. 56, p. 71–76, 2010. Citado 1 vez na página 37.
- CUI, Liyun et al. Application of extreme gradient boosting based on grey relation analysis for prediction of compressive strength of concrete. *Advances in Civil Engineering*, Hindawi, v. 2021, 2021. Citado 1 vez na página 13.
- DAO, Dong Van et al. A sensitivity and robustness analysis of GPR and ANN for high-performance concrete compressive strength prediction using a Monte Carlo simulation. *Sustainability*, MDPI, v. 12, n. 3, p. 830, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 13, 33, 34.
- DEEPA, C; SATHIYAKUMARI, K; SUDHA, V Pream. Prediction of the compressive strength of high performance concrete mix using tree based modeling. *International Journal of Computer Applications*, Citeseer, v. 6, n. 5, p. 18–24, 2010. Citado 1 vez na página 31.
- DEROUSSEAU, MA et al. A comparison of machine learning methods for predicting the compressive strength of field-placed concrete. *Construction and Building Materials*, Elsevier, v. 228, p. 116661, 2019. Citado 6 vezes nas páginas 31, 32, 34.
- FENG, De-Cheng et al. Machine learning-based compressive strength prediction for concrete: An adaptive boosting approach. *Construction and Building Materials*, Elsevier, v. 230, p. 117000, 2020. Citado 1 vez na página 30.
- FERREIRA, Pedro; LE, Duc C; ZINCIR-HEYWOOD, Nur. Exploring feature normalization and temporal information for machine learning based insider threat detection. In: IEEE. 2019 15th International Conference on Network and Service Management (CNSM). 2019. P. 1–7. Citado 2 vezes nas páginas 29, 30.
- FINOTTI, Rafaelle Piazzaroli; CURY, Alexandre Abrahão; BARBOSA, Flávio de Souza. An SHM approach using machine learning and statistical indicators extracted from raw dynamic measurements. *Latin American Journal of Solids and Structures*, SciELO Brasil, v. 16, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 23, 26.

- FROTA, Francisco Vitor Lopes da. Uso de aprendizado de máquina para a automação de testes de sistemas web, 2017. Citado 1 vez na página 12.
- GARCIA, J. L. Fundamentos da Inteligência Artificial. Rio de Janeiro: LTC, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 25, 26.
- HOANG, Nhat-Duc et al. Estimating compressive strength of high performance concrete with Gaussian process regression model. *Advances in Civil Engineering*, Hindawi, v. 2016, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 13, 30, 34.
- K. W. DAY, J. Aldred; HUDSON, B. *Concrete Mix Design, Quality Control and Specification*. Boca Raton: CRC press, 2013. Citado 1 vez na página 12.
- KARAOCA, Adem. *Advances in data mining knowledge discovery and applications*. BoD-Books on Demand, 2012. Citado 1 vez na página 19.
- LAM, Ngoc-Tra-My; NGUYEN, Duy-Liem; LE, Duc-Hien. Predicting compressive strength of roller-compacted concrete pavement containing steel slag aggregate and fly ash. *International Journal of Pavement Engineering*, Taylor & Francis, v. 23, n. 3, p. 731–744, 2022. Citado 1 vez na página 34.
- LEE, Kai-Fu. *Inteligência artificial*. Globo Livros, 2019. Citado 2 vezes na página 17.
- LIMA, Daniela de; CORSO, Leandro Luís. Aplicação de Inteligência Artificial e Modelos Matemáticos para Previsão de Demanda em uma indústria do ramo plástico. *Scientia cum Industria*, v. 8, n. 2, p. 24–29, 2020. Citado 1 vez na página 12.
- MEHTA, P Kumar; MONTEIRO, Paulo JM. *Concrete: microstructure, properties, and materials*. McGraw-Hill Education, 2014. Citado 1 vez na página 37.
- MEYER, David; WIEN, FT. Support vector machines. *The Interface to libsvm in package e1071*, v. 28, p. 20, 2015. Citado 1 vez na página 23.
- MOHAMMAD, Rami; MCCLUSKEY, TL; THABTAH, Fadi. Predicting phishing websites using neural network trained with back-propagation. In: WORLD CONGRESS IN COMPUTER SCIENCE, COMPUTER ENGINEERING, e APPLIED COMPUTING. Citado 1 vez na página 25.
- MURO, Diana Irene Barbosa. Avaliação de modelos de aprendizado de máquina para estimativas da resistência em concreto autoadensáveis, 2022. Citado 1 vez na página 19.
- MUSTAPHA, Rguig; MOHAMED, EA. High-performance concrete compressive strength prediction based weighted support vector machines. *International Journal of Engineering Research and Applications*, v. 7, n. 1, p. 68–75, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 13, 34.
- NATALLI, Juliana Fadini et al. A review on the evolution of Portland cement and chemical admixtures in Brazil. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais*, SciELO Brasil, v. 14, 2021. Citado 1 vez na página 38.
- NEVILLE, Adam M. *Properties of Concrete*. Bookman Editora, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 11, 12, 37.

- NEVILLE, Adam M. *Tecnologia do concreto*. Bookman Editora, 2013. Citado 3 vezes na página 15.
- NGUYEN, Hoang et al. Efficient machine learning models for prediction of concrete strengths. *Construction and Building Materials*, Elsevier, v. 266, p. 120950, 2021. Citado 1 vez na página 19.
- NOBLE, William S. What is a support vector machine? *Nature biotechnology*, Nature Publishing Group, v. 24, n. 12, p. 1565–1567, 2006. Citado 2 vezes na página 24.
- PEDROSA, Paulo HC; NOGUEIRA, Tiago. Computação em nuvem. *Acesso em*, v. 6, 2011. Citado 3 vezes na página 17.
- PEREIRA, Adriano; OLIVEIRA SIMONETTO, Eugênio de. Indústria 4.0: conceitos e perspectivas para o Brasil. *Revista da Universidade Vale do Rio Verde*, v. 16, n. 1, 2018. Citado 2 vezes na página 16.
- PETTRES, Roberto; LACERDA, Luiz Alkimin de. Reconhecimento de padrões de defeitos em concreto a partir de imagens térmicas estacionárias e redes neurais artificiais. *Ágora: revista de divulgação científica*, v. 17, n. 2, p. 1–12, 2010. Citado 1 vez na página 12.
- RASMUSSEN, Carl Edward. Gaussian processes in machine learning. In: SPRINGER. SUMMER school on machine learning. 2003. P. 63–71. Citado 4 vezes na página 27.
- RASMUSSEN, Carl Edward. *Gaussian processes in machine learning*. Cambridge: MIT Press, 2006. Citado 3 vezes na página 27.
- REZENDE, Solange Oliveira. *Sistemas inteligentes: fundamentos e aplicações*. Editora Manole Ltda, 2003. Citado 1 vez na página 22.
- RÜSSMANN, Michael et al. Industry 4.0: The future of productivity and growth in manufacturing industries. *Boston consulting group*, Boston, MA, USA: v. 9, n. 1, p. 54–89, 2015. Citado 1 vez na página 16.
- SADEK, Ramzi M et al. Parkinson’s disease prediction using artificial neural network. *IJARW*, 2019. Citado 1 vez na página 25.
- SANTOS, Beatrice Paiva et al. Indústria 4.0: desafios e oportunidades. *Revista Produção e Desenvolvimento*, v. 4, n. 1, p. 111–124, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 16, 17.
- SANTOS, Miriam Seoane et al. Cross-validation for imbalanced datasets: avoiding overoptimistic and overfitting approaches [research frontier]. *iee ComputerNal iNtelligeNCe magaziNe*, IEEE, v. 13, n. 4, p. 59–76, 2018. Citado 1 vez na página 30.
- SHAO, Jun. Linear model selection by cross-validation. *Journal of the American statistical Association*, Taylor & Francis, v. 88, n. 422, p. 486–494, 1993. Citado 1 vez na página 30.
- SILVA, Danilo Goulart da. *Indústria 4.0: conceito, tendências e desafios*. 2017. B.S. thesis – Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Citado 1 vez na página 16.

- SMOLA, Alex J; SCHÖLKOPF, Bernhard. A tutorial on support vector regression. *Statistics and computing*, Springer, v. 14, n. 3, p. 199–222, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 24, 25.
- SOUSA, Flávio RC; MOREIRA, Leonardo O; MACHADO, Javam C. Computação em nuvem: Conceitos, tecnologias, aplicações e desafios. *II Escola Regional de Computação Ceará, Maranhão e Piauí (ERCEMAPI)*, p. 150–175, 2009. Citado 2 vezes na página 17.
- STANDARD Practice for Selecting Proportions for Normal, Heavyweight, and Mass Concrete, ACI PRC-211.1-91. ACI Committee 211, 2002. Citado 1 vez na página 11.
- STEINWART, Ingo; HUSH, Don; SCOVEL, Clint. An explicit description of the reproducing kernel Hilbert spaces of Gaussian RBF kernels. *IEEE Transactions on Information Theory*, IEEE, v. 52, n. 10, p. 4635–4643, 2006. Citado 1 vez na página 27.
- SUEN, Yuk Lai; MELVILLE, Prem; MOONEY, Raymond J. Combining bias and variance reduction techniques for regression trees. In: SPRINGER. EUROPEAN Conference on Machine Learning. 2005. P. 741–749. Citado 2 vezes nas páginas 22, 23.
- TAGLIARI, Ivan Bovarotti et al. Automação em processos produtivos baseada em instrumentação virtual. In: 9TH IEEE/IAS International Conference on Industry Applications. 2010. P. 1–6. Citado 2 vezes na página 12.
- TANGIRALA, Suryakanthi. Evaluating the impact of GINI index and information gain on classification using decision tree classifier algorithm. *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*, Science e Information (SAI) Organization Limited, v. 11, n. 2, p. 612–619, 2020. Citado 1 vez na página 32.
- TUTIKIAN, Bernardo Fonseca; PACHECO, M. Self-compacting concretes (SCC): comparison of methods of dosage. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais*, SciELO Brasil, v. 5, p. 500–529, 2012. Citado 1 vez na página 12.
- WILLMOTT, Cort J; MATSUURA, Kenji. Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. *Climate research*, v. 30, n. 1, p. 79–82, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 32, 34.
- WOŹNIAK, Michał; GRANA, Manuel; CORCHADO, Emilio. A survey of multiple classifier systems as hybrid systems. *Information Fusion*, Elsevier, v. 16, p. 3–17, 2014. Citado 1 vez na página 22.
- YASEEN, Zaher Mundher et al. Shear strength prediction of steel fiber reinforced concrete beam using hybrid intelligence models: a new approach. *Engineering Structures*, Elsevier, v. 177, p. 244–255, 2018. Citado 1 vez na página 12.
- YEH, I-C. Modeling of strength of high-performance concrete using artificial neural networks. *Cement and Concrete research*, Elsevier, v. 28, n. 12, p. 1797–1808, 1998. Citado 15 vezes nas páginas 13, 20, 26, 28, 33, 34, 37–39.

YI, Seong-Tae; YANG, Eun-Ik; CHOI, Joong-Cheol. Effect of specimen sizes, specimen shapes, and placement directions on compressive strength of concrete. *Nuclear Engineering and Design*, Elsevier, v. 236, n. 2, p. 115–127, 2006. Citado 1 vez na página 29.

YOUNG, Benjamin A et al. Can the compressive strength of concrete be estimated from knowledge of the mixture proportions?: New insights from statistical analysis and machine learning methods. *Cement and Concrete Research*, Elsevier, v. 115, p. 379–388, 2019. Citado 1 vez na página 31.

ZHOU, Zhengze; HOOKER, Giles. Unbiased measurement of feature importance in tree-based methods. *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data (TKDD)*, ACM New York, NY, USA, v. 15, n. 2, p. 1–21, 2021. Citado 2 vezes na página 32.

# Apêndices



Artigos consultados para elaboração do banco  
de dados próprio

Os artigos listados abaixo foram consultados para a criação do conjunto de dados utilizado para validar os modelos. Apesar de se referirem ao concreto de escória de aciaria, coletamos apenas os dados referentes aos agregados convencionais (usados como referência) para este trabalho.

- Anastasiou, E., Filikas, K. G., & Stefanidou, M. (2014). Utilization of fine recycled aggregates in concrete with fly ash and steel slag. *Construction and Building Materials*, 50, 154-161.
- Andrade, H. D. (2018). Carbonatação em concreto de escória de aciaria. Universidade Federal de Ouro Preto (Dissertação de Mestrado).
- Lee, J. Y., Choi, J. S., Yuan, T. F., Yoon, Y. S., & Mitchell, D. (2019). Comparing properties of concrete containing electric arc furnace slag and granulated blast furnace slag. *Materials*, 12(9), 1371.
- Liu, S., Wang, Z., & Li, X. (2014). Long-term properties of concrete containing ground granulated blast furnace slag and steel slag. *Magazine of concrete Research*, 66(21), 1095-1103.
- Mengxiao, S., Qiang, W., & Zhikai, Z. (2015). Comparison of the properties between high-volume fly ash concrete and high-volume steel slag concrete under temperature matching curing condition. *Construction and Building Materials*, 98, 649-655.
- Miñano, I., Benito, F. J., Valcuende, M., Rodríguez, C., & Parra, C. J. (2019). Improvements in aggregate-paste interface by the hydration of steelmaking waste in concretes and mortars. *Materials*, 12(7), 1147.
- Pang, B., Zhou, Z., & Xu, H. (2015). Utilization of carbonated and granulated steel slag aggregate in concrete. *Construction and building materials*, 84, 454-467.
- Paula Stief, J. N., da Silva Maia, N., & Peixoto, R. A. F. (2011). Determinação experimental do módulo de elasticidade do concreto convencional e com agregados de escória de aciaria. *Educação & Tecnologia*, 14(2).
- Qasrawi, H., Shalabi, F., & Asi, I. (2009). Use of low CaO unprocessed steel slag in concrete as fine aggregate. *Construction and Building Materials*, 23(2), 1118-1125.
- Roslan, N. H., Ismail, M., Abdul-Majid, Z., Ghoreishiamiri, S., & Muhammad, B. (2016). Performance of steel slag and steel sludge in concrete. *Construction and building materials*, 104, 16-24.
- Souza, B. P., da Costa, E. C. P., de Carvalho, J. M. F., Peixoto, R. A. F., de Resende Mol, R. M., & Fontes, W. C. Caracterização físico-química de agregados de escória de aciaria LD pós-processada para concretos sustentáveis, 1-388.

# Publicações



ORIGINAL ARTICLE

## Comparison of machine learning techniques to predict the compressive strength of concrete and considerations on model generalization

*Comparação de técnicas de aprendizado de máquina para prever a resistência à compressão do concreto e considerações sobre a generalização de modelos*

Rafael Christian Fonseca da Paixão<sup>a</sup> Rúben El-Katib Penido<sup>b</sup> Alexandre Abrahão Cury<sup>c</sup> Júlia Castro Mendes<sup>b</sup> <sup>a</sup>Universidade Federal de Ouro Preto - UFOP, Departamento de Engenharia de Controle e Automação, Ouro Preto, MG, Brasil<sup>b</sup>Universidade Federal de Ouro Preto – UFOP, Departamento de Engenharia Civil, Ouro Preto, MG, Brasil<sup>c</sup>Universidade Federal de Juiz de Fora – UFJF, Departamento de Mecânica Aplicada e Computacional, Juiz de Fora, MG, Brasil

Received 20 October 2021

Accepted 31 January 2022

**Abstract:** The compressive strength of concrete is an essential property to ensure the safety of a concrete structure. However, estimating this value is usually a laborious and uncertain process since the mix design is based on empirical methods and its confirmation in the laboratory demands time and resources. In this context, this work aims to evaluate Machine Learning (ML) models to predict the compressive strength of concrete from its constituents. For this purpose, a dataset from the literature was used as input to four ML models: Extreme Gradient Boosting (XGBoost), Support Vector Regression (SVR), Artificial Neural Networks (ANN) and Gaussian Process Regression (GPR). The accuracy of the models was evaluated through 10-fold cross-validation, and quantified by  $R^2$ , Mean Absolute Error (MAE), and Root-Mean-Square Error (RMSE) metrics. Subsequently, a new dataset was put together with mixtures from the literature and used to validate the previous models. In the model creation step, all algorithms obtained similar and positive results, with MAE between 1.96-2.26 MPa and  $R^2$  varying from 0.79 to 0.83. However, in the validation step, the accuracy of the models dropped sharply, with MAE growing to 3.04-4.04 MPa and  $R^2$  decreasing to 0.37-0.59. ANN and GPR showed the best results, while SVR had the worst predictions. This work showed that ML tools are promising techniques to predict the compressive strength of concrete. However, care must be taken with the input data to guarantee that models are not overfitted to a given region, set of materials, or type of concrete.

**Keywords:** machine learning, concrete mix design, generalization ability, compressive strength, concrete database.

**Resumo:** A resistência à compressão do concreto é uma propriedade essencial para garantir a segurança de uma estrutura. No entanto, estimar este valor é atualmente um processo trabalhoso e impreciso, uma vez que o a dosagem é baseada em métodos empíricos e sua confirmação em laboratório demanda tempo e recursos. Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo avaliar modelos de Aprendizado de Máquina (ML) para prever a resistência à compressão do concreto a partir de seus componentes. Para tanto, um banco de dados da literatura foi utilizado como entrada para quatro modelos de ML: *Extreme Gradient Boosting* (XGBoost), Regressão de Vetor de Suporte (SVR), Redes Neurais Artificiais (ANN) e Processo Gaussiano de Regressão (GPR). A precisão dos modelos foi avaliada por meio de validação cruzada (10-*fold*) e medida com as métricas de  $R^2$ , Erro Médio Absoluto (MAE) e a Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE). Posteriormente, um novo banco de dados foi montado com traços da literatura e utilizado para validar os modelos anteriores. Na etapa

**Corresponding author:** Júlia Castro Mendes. E-mail: julia.mendes@ufop.edu.br

**Financial support:** FAPEMIG (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais, project PPM-00001-18 for A.A.C. and APQ-01838-21 for J.C.M.), PROPI/UFOP (UFOP Research and Innovation Dean's Office, for Undergraduate Research Scholarship for R.C.F.P. and Research Assistance Grant for J.C.M.), CNPq (National Council for Scientific and Technological Development, project 304329/2019-3 for A.A.C.) and CAPES (Coordination of Superior Level Staff Improvement, for master's scholarship to R.E.P.).

**Conflict of interest:** Nothing to declare.

**Data Availability:** The data that support the findings of this study are available from the corresponding author, JM, upon reasonable request.

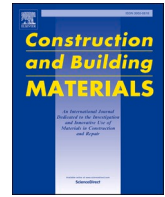


This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.



Contents lists available at ScienceDirect

## Construction and Building Materials

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

# Predicting the compressive strength of steelmaking slag concrete with machine learning – Considerations on developing a mix design tool

Rúben El-Katib Penido<sup>a,1</sup>, Rafael Christian Fonseca da Paixão<sup>b,2</sup>, Laís Cristina Barbosa Costa<sup>a,3</sup>, Ricardo André Fiorotti Peixoto<sup>a,4</sup>, Alexandre Abrahão Cury<sup>c,5</sup>, Júlia Castro Mendes<sup>a,6</sup>

<sup>a</sup> Federal University of Ouro Preto – UFOP, Department of Civil Engineering, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil

<sup>b</sup> Federal University of Ouro Preto – UFOP, Department of Control and Automation Engineering, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil

<sup>c</sup> Federal University of Juiz de Fora – UFJF, Graduate Program in Civil Engineering (PEC), Juiz de Fora, Minas Gerais, Brazil

## ARTICLE INFO

## Keywords:

Steelmaking slag  
Compressive strength  
Concrete mixture  
Machine learning  
Experimental validation

## ABSTRACT

Steelmaking slag has been extensively studied as aggregate for cement-based composites. Because of the distinct properties of this residue, traditional mix design methods are not suitable to determine its target compressive strength, which hinders research studies and compromises its use on a large scale. In this context, the present work aims to develop machine learning (ML)-based models to predict the compressive strength of steel slag concretes from their mix proportion. For this purpose, a global data survey on steel slag concretes was carried out to create a benchmark dataset. Then, four ML-based models were trained and cross-validated using this dataset: Support Vector Regression (SVR), Artificial Neural Networks (ANN), Extreme Gradient Boost (XGBoost), and Gaussian Process Regression (GPR). Finally, new steel slag concrete specimens were built and tested to experimentally validate the adjusted models. The model that achieved the best performance using the literature dataset was the ANN, with a  $R^2$  of 0.79. However, the experimental validation was not satisfactory – the GPR, XGBoost and SVR models presented negative  $R^2$  values. These results brought light to some pivotal aspects that must be considered when using ML techniques: *i*) the size and homogeneity of the dataset; *ii*) the proper choice of input parameters; and *iii*) the use of cross-validation to adjust the models. Hence, although such techniques are promising and powerful, care must be taken on the generalization of their predictions, especially when the available data is limited.

## 1. Introduction

The world's steel production in 2019 was 1.87 billion tons [1]. For each ton of steel produced, around 150 kg of steel slag are generated [2,3]. Part of this waste is reused as a landfill or base layer for road infrastructure. Still, a substantial fraction is dumped in open-air areas [4], with significant effects on the ecosystem and neighboring communities.

Over the past years, researchers have sought new recycling routes for steel slag, incorporating it into cement-based composites [5–7]. They observed that steel slag aggregates, when properly processed, have

mechanical properties equal or superior to the natural ones [7].

This outcome is relevant since the compressive strength is linked to the structural safety and durability of concrete structures. Hence, the primary goal of mix design methods is to achieve a characteristic compressive strength value, in a safe and economical manner. This procedure is accomplished from the optimized proportioning of the key components of the concrete: Portland cement, fine aggregate, coarse aggregate, water, and, optionally, chemical, and mineral admixtures. The great variety and heterogeneity of concretes' raw materials is the main challenge of this process.

There are many mix design methods around the world, such as those

E-mail address: [alexandre.cury@ufjf.br](mailto:alexandre.cury@ufjf.br) (A.A. Cury).

<sup>1</sup> <https://orcid.org/0000-0003-2422-7384>.

<sup>2</sup> <https://orcid.org/0000-0002-1625-0018>.

<sup>3</sup> <https://orcid.org/0000-0001-9241-9404>.

<sup>4</sup> <https://orcid.org/0000-0002-4963-6865>.

<sup>5</sup> <https://orcid.org/0000-0002-8860-1286>.

<sup>6</sup> <https://orcid.org/0000-0002-6323-535>.

<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.127896>

Received 4 April 2022; Received in revised form 10 May 2022; Accepted 16 May 2022

Available online 24 May 2022

0950-0618/© 2022 Elsevier Ltd. All rights reserved.

# Comparison among four techniques to predict the compressive strength of concrete: Extreme Gradient Boosting, Support Vector Regression, Artificial Neural Networks, and Gaussian Process Regression

Rafael C. F. da Paixão<sup>1</sup>, Rúben E. Penido<sup>2</sup>, Vítor F. Mendes<sup>2</sup>, Alexandre A. Cury<sup>3</sup>, Júlia C. Mendes<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Dept. of Automation Control Engineering, Federal University of Ouro Preto  
Campus Morro do Cruzeiro, 35400-000, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil  
rafael.paixao@aluno.ufop.edu.br*

<sup>2</sup>*Graduate Program in Civil Engineering, Federal University of Ouro Preto  
Campus Morro do Cruzeiro, 35400-000, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil  
ruben.penido@aluno.ufop.edu.br, vitor.mendes@aluno.ufop.edu.br, julia.mendes@ufop.edu.br*

<sup>3</sup>*Dept. of Applied and Computational Mechanics, Federal University of Juiz de Fora  
Rua José de Lourenço Kelmer, 36036-900, São Pedro, Juiz de Fora, Minas Gerais, Brazil  
alexandre.cury@engenharia.ufjf.br*

**Abstract.** The compressive strength ( $R_c$ ) of concrete is an important feature that influences the safety, durability, and cost of a structure. To achieve the desired  $R_c$ , professionals generally use mix design methods based on empirical tables. Then, the  $R_c$  must be confirmed in laboratory with tests that cost time and resources. To mitigate this issue, this study proposes and compares the use of four Machine Learning (ML) techniques to predict the  $R_c$  of concretes from their components. The techniques are: Extreme Gradient Boosting, Support Vector Regression, Artificial Neural Networks, and Gaussian Process Regression. Initially, a dataset vastly used in the literature for this purpose was used as input. Secondly, a dataset built by the authors was used to validate the models' generalization ability. All models were cross-validated (10-fold) and their accuracies were measured by  $R^2$ , MAE, and RMSE. XGBoost and GPR presented the best performance, while SVR presented the worst. Despite the positive performances measured in all models with the first dataset, the metrics dropped sharply in the validation step involving the second dataset. Thus, the ML techniques are promising tools for the mix design of concretes, but attention must be taken to guarantee that models are not overfitted because of the homogeneity of the input data.

**Keywords:** machine learning, concrete mix design, compressive strength.

## 1 Introduction

The bearing capacity, durability, and cost of any concrete structure depend on the quality of the concrete used. In this sense, the compressive strength of concrete, usually denoted by  $R_c$ , is one of its most important properties, defined with safety margins since the design process. In this sense, the engineer, having the required  $R_c$  value, portions the ingredients of the concrete in order to guarantee the desired strength. The traditional mix design methods (e.g., ACI, ABCO, IPT etc.) are based on empirical tables and formulations that must be confirmed in laboratory, with specimens at 28 days of curing (normally), in a procedure that follows local standards. This iterative process demands a high expenditure of human labour, natural resources, and time.

In this scenario, the Machine Learning (ML) techniques are a promising solution to efficiently predict the behaviour of concrete. ML models can predict future results based on patterns that are learned autonomously from a database of previous results. As an example, Hoang et al. [1] employed the Gaussian Process Regression (GPR) to predict the  $R_c$  of concrete using a dataset of 246 mixtures in Vietnam, obtaining a coefficient of determination ( $R^2$ ) of 0,90. Various other studies [2, 3, 4] have used different ML models to predict the  $R_c$  of concretes using a well-