USO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NA ESTIMATIVA DE HIDROGÊNIO EM LIGAS DE ALUMÍNIO EM AMBIENTE INDUSTRIAL

Italo Ryan de Oliveira Santos[1], Annamaria Dória Souza Vidotti[1], Antonio Carlos Daltro de Freitas[1]

[1] Coordenação do Curso de Engenharia Química, Centro de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Maranhão (UFMA), São Luís, MA, Brasil

Resumo: Este trabalho desenvolve e valida uma Rede Neural Artificial para predizer a solubilidade de hidrogênio em ligas de alumínio, visando controle de processo industrial. Utilizando temperatura do metal e umidade atmosférica obtidas in situ, o modelo *Levenberg-Marquardt* superou regressão linear e Random Forest, com R^2=0,997 e baixo RMSE. A análise confirmou aderência à Lei de Sieverts, permitindo identificar zonas críticas de contaminação na fundição.

Palavras-chave: Redes neurais artificiais, Solubilidade de hidrogênio, Fundição de alumínio

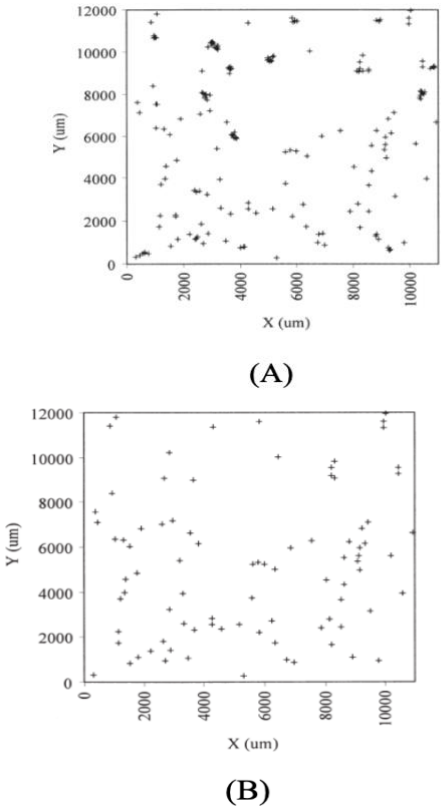
INTRODUÇÃO

As ligas de alumínio possuem ampla aplicação nos setores automotivo, aeroespacial e estrutural devido à sua baixa densidade e elevada relação resistência/peso. Entretanto, a qualidade das peças fundidas pode ser comprometida pela presença de defeitos internos, especialmente a porosidade, responsável pela redução da resistência mecânica, da tenacidade e da vida útil dos componentes. A porosidade em ligas de alumínio resulta principalmente da combinação entre contração durante a solidificação e evolução de gases dissolvidos no metal líquido, destacando-se o hidrogênio como principal precursor da porosidade gasosa (Bolibruchová e Richtárech, 2013).

A Figura 1 apresenta a diferença microestrutural entre uma liga com baixa porosidade e uma amostra severamente afetada pela presença de hidrogênio dissolvido.

O hidrogênio é o único gás com solubilidade significativa no alumínio líquido, sendo incorporado ao banho metálico principalmente pela reação entre o alumínio fundido e o vapor d'água presente no ambiente. Durante a solidificação, a redução da solubilidade promove a rejeição do hidrogênio para o metal líquido residual, favorecendo a nucleação e o aprisionamento de bolhas gasosas na microestrutura. Harvey e Chartrand (2010) e Chartrand et al. (2010) demonstraram que elementos de liga como Mg e Li aumentam a solubilidade do hidrogênio, enquanto Cu, Si e Fe tendem a reduzi-la. Além disso, Shih, Huang e Chen (2005) observaram que maiores teores de silício podem elevar a quantidade de poros em ligas Al-Si. Aumentando efeitos de corrosão e degradação desse material Santos (2019) e Shih et al. (2005).

Figura 1. Comparativo microestrutural em ligas de alumínio: (A) amostra com baixa porosidade e (B) amostra com elevada porosidade por gás hidrogênio. Fonte: Adaptado de Anson e Gruzleski (1999).



A morfologia da porosidade também fornece informações relevantes sobre o mecanismo de formação do defeito. Segundo Anson e Gruzleski (1999), poros associados ao hidrogênio tendem a apresentar formato aproximadamente esférico e distribuição uniforme, enquanto poros de contração possuem morfologia irregular e distribuição agrupada (Campbell, 1994). Dessa forma, a compreensão dos mecanismos de absorção de hidrogênio e formação de

porosidade torna-se essencial para o controle de qualidade em fundições de alumínio (Camargo, 2014). Apesar dos avanços nos métodos de monitoramento do teor de hidrogênio, a predição quantitativa desse fenômeno em condições industriais ainda representa um desafio devido à natureza multivariável e não linear do processo. Nesse contexto, modelos convencionais de regressão apresentam limitações na interpretação simultânea de variáveis operacionais e ambientais. As Redes Neurais Artificiais (RNA) surgem como uma alternativa promissora por sua capacidade de modelar relações complexas entre parâmetros do processo e o teor de hidrogênio dissolvido. Nunes et al. (2023) sugerem esse como um ponto focal importante para o desenvolvimento da rota tecnológica.

Diante desse contexto, este trabalho tem como objetivo desenvolver e validar um modelo baseado em Redes Neurais Artificiais para a predição do teor de hidrogênio em ligas de alumínio produzidas industrialmente em São Luís–MA. O estudo busca correlacionar variáveis operacionais e ambientais com a solubilidade de H_2, avaliando o desempenho preditivo do modelo por métricas estatísticas e comparando-o com métodos convencionais, visando sua aplicação como ferramenta de apoio ao controle de qualidade em processos de fundição.

MATERIAL E MÉTODOS

Material e área de estudo

Os dados experimentais utilizados neste estudo foram coletados em uma unidade industrial de produção de alumínio localizada em São Luís–MA, durante os meses de outubro e novembro de 2025. O monitoramento foi realizado em condições reais de operação, utilizando uma liga Alumínio-Silício com aproximadamente 7% de Si ($AlSi_7$), selecionada por representar a principal liga produzida pela unidade e pela sua ampla aplicação no setor de fundição estrutural.

Equipamentos e instrumentação

A medição do teor de hidrogênio dissolvido no metal líquido foi realizada utilizando o analisador AlScan® (ABB Bomem), apresentado na Figura 2. O equipamento opera com tecnologia de recirculação gasosa em circuito fechado, permitindo a determinação direta da concentração de hidrogênio no alumínio líquido em tempo real (Foster et al., 2018).

Além da concentração de hidrogênio, foram monitoradas variáveis auxiliares relacionadas às condições térmicas e ambientais do processo, incluindo:

- Temperatura do metal líquido (°C), medida simultaneamente à leitura de H_2;
- Umidade atmosférica absoluta (g/kg), considerada a principal fonte de incorporação de hidrogênio no banho metálico.

Figura 2. Analisador de hidrogênio AlScan utilizado para monitoramento de metal líquido em tempo real.



Procedimentos de coleta de dados

A aquisição de dados seguiu uma rotina padronizada de monitoramento industrial. Para cada corrida de produção, a sonda cerâmica do equipamento AlScan foi inserida diretamente na calha de vazamento, permanecendo imersa até a estabilização do sinal de pressão parcial de hidrogênio.

Foram realizadas leituras seriadas ao longo da linha de produção (Pontos 1 a 18), permitindo acompanhar a evolução do teor de H_2 durante o processo de lingotamento. Cada registro experimental foi sincronizado com os valores correspondentes de temperatura do metal e umidade atmosférica do ambiente operacional.

Os valores observados de hidrogênio variaram entre 0,35 e 0,48 $cm^3/100$ g de alumínio líquido, enquanto a temperatura do metal apresentou variação aproximada entre 670 e 685 °C. similares aos dados de Galant (1995) e Groteke et al. (2006).

Tratamento estatístico dos dados

Inicialmente, os dados foram organizados em planilhas eletrônicas e posteriormente importados para ambiente computacional de análise. Foi realizada uma etapa de pré-processamento visando garantir a consistência estatística do conjunto de dados, incluindo:

- remoção de registros duplicados;
- eliminação de valores inconsistentes;
- verificação de lacunas de informação;
- identificação de possíveis outliers.

Em seguida, foram calculadas medidas estatísticas descritivas, incluindo média, mediana, desvio padrão, valores máximos, mínimos e coeficiente de variação. Histogramas, boxplots e gráficos de distribuição também foram utilizados para avaliar dispersão, assimetria e estabilidade dos dados experimentais.

Análise de correlação e seleção das variáveis

A seleção das variáveis de entrada da Rede Neural Artificial (RNA) foi baseada na combinação entre análise estatística, coerência físico-metalúrgica e desempenho computacional do modelo.

Foram aplicadas análises de correlação linear de Pearson e correlação não linear de Spearman entre as variáveis operacionais e o teor de hidrogênio dissolvido. Os resultados indicaram forte influência da temperatura sobre a solubilidade do H_2, enquanto variáveis associadas às condições operacionais apresentaram comportamento parcialmente não linear. Com base nessas análises, foram selecionadas como variáveis de entrada:

- temperatura do metal (Temp);
- umidade atmosférica (Umid);
- ponto de medição (Ponto);
- gradiente térmico (ΔT);
- média móvel do teor de H_2 (H_2mov);
- média móvel da temperatura (Tmov).

As variáveis H_2mov e Tmov foram incluídas para representar efeitos temporais e dependência dinâmica do processo, enquanto ΔT permitiu incorporar variações térmicas transientes associadas à absorção de hidrogênio.

Arquitetura da Rede Neural Artificial

Foi desenvolvida uma Rede Neural Artificial do tipo *Multilayer Perceptron* (MLP) com arquitetura *feed-forward*. O modelo final foi constituído por:

- camada de entrada com 6 neurônios;
- uma camada oculta contendo 10 neurônios;
- camada de saída com 1 neurônio correspondente à concentração prevista de hidrogênio.

Na camada oculta foi utilizada a função de ativação tangente hiperbólica (*tansig*), enquanto a camada de saída utilizou função linear (*purelin*), permitindo preservar a interpretação física dos valores previstos.

A Equação 1 representa a formulação matemática geral do modelo desenvolvido:

$$H_2 = b^{(2)} + \sum_{j=1}^{n} w_j^{(2)} tanh\left(b_j^{(1)} + \sum_{i=1}^{6} w_{j,i}^{(1)} x_i\right) \quad (1)$$

Onde: xi= variáveis de entrada normalizadas; $w(1)$, $b(1)$= pesos e vieses da camada oculta; $w(2)$, $b(2)$= pesos e vieses da camada de saída.

O procedimento metodológico de implementação da rede neural ocorreu conforme descrito em Thanh (2026) e Tatar et al. (2024).

Procedimento de treinamento

O treinamento da RNA foi realizado utilizando o algoritmo de retropropagação Levenberg–Marquardt (*trainlm*), selecionado devido à sua elevada eficiência em problemas de regressão não linear envolvendo conjuntos de dados industriais.

O Erro Quadrático Médio (MSE) foi adotado como função objetivo durante o treinamento. Para evitar sobreajuste (*overfitting*), foram utilizadas estratégias de:

- interrupção precoce (*early stopping*);
- monitoramento do gradiente;
- ajuste adaptativo do parâmetro de amortecimento μ.

O desempenho do treinamento foi avaliado a partir da evolução das curvas de erro para os conjuntos de treinamento, validação e teste. Descrições desses procedimentos de análise podem ser encontrados em Sobhani et al. (2022).

Avaliação do modelo

A capacidade preditiva da RNA foi avaliada por meio de múltiplos indicadores estatísticos, incluindo:

- coeficiente de determinação (R^2);
- erro quadrático médio (RMSE);
- erro médio absoluto (MAE).

Também foram analisados gráficos de regressão, estabilidade temporal das previsões e distribuição dos resíduos, permitindo avaliar precisão, robustez e possíveis tendências sistemáticas do modelo.

Análise de sensibilidade

Uma análise de sensibilidade foi conduzida para quantificar a influência relativa das variáveis de entrada nas previsões da RNA. Para isso, perturbações controladas de ±5% foram aplicadas individualmente às entradas normalizadas, mantendo-se as demais variáveis constantes. Seguindo metodologia amplamente descrita em Walczak e Cerpa (2003).

A variação observada na saída da rede permitiu identificar os principais direcionadores do processo de absorção de hidrogênio, contribuindo para a interpretação física do comportamento do modelo.

Adicionalmente, curvas preditivas baseadas em metodologia de superfície de resposta foram utilizadas para avaliar o comportamento do teor de H_2 sob diferentes combinações de temperatura e umidade, permitindo explorar cenários operacionais relevantes para o controle industrial.

Estrutura computacional

Todo o desenvolvimento computacional foi realizado no MATLAB® R2025b Update 1 utilizando o *Deep Learning Toolbox* (versão 25.2).

Os procedimentos foram executados em um computador MacBook Air equipado com processador Apple M2 e 16 GB de RAM. O treinamento completo da RNA foi concluído em aproximadamente 18 s, demonstrando elevada eficiência computacional e potencial aplicação em sistemas industriais de monitoramento em tempo real.

Os dados utilizados foram obtidos exclusivamente a partir do monitoramento industrial regular da planta, sem interferência operacional no processo produtivo. Todos os procedimentos respeitaram os acordos de confidencialidade estabelecidos com a unidade industrial parceira.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A apresentação dos resultados obtidos nesta pesquisa segue uma lógica integrada que busca correlacionar a robustez matemática da rede neural com a complexidade dos fenômenos metalúrgicos envolvidos na fundição de alumínio. Inicialmente, discute-se o desempenho estatístico do modelo, onde a convergência do algoritmo Levenberg–Marquardt e a estabilidade das curvas de erro validam a capacidade preditiva da arquitetura adotada. Essa fundamentação numérica estabelece a base para uma análise mais profunda das interações entre as variáveis de processo, permitindo que a influência de parâmetros como temperatura e umidade seja isolada e quantificada. Por fim, a discussão volta-se para a aplicabilidade prática dos resultados, demonstrando como a precisão alcançada na estimativa da solubilidade do hidrogênio atua como uma ferramenta estratégica na distinção de defeitos de porosidade e na otimização do controle de qualidade em escala industrial.

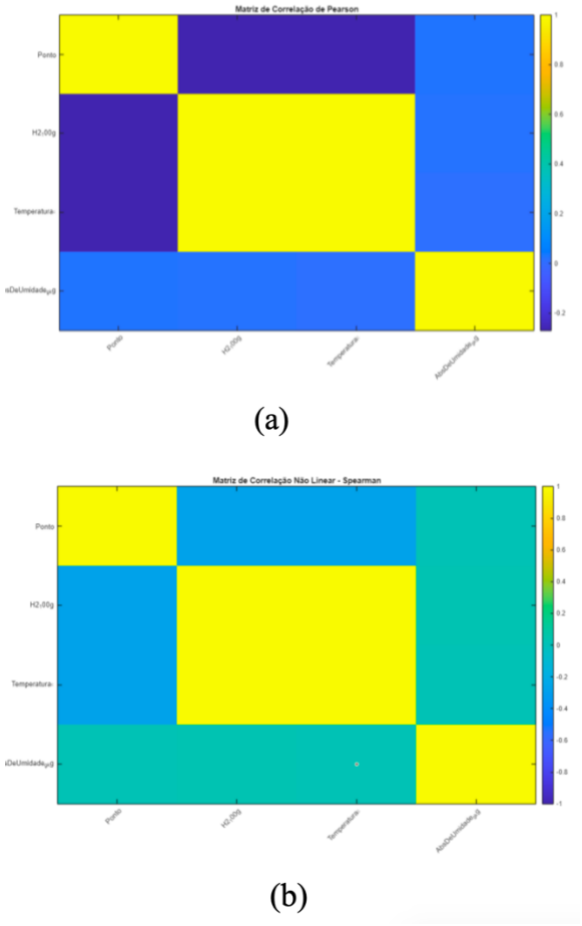
Medições *in situ* das propriedades experimentais das ligas

A base de dados utilizada para o desenvolvimento da Rede Neural reflete a variabilidade inerente ao processo industrial, compreendendo uma faixa de concentração de hidrogênio medida entre 0,3 e 0,49 mL/100g. Observa-se que a temperatura do metal no momento da medição apresenta oscilações que variaram de 670 °C a 690 °C, o que é fundamental para capturar a dependência térmica da solubilidade do gás. Paralelamente, as condições ambientais registraram a absorção de umidade, fornecendo ao modelo uma ampla gama de cenários de condições atmosféricas, o principal direcionador da absorção de hidrogênio em fundições de alumínio. A consistência entre as variáveis preditoras (como temperatura e umidade) e os valores resultantes de H_2 indica que o conjunto de dados possui a qualidade necessária para o aprendizado supervisionado, apresentando tendências físicas coerentes que permitem à rede neural mapear as correlações não lineares sem a interferência excessiva de ruídos de medição.

Caracterização Estatística Inicial dos Dados e Análise de Relevância das variáveis

Para compreender a estrutura de dependência entre as variáveis coletadas no ambiente industrial e validar a seleção dos parâmetros de entrada da rede, foram geradas matrizes de correlação através de script MATLAB. A análise comparativa entre diferentes métodos estatísticos permite distinguir relações puramente lineares de interações mais complexas. A Figura 3 apresenta os diagramas de correlação de Pearson (Figura 3a) e de Spearman (Figura 3b), fundamentais para mapear como a temperatura, a umidade e o ponto de coleta influenciam a concentração final de hidrogênio no metal.

Figura 3. Diagramas de Análise de Correlações de Pearson (a) e Correlações de Spearman **(b)**



O mapa de calor da correlação de Pearson (3a) destaca a forte associação linear entre o teor de hidrogênio e a temperatura do metal, evidenciada pelos tons amarelados na matriz, o que ratifica a base termodinâmica do processo de adsorção do H_2 na liga metálica. Contudo, ao observar a correlação de Spearman na figura 3b, nota-se que certas variáveis, como a umidade absoluta e o ponto de operação, apresentam variações de intensidade em seus coeficientes.

Essa divergência entre os métodos de Pearson (linear) e Spearman (não linear) comprova que o sistema não se comporta de maneira simplista e como uma inferência direta sobre os dados apontaria. Os resultados indicam que o processo apresenta natureza

multivariável e de característica não linear, com interdependências complexas que modelos estatísticos tradicionais não conseguem capturar integralmente, justificando assim o uso de Redes Neurais Artificiais para uma predição mais precisa e robusta do comportamento do processo. Com base nos resultados de ambas as matrizes, chegamos as seguintes conclusões acerca das variáveis do processo:

1 - A temperatura apresentou elevada correlação com a variável resposta H_2 em ambas as métricas, confirmando seu papel dominante nos mecanismos físico-químicos associados ao comportamento do hidrogênio nas ligas metálicas;

2 - De forma complementar, a umidade mostrou correlação moderada, indicando influência indireta sobre o sistema, possivelmente associada a efeitos de difusão, adsorção superficial ou variações nas condições operacionais do processo;

3 - A inclusão do ponto de medição justifica-se pela presença de correlações espaciais observadas nos diagramas, evidenciando que a resposta do sistema não é homogênea ao longo do domínio analisado. Essa variável permite que a RNA capture variações locais e gradientes espaciais que não seriam adequadamente representados apenas por variáveis globais de processo;

4 - O gradiente de temperatura (dT) apresentou correlação relevante, especialmente na análise de Spearman, indicando a importância de efeitos dinâmicos e transientes associados a variações térmicas capturadas nos diferentes pontos do processo. Esse resultado demonstra que não apenas o valor absoluto da temperatura, mas também sua taxa de variação, influencia o comportamento do H_2 no sistema, reforçando a necessidade de incorporar informações derivadas no modelo.

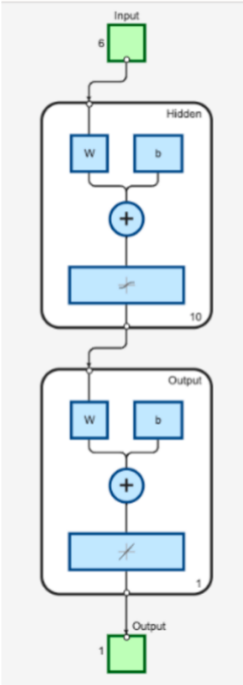
5 - As variáveis, média móvel do H_2 e média móvel da temperatura foram incluídas para capturar a dependência temporal e o efeito de memória do processo, evidenciado pelas correlações significativas observadas nos diagramas. A presença dessas variáveis suaviza ruídos experimentais e permite que a RNA incorpore informações históricas recentes, fundamentais para a modelagem de sistemas físico-químicos com comportamento dinâmico e não estacionário, futuramente, essa adição possibilitará mais facilmente, a integração desse modelo RNA a um sistema de controle operacional.

Assim, a combinação de variáveis físicas (temperatura, umidade), espaciais (ponto de medição) e dinâmicas (dT e médias móveis) fornece à RNA uma representação mais completa do estado do processo.

Treinamento e Desempenho da RNA

Definidas as variáveis, o processo de treinamento da Rede Neural Artificial foi conduzido para ajustar os pesos e bias da arquitetura da RNA, visando a minimização do erro global de predição e ajuste da rede. Para monitorar a eficácia desse aprendizado e garantir a estabilidade do modelo, serão analisados os gráficos de performance e estado de treinamento gerados pelo software MATLAB, os quais permitem visualizar a convergência do algoritmo Levenberg–Marquardt ao longo das iterações. Na figura 4 é possível analisar a arquitetura da Rede Neural desenvolvida para este estudo.

Figura 4. Arquitetura da Rede Neural Artificial (RNA) desenvolvida para a previsão de hidrogênio em ligas de alumínio.



Uma função de ativação *tansig* (sigmoide tangente hiperbólica) foi empregada na camada oculta para capturar relações não lineares. Uma função de ativação *purelin* (linear) foi aplicada na camada de saída para preservar a interpretabilidade física dos valores previstos.

Definida a arquitetura da rede, o processo de treinamento foi iniciado utilizando o algoritmo de retropropagação Levenberg-Marquardt (LM). Esta etapa é fundamental para o ajuste dos pesos sinápticos e dos vieses (bias), visando a minimização do erro global de predição.

Após a fase de treinamento e validação da Rede Neural, os resultados foram consolidados em métricas estatísticas que permitem avaliar a precisão e o erro do modelo. A utilização de múltiplos indicadores, como o coeficiente de determinação (R2), o erro quadrático médio (RMSE) e o erro médio absoluto (MAE), fornece uma visão completa do desempenho da rede.

Enquanto o R2 indica a proporção da variância da solubilidade de hidrogênio que o modelo consegue explicar, o RMSE e o MAE quantificam o desvio das previsões em unidades reais ($cm^3/100g$), permitindo

aferir a precisão da ferramenta para o controle de qualidade industrial.

Os resultados obtidos para os conjuntos de treinamento, validação e teste estão sintetizados na Tabela 1.

Tabela 1. Resultados Gerados pela Rede Neural usando algoritmo LM.

RNA - Resultados Finais método LM		
R^2	RMSE	MAE
0.997	0.002	0.002

Analisando a tabela, é possível inferir que o modelo apresentou um ótimo valor de R^2, com 0.997, o que indica uma forte correlação entre as variáveis de entrada, ou seja, os dados experimentais e a concentração de hidrogênio prevista no modelo. O baixo valor observado para o MAE mostra que a rede é capaz de realizar predições com erros mínimos, o que é essencial para a operação em ambiente de fundição, onde pequenas variações no teor de gás podem impactar severamente a porosidade final das peças. Além disso, a similaridade entre os erros de validação e de teste corrobora a estabilidade do algoritmo de Levenberg–Marquardt e a eficácia da arquitetura de 10 neurônios na camada oculta, garantindo que o modelo possui alta capacidade de generalização e não sofreu de *overfitting*.

Para quantificar a precisão do modelo logo após a fase de aprendizado, foram extraídas as principais métricas de erro estatístico associados com esse procedimento. A Tabela 2 apresenta o desempenho consolidado da RNA, detalhando o erro quadrático médio (RMSE), o erro médio absoluto (MAE) e o coeficiente de determinação (R^2) para os diferentes métodos de regressão disponíveis atualmente no MATLAB, essa análise foi conduzida, visando a verificação da adequação do método LM na regressão da RNA, avaliando ainda, se outros métodos matemáticos trariam vantagens estratégicas na consolidação da RNA desenvolvida.

Tabela 2. Estudo de métricas comparativas dos Resultados dos Diferentes Formatos de Regressão da RNA.

Algoritmo	R^2	RMSE	MAE	Tempo (s)
Levenberg–Marquardt	0.9974	0.0021	0.0016	9,0695
Bayesian Regularization	0.9951	0.0029	0.0023	1,5754
Scaled Conjugate Gradient	0.9937	0.0033	0.0026	1,1831
One Step Secant	0.9939	0.0032	0.0026	0,8600
Resilient Backpropagation	0.9915	0.0038	0.0030	0,9566
Gradient Descent with Momentum	0.5977	0.0266	0.0142	0,9559
Gradient Descent with Adaptative Learning Rate	0.9843	0.0052	0.0043	0.7913

De forma geral, observa-se que a maioria dos algoritmos apresentou excelente capacidade preditiva, com R^2 superiores a 0,99, indicando elevada correlação entre valores experimentais e preditos para o comportamento das ligas metálicas em presença de hidrogênio.

O algoritmo Levenberg–Marquardt destacou-se como o de melhor desempenho global, apresentando o maior R^2 (0,9974) e os menores valores de RMSE e MAE, evidenciando alta precisão na regressão dos dados. Entretanto, esse ganho em acurácia ocorreu à custa de um maior tempo computacional, o que é consistente com a natureza intensiva em memória desse método.

A Bayesian Regularization apresentou desempenho ligeiramente inferior em termos de erro, porém com tempo de processamento significativamente menor, o que indica um equilíbrio favorável entre robustez, generalização e custo computacional, especialmente relevante para conjuntos de dados experimentais sujeitos a ruídos, como aqueles associados a fenômenos de absorção e difusão de H_2 em ligas metálicas.

Os algoritmos Scaled Conjugate Gradient, One Step Secant e Resilient Backpropagation exibiram desempenhos intermediários, com R^2 próximos de 0,99 e tempos computacionais reduzidos, configurando-se como alternativas eficientes quando se busca rapidez computacional sem perda significativa de precisão.

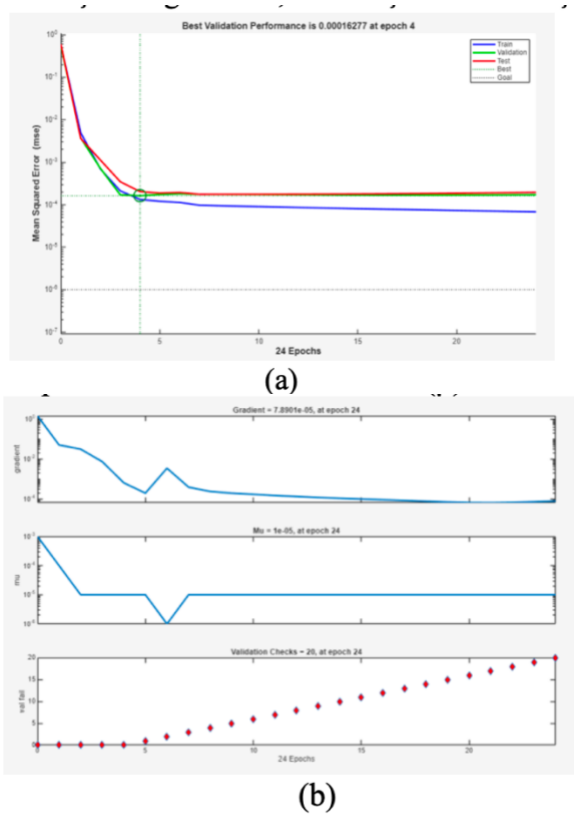
Por outro lado, o Gradient Descent with Momentum apresentou desempenho insatisfatório, com R^2 significativamente inferior (0,5977) e erros elevados, indicando incapacidade de capturar adequadamente a não linearidade do sistema estudado. Já o Gradient Descent with Adaptive Learning Rate, embora apresente tempo reduzido, mostrou desempenho inferior aos métodos de segunda ordem, reforçando sua limitação para problemas complexos e altamente não lineares.

De modo geral, os resultados demonstram que algoritmos de segunda ordem e métodos com estratégias de regularização são mais adequados para a modelagem RNA de sistemas metal–hidrogênio, nos quais pequenas variações experimentais podem resultar em respostas
altamente não lineares.

A consistência dos erros apresentados na Tabela 2 reflete a eficiência do ajuste dos parâmetros internos. O método LM mostrou ser estatisticamente confiável e robusto no processo de otimização paramétrica, por conta disso, seguimos com ele como método padrão nas demais análises conduzidas ao longo do trabalho.

Para uma compreensão detalhada da dinâmica desse aprendizado da rede, é necessário analisar o comportamento do erro ao longo das iterações e a estabilidade dos parâmetros de controle do algoritmo. A Figura 5 apresenta as curvas de performance e as métricas de estado do treinamento, permitindo verificar a convergência do modelo e a eficácia do critério de parada
adotado.

Figura 5. (a) Curvas de desempenho do treinamento da RNA para os conjuntos de treinamento, validação e teste, indicando convergência adequada. (b) Estado do treinamento da RNA, com evolução do gradiente, verificações de validação e parâmetro de amortecimento (μ).



Na Figura 5a, é possível observar a trajetória do Erro Quadrático Médio (MSE) para os três conjuntos de dados (treinamento, teste e validação). O declínio acentuado inicial demonstra um aprendizado rápido da rede, enquanto a estabilização das curvas de validação e teste próximas à curva de treinamento indica um modelo equilibrado, sem viés e sem tendencia de *overfitting*. O círculo verde destaca a época em que o erro de validação foi minimizado, ponto no qual o treinamento foi interrompido para garantir a máxima capacidade de generalização da rede neural. Paralelo a isso, a Figura 5b detalha o estado do treinamento através do gradiente e do parâmetro de adaptação μ. A redução gradual do gradiente até o valor final confirma que o algoritmo alcançou um ponto de convergência estável. Já a evolução do parâmetro μ reflete os ajustes dinâmicos realizados pelo algoritmo de Levenberg-Marquardt para otimizar o passo de aprendizagem, assegurando que o treinamento fosse concluído com precisão e eficiência computacional.

Para sintetizar a metodologia aplicada e facilitar a compreensão do fluxo de informações dentro do sistema, a figura 6 nos detalha as etapas sequenciais executadas pelo script do MATLAB. O diagrama abrange desde a aquisição e pré-processamento dos dados obtidos através das medições, incluindo a limpeza e normalização das variáveis, até as fases de particionamento, treinamento e a geração da saída final correspondente ao teor de hidrogênio.

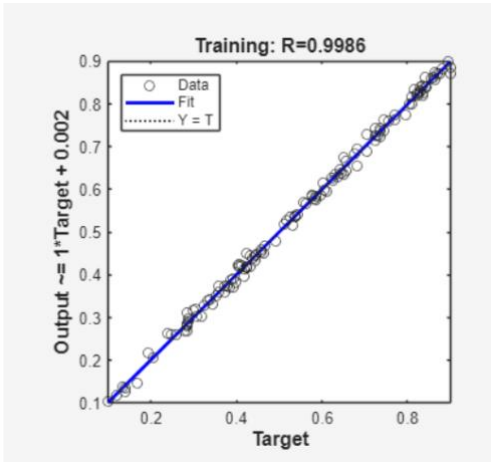
A estruturação apresentada no fluxograma reforça a robustez do modelo, destacando que a predição não é um processo isolado, mas o resultado de um tratamento rigoroso dos dados de entrada. A integração entre as variáveis físicas (temperatura e umidade) e os parâmetros matemáticos da rede, conforme ilustrado, garante que o modelo opere de forma cíclica e verificável. Esta organização lógica é o que permitiu alcançar os níveis de precisão discutidos anteriormente, consolidando a RNA como uma ferramenta apta para o monitoramento contínuo em ambiente de produção. Esse resultado é evidenciado pelo elevado coeficiente de correlação R^2 = 0.99677 no sistema de teste apresentado na Figura 6, onde dados ainda não vistos pela rede durante as etapas de treinamento e validação foram previstos com alta confiabilidade.

Complementando a análise estatística, a avaliação visual da distribuição dos erros é fundamental para garantir que o modelo não apresenta tendências sistemáticas ou falhas na captura da dinâmica dos dados. A Figura 7 apresenta um conjunto de diagnósticos sobre tais erros, permitindo verificar a qualidade da predição sob diferentes perspectivas, desde a frequência dos desvios até a dependência temporal das medições.

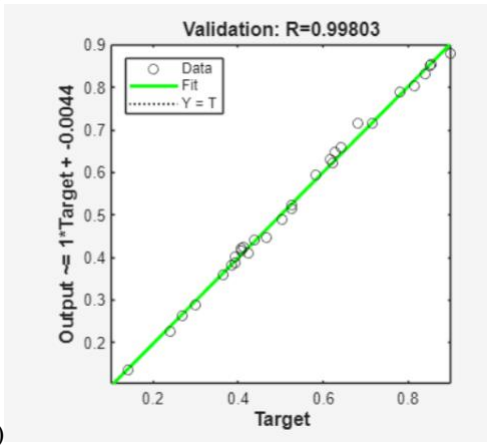
A análise do diagrama de erros na figura 7a revela que a grande maioria dos desvios está concentrada em torno da linha de erro zero, seguindo uma distribuição aproximadamente normal, o que é um indicativo de um modelo bem ajustado. Na figura 7b, a dispersão dos erros por observação demonstra que a rede mantém uma precisão constante ao longo de todo o conjunto de dados, sem apresentar picos de erro que indiquem instabilidade em condições específicas.

Além disso, o gráfico de autocorrelação na figura 7c confirma que os erros são independentes entre si, não havendo padrões temporais remanescentes que o modelo tenha falhado em capturar. Por fim, em 7d, a figura ratifica que a magnitude do erro não aumenta de forma proporcional ao teor de hidrogênio, garantindo que a precisão da RNA é preservada tanto em baixas quanto em altas concentrações de gás na liga de alumínio.

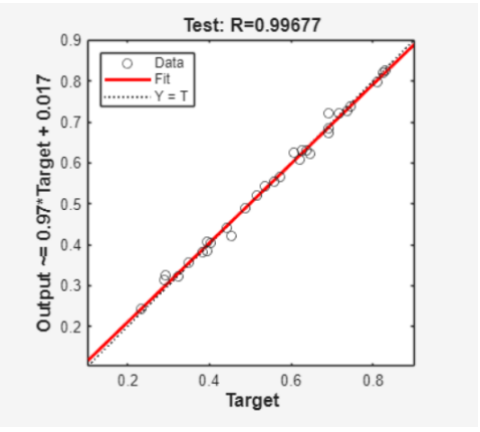
Figura 6. Comparação entre valores experimentais (target) e valores preditos pela RNA para os conjuntos de (a) treinamento, (b) validação, (c) teste e (d) dados totais.



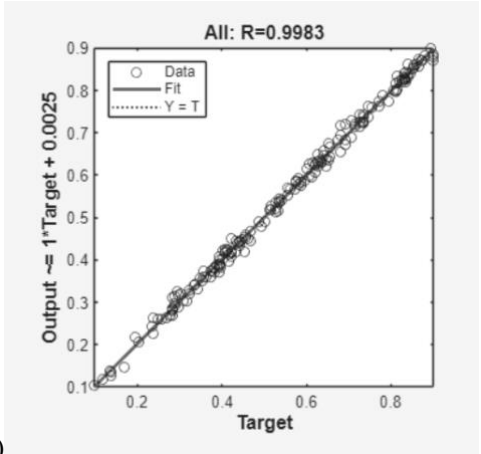
(a)



(b)

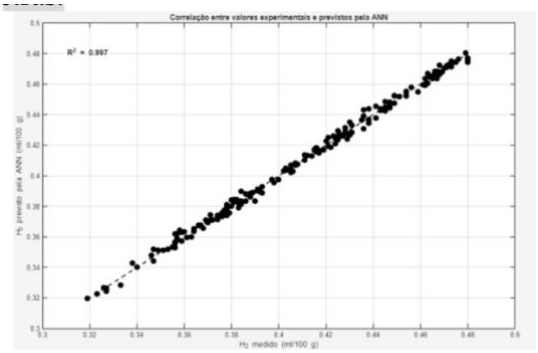


(c)

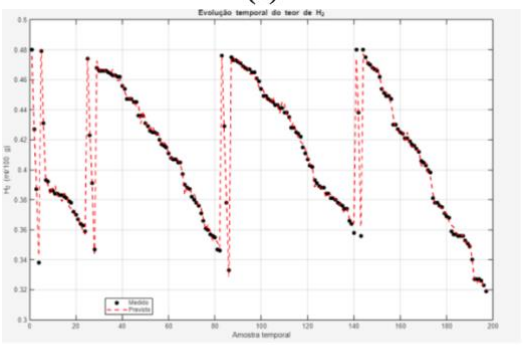


(d)

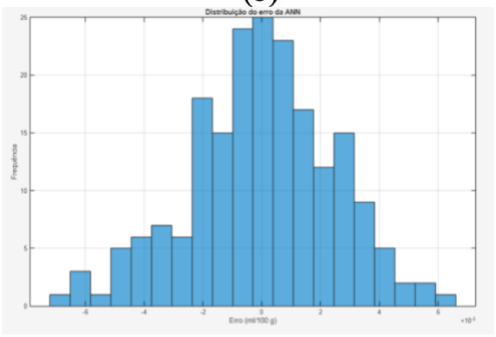
Figura 7. Desempenho do modelo RNA: (a) valores preditos versus experimentais; (b) comportamento temporal do modelo; (c) distribuição dos resíduos; (d) resíduos ao longo das amostras.



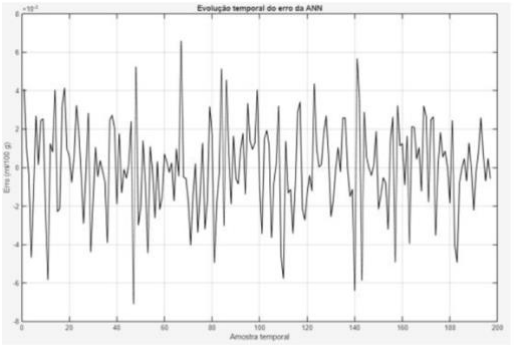
(a)



(b)



(c)



(d)

A Figura 8 apresenta a matriz de dispersão (scatterplot matrix) entre as variáveis utilizadas no estudo, permitindo uma análise conjunta das distribuições individuais e do comportamento bivariado entre os parâmetros do processo. Observa-se que a temperatura apresenta forte tendência positiva com as variáveis H_2 médio em janela móvel (H_2mov) e temperatura média móvel (Tmov), com coeficientes de correlação próximos de 0,89, evidenciando a relevância térmica no controle do hidrogênio dissolvido no alumínio líquido. Comportamento similar da dissolução é descrito em Corradi (2001).

As distribuições apresentadas na diagonal mostram que a maioria das variáveis apresenta dispersão adequada e amplitude suficiente, condição favorável para o treinamento de modelos não lineares, reduzindo riscos de viés e saturação da rede. Observa-se que a temperatura apresenta correlação positiva significativa com a variável resposta H_2, confirmando sua influência dominante no sistema e justificando sua inclusão como variável principal no modelo. Relações monotônicas bem definidas entre temperatura, gradiente térmico e H_2 indicam que variações térmicas afetam diretamente o comportamento do hidrogênio, refletindo mecanismos físico-químicos associados à difusão e solubilidade em ligas metálicas.

A umidade apresenta correlações mais moderadas e dispersas, sugerindo influência indireta no processo, possivelmente relacionada a efeitos de superfície ou condições ambientais. Apesar disso, sua interação com outras variáveis indica contribuição complementar para a explicação da variabilidade do sistema, reforçando sua relevância como variável auxiliar. Comportamento descrito de forma similar por Ferreira de Oliveira (2010).

O ponto de medição exibe correlações discretas com as demais variáveis, mas padrões distintos nos gráficos de dispersão indicam a presença de efeitos espaciais. Essa característica sugere que o comportamento do H_2 não é homogêneo ao longo do domínio analisado, justificando a inclusão dessa variável para capturar variações locais que não seriam representadas apenas por variáveis globais.

As variáveis derivadas, como o gradiente de temperatura (dT) e as médias móveis, apresentam correlações consistentes com a saída e entre si, evidenciando a importância de efeitos dinâmicos e de memória do processo. Esses resultados indicam que o sistema apresenta dependência temporal e não estacionariedade, características que são adequadamente tratadas pela RNA quando essas variáveis são incorporadas ao vetor de entrada.

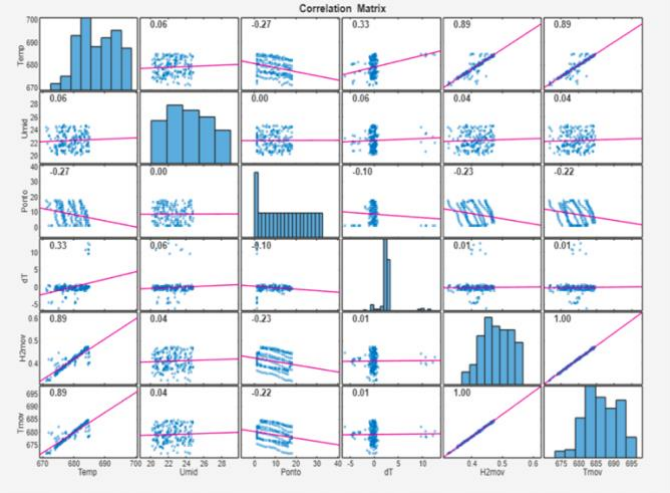


Figura 8. Matriz de correlação entre as variáveis de entrada e saída do modelo RNA, incluindo distribuições individuais (diagonal), relações bivariadas (gráficos de dispersão) e coeficientes de correlação.

Análise de sensibilidade da RNA

Embora as Redes Neurais Artificiais apresentem alta capacidade preditiva, é fundamental compreender como cada variável de entrada influencia o resultado. A análise de sensibilidade permite identificar o impacto individual e combinado de parâmetros como temperatura e umidade na concentração de hidrogênio no metal líquido, validando se o comportamento do modelo computacional está alinhado aos fenômenos termodinâmicos observados durante o processo de produção de ligas de alumínio.

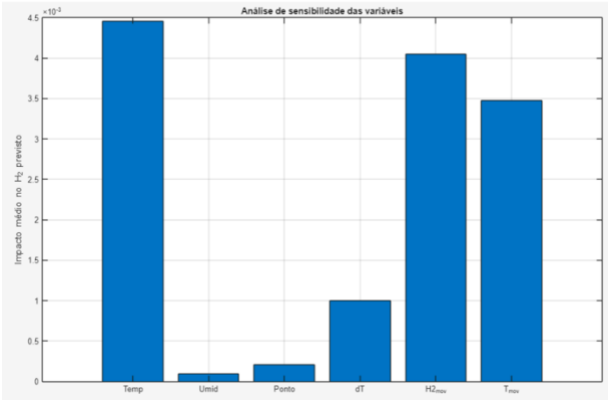
Para avaliar a relevância de cada parâmetro, podemos analisar a figura 9, onde é apresentado o grau de sensibilidade do modelo, destacando quais variáveis provocam as maiores oscilações na predição do teor de hidrogênio quando submetidas a variações controladas em suas faixas operacionais.

Dessa forma, a imagem revela que a temperatura do metal e a umidade do ar se apresentam como variáveis relevantes e com impacto na resposta do modelo, embora a temperatura se mostre muito mais significativa. Esse resultado demonstra que a RNA respeita os princípios fundamentais da Lei de Sieverts. Esta lei estabelece que a solubilidade de um gás diatômico, como o hidrogênio, em metal fundido é proporcional à raiz quadrada da sua pressão parcial na atmosfera em contato com o banho ($S = K\sqrt{PH2}$). Como a pressão de hidrogênio é derivada diretamente da dissociação do vapor d'água (umidade), a rede capturou corretamente essa dependência. Dados similares são descritos por Han et al. (2020).

Além disso, a sensibilidade térmica observada reflete o comportamento da constante de equilíbrio (K) da Lei de Sieverts, que aumenta exponencialmente com o calor. O fato de a RNA atribuir maior peso a esses fatores prova que o modelo não é apenas uma correlação estatística vazia, mas que "aprendeu" a física do processo: temperaturas mais altas expandem a rede atômica do alumínio e a maior umidade fornece mais hidrogênio atômico para ser absorvido pelo metal. Assim, a rede neural valida o fenômeno

termodinâmico de que o metal líquido atua como uma "esponja" para o gás sob essas condições específicas ao longo do processamento da liga.

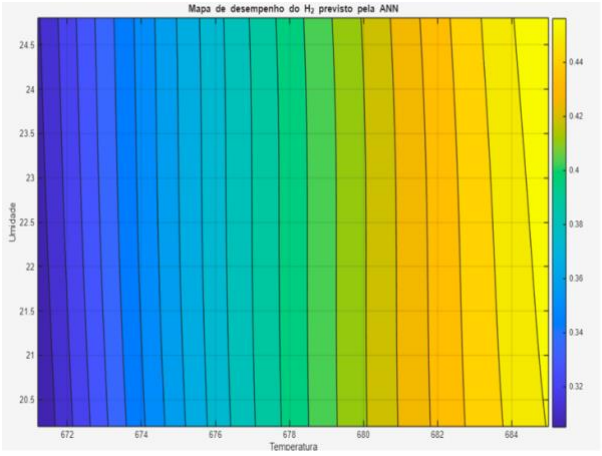
Figura 9. Análise de Sensibilidade das Variáveis da RNA.



As variáveis adicionais, derivadas das medições iniciais in situ (dT, H2mov e Tmov), demonstraram possuir variabilidade e relevância sobre a capacidade representativa do modelo RNA gerado, indicando que a análise de sensibilidade anteriormente conduzida se mostrou adequada e promoveu avanços em relação a modelos mais simplistas.

Complementando a análise de relevância individual das variáveis, buscou-se mapear a interação sinérgica entre os dois principais influenciadores da solubilidade in situ, temperatura e umidade. A Figura 10 apresenta um mapa de calor (*heatmap*) que correlaciona a temperatura do metal e a umidade atmosférica com os níveis de hidrogênio previstos pela rede neural. Esta representação visual é fundamental para identificar as zonas críticas de operação onde o risco de contaminação do banho metálico é maximizado pelas condições de contorno.

Figura 10. *HeatMap* de Desempenho do H_2 (H_2/100g) Previsto na liga de alumínio pela Rede Neural.



O gradiente de cores observado na imagem evidencia que as maiores concentrações de hidrogênio (zonas em amarelo e laranja) ocorrem invariavelmente nos quadrantes de alta temperatura combinada com elevada umidade absoluta. Este mapeamento confirma que a RNA foi capaz de integrar as variáveis de forma multidimensional, respeitando o aumento da atividade química do hidrogênio em ambientes saturados de vapor d'água sob calor intenso.

Importante aqui salientar, que assim como nos dados experimentais utilizados nas etapas de consolidação da RNA, a previsibilidade gerada associa efeitos muito mais significativos a temperatura do que a umidade ao longo das predições. Para a gestão industrial, este gráfico funciona como uma ferramenta de suporte à decisão: ele permite que a equipe de processo antecipe tendências de rejeitos por porosidade.

Ao observar as condições ambientais do dia e a temperatura de vazamento, a equipe pode consultar o comportamento previsto pela rede e, se necessário, ajustar preventivamente os parâmetros de desgaseificação (como tempo de rotor ou fluxo de argônio), otimizando o consumo de insumos e garantindo a qualidade metalúrgica da liga antes mesmo do preenchimento dos moldes.

Discussão Industrial e Operacional do Modelo, comparativo entre métricas existentes

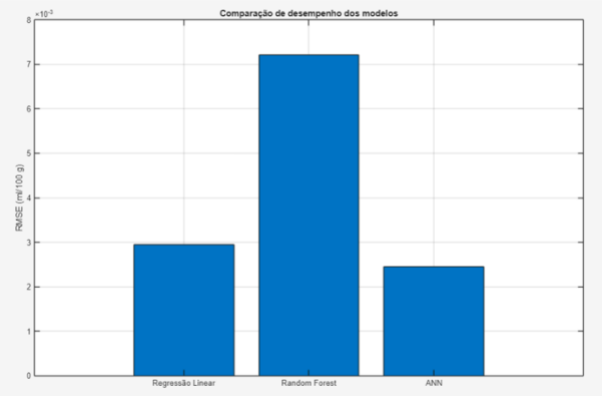
Com o intuito de validar a superioridade das Redes Neurais Artificiais para este problema específico, é possível realizar um comparativo entre o desempenho da RNA com dois modelos clássicos de predição: a Regressão Linear Múltipla e o algoritmo de Random Forest. Esta comparação é essencial para demonstrar que a complexidade computacional da rede neural é justificada por um ganho real na precisão das estimativas de hidrogênio. A Figura 11 apresenta a comparação do erro quadrático médio (RMSE) obtido para cada uma das técnicas aplicadas sobre o mesmo conjunto de dados industriais.

A análise comparativa apresentada na figura revela que a RNA obteve o menor erro quadrático médio (RMSE) entre todos os modelos testados. Enquanto o modelo Random Forest apresentou a maior taxa de erro, por tentar ajustar uma linha reta a fenômenos que, como visto pela Lei de Sieverts, são inerentemente não lineares, a rede neural conseguiu mapear as sutilezas da interação metal-atmosfera de forma mais eficaz.

O desempenho superior da RNA em relação ao Random Forest também destaca a eficiência da arquitetura de multicamadas em lidar com variáveis contínuas e ruidosas, típicas do ambiente de fundição. Estes resultados confirmam que a inteligência artificial é a ferramenta mais robusta para a predição

do H_2 nesse processo, oferecendo uma margem de segurança maior para o controle de processo e reduzindo a incerteza operacional na tomada de decisão sobre a qualidade das ligas de alumínio.
Do ponto de vista industrial e operacional, o modelo baseado em Redes Neurais Artificiais demonstrou elevado potencial para aplicação em sistemas reais envolvendo ligas metálicas em contato com hidrogênio. O alto desempenho preditivo, aliado à estabilidade observada durante o treinamento e à ausência de padrões sistemáticos nos resíduos, indica que o modelo é capaz de representar de forma confiável a complexa relação entre variáveis operacionais e o comportamento do H_2, mesmo em condições dinâmicas típicas de ambientes industriais.

Figura 11. Comparação do desempenho preditivo (RMSE) entre Regressão Linear, Random Forest e a Rede Neural Artificial desenvolvida.



A utilização de variáveis diretamente mensuráveis, como temperatura, umidade e ponto de medição, confere viabilidade prática ao modelo, uma vez que esses parâmetros são comumente monitorados por sistemas de instrumentação industrial. A inclusão de variáveis derivadas, como o gradiente de temperatura e médias móveis, permite ao modelo capturar efeitos transientes e dependência temporal, aspectos críticos em processos industriais sujeitos a flutuações operacionais e regimes não estacionários.
Sob a perspectiva operacional, o reduzido tempo computacional associado ao treinamento e à inferência do modelo viabiliza sua integração a sistemas de monitoramento em tempo quase real, possibilitando suporte à tomada de decisão, detecção precoce de desvios operacionais e otimização de condições de operação. Além disso, a capacidade do modelo de generalizar adequadamente para dados de validação e teste reforça sua robustez frente à variabilidade inerente aos processos industriais.

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos neste trabalho demonstram que a utilização de Redes Neurais Artificiais (RNA) constitui uma abordagem eficiente e robusta para a predição do teor de hidrogênio em ligas de alumínio sob condições industriais reais. O modelo desenvolvido, baseado em uma arquitetura MLP treinada pelo algoritmo Levenberg–Marquardt, apresentou elevado desempenho preditivo, atingindo coeficiente de determinação (R^2) de 0,997 e baixos valores de erro estatístico, evidenciando elevada capacidade de ajuste e generalização.
A estabilidade observada durante o treinamento, associada à ausência de tendências sistemáticas nos resíduos, indica que a RNA foi capaz de representar adequadamente o comportamento não linear do processo, mesmo diante das flutuações operacionais típicas do ambiente industrial. Os resultados obtidos confirmam ainda que variáveis como temperatura do metal e umidade atmosférica exercem forte influência sobre a absorção de hidrogênio, em concordância com os fundamentos termodinâmicos descritos pela Lei de Sieverts.
Do ponto de vista aplicado, a integração entre medições industriais in situ e modelagem computacional permitiu transformar dados operacionais em informações preditivas relevantes para o controle metalúrgico. A utilização do modelo possibilita antecipar condições críticas de contaminação por hidrogênio, contribuindo para a redução de defeitos por porosidade, diminuição de taxas de refugo e maior estabilidade do processo de fundição.
Além disso, os resultados indicam que a metodologia proposta possui potencial para aplicação em sistemas de monitoramento quase em tempo real, auxiliando na tomada de decisão operacional e no suporte ao controle de qualidade industrial. A utilização de variáveis diretamente mensuráveis e de fácil aquisição reforça a viabilidade prática da implementação do modelo em ambiente produtivo.
Por fim, este estudo evidencia o potencial da aplicação de técnicas de inteligência artificial na modernização de processos metalúrgicos. Como perspectivas futuras, recomenda-se a ampliação do modelo com inclusão de novas variáveis operacionais, como parâmetros de desgaseificação e controle de fluxo de gases inertes, além da integração da RNA a sistemas supervisórios industriais para monitoramento contínuo e otimização dinâmica do processo de fundição.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a empresa referência pela cessão dos dados experimentais utilizados no desenvolvimento do trabalho.

REFERÊNCIAS

ABB BOMEM. *AlScan Manual: Direct Measurement of Hydrogen in Molten Aluminium*. ABB Bomem Inc., Quebec, 2002.

ANSON, J. P.; GRUZLESKI, J. E. The quantitative discrimination between shrinkage and gas microporosity in cast aluminum alloys using spatial data analysis. *Materials Characterization*, v. 43, p. 319–335, 1999.

BOLIBRUCHOVÁ, D.; RICHTÁRECH, L. Study of the gas content in aluminum alloys. *Manufacturing Technology*, v. 13, p. 14–20, 2013.

CAMARGO, W. F. de. *Estudo do processo de desgaseificação por nitrogênio da liga de alumínio SAE 306 na fundição sob pressão*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade de Caxias do Sul, Caxias do Sul, 2014.

CAMPBELL, J. *The Liquid Metal*. The University of Birmingham, Birmingham, 1994.

CHARTRAND, P. et al. *Caractéristiques électrochimiques de l'alliage d'aluminium A380 en milieu alcalin dilué*. Université du Québec à Chicoutimi, Québec, 2010.

CORRADI, C. A. L. *Metalurgia das ligas de alumínio e tratamento no metal líquido*. SENAI MG, Itaúna, 2001.

FERREIRA DE OLIVEIRA, A. *Redução controlada do teor de hidrogénio em ligas de alumínio*. Dissertação de Mestrado, Universidade do Porto, Porto, 2010.

FOSTER, X.; CHABOT, N.; CANTIN, K.; LALIBERTÉ, G. *Procédure d'opération de l'appareil Alscan*. Alcoa, Deschambault, 2018.

GALANT, A. C. *Desgaseificação de ligas de alumínio: comparação entre os principais métodos – desgaseificação rotativa e desgaseificação com plug poroso*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1995.

GROTEKE, D. E.; SIGWORTH, G. K. *Reduced Pressure Test to Measure Aluminum Melt Quality*. Q. C. Designs; Alcoa Primary Metals, 2006.

HAN, Y. et al. Influence of hydrogen embrittlement on impact property and microstructural characteristics in aluminum alloy weld. *Vacuum*, v. 172, 109073, 2020.

HARVEY, J. P.; CHARTRAND, P. Modeling the hydrogen solubility in liquid aluminum alloys. *Metallurgical and Materials Transactions B*, v. 41, p. 908–924, 2010.

NUNES, H. et al. Adding value to secondary aluminum casting alloys: a review on trends and achievements. *Materials*, v. 16, 895, 2023.

SANTOS, R. M. dos. *Efeitos do hidrogênio na corrosão localizada de ligas de alumínio*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Estadual Paulista, Araraquara, 2019.

SHIH, T.-S.; HUANG, L.-W.; CHEN, Y.-J. Relative porosity in aluminium and in aluminium alloys. *International Journal of Cast Metals Research*, v. 18, p. 301–308, 2005.

TATAR, A.; SHOKROLLAHI, A.; ZEINIJAHROMI, A.; HAGHIGHI, M. Deep learning for predicting hydrogen solubility in n-alkanes: enhancing sustainable energy systems. *Sustainability*, v. 16, 7512, 2024.

THANH, H. V. Physics informed machine learning for prediction hydrogen solubility in aqueous solution to implication for underground hydrogen storage formations. *Renewable Energy*, v. 256, Part G, 124460, 2026.

SOBHANI, F.; KUNDU, P.; DEY, N. The Basis of Artificial Neural Network (ANN): Structures, Algorithms and Functions. In: DEY, N.; SHARMA, A.; BALAS, V. E. (eds.). *Computational Intelligence for Water and Environmental Sciences*. Singapore: Springer, 2022. p. 225–250. DOI: 10.1007/978-981-19-2519-1_11. Disponível em: Springer Link. Acesso em: 13 maio 2026.

Walczak S, Cerpa N. Artificial Neural Networks. In: Meyers RA, editor. Encyclopedia of Physical Science and Technology. 3rd ed. San Diego: Academic Press; 2003. p. 631–645. doi:10.1016/B0-12-227410-5/00837-1. Disponível em: ScienceDirect.