

## ESTUDO DA RELAÇÃO COMPOSIÇÃO-DUREZA EM VIDROS $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$ POR MEIO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

PATRICK QUEIROZ DOS ANJOS<sup>1</sup> e MARCELO LUCAS PEREIRA MACHADO<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Doutorando em Engenharia Mecânica, Unicamp, Campinas-SP, patrick.dosanjos@outlook.com;

<sup>2</sup>Dr. em Engenharia Elétrica, Professor no Instituto Federal do Espírito Santo (IFES), Vitória-ES, marcelolucas@ifes.edu.br;

Apresentado no  
Congresso Técnico Científico da Engenharia e da Agronomia – CONTECC  
6 a 9 de outubro de 2025

**RESUMO:** Os vidros possuem uma ampla aplicação em diferentes áreas, bem como em produtos e utensílios domésticos até em aplicações industriais de alta tecnologia. A partir do sistema químico  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$ , composição mais comum entre os vidros, responsável por uma grande quantidade de produção mundial de vidros, esses materiais possuem diferentes propriedades, como o módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson e a dureza. A partir da dureza é possível correlacionar outras propriedades mecânicas, extremamente útil quando há poucos corpos de prova ou material para ser ensaiado ou estudado. Por utilização de redes neurais artificiais, modelos de inteligência artificial que possuem ótima adaptabilidade e capacidade de aprendizado, a dureza de vidros  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  foi modelada. Os resultados demonstraram boas avaliações estatísticas e uma alta correlação entre os dados e os valores preditos pela rede neural artificial construída. As influências de cada variável da composição  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  foi demonstrada, a partir de cálculos de análise de sensibilidade e de um gráfico ternário, indicando que a variação de cada variável possui efeito direto na dureza. Um arquivo, de domínio público, é apresentado para demonstrar todos os passos realizados no presente artigo.

**PALAVRAS-CHAVE:** Vidros, Dureza, Redes neurais artificiais, Análise de sensibilidade.

### STUDY OF THE COMPOSITION-HARDNESS RELATION IN $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$ GLASSES USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

**ABSTRACT:** Glass has a wide range of applications in different areas, from utensils to high-tech industrial applications. Based on the  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  chemical system, the most common composition among glasses, responsible for a large amount of global glass production, these materials have different properties, such as the modulus of elasticity, Poisson's ratio and hardness. From the hardness, it is possible to correlate other mechanical properties, which is extremely useful when there are few test specimens or materials to be tested or studied. Using artificial neural networks, artificial intelligence models that have great adaptability and learning capacity, the hardness of  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  glasses was modeled. The results demonstrated good statistical evaluations and a high correlation between the data and the values predicted by the constructed artificial neural network. The influences of each variable of the  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  composition were demonstrated, based on sensitivity analysis calculations and ternary graph, indicating that the variation of each variable has a direct effect on the hardness. A public domain file is presented to demonstrate all the steps performed in this article.

**KEYWORDS:** Glasses, Hardness, Artificial neural networks, Sensitivity analysis.

## INTRODUÇÃO

Vidros do sistema  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  possuem uma gama de aplicação e correspondem aproximadamente em 90% da produção mundial de vidros (Schaeffer, 1998). Apesar de sua vasta utilização, esses vidros possuem fragilidade e uma ampliação de tensões através da sua superfície. Com isso o entendimento desses fenômenos pode auxiliar na compreensão de um aperfeiçoamento de diferentes propriedades desses materiais (Macedo et al., 2018).

A dureza é uma das propriedades mecânicas estudadas nesses vidros (Schaeffer, 1998; Aissou et al., 2018; Macedo et al., 2018; da Silva et al., 2022) e possui relação tanto com outras propriedades mecânicas, como o módulo de elasticidade (Schaeffer, 1998), tanto com a composição química (Macedo et al., 2018). O estudo da dureza nesses vidros, além de melhorar a pesquisa e desenvolvimento de materiais aperfeiçoados em termos de propriedades mecânicas, pode também correlacionar com outras propriedades, conhecimento esse necessário quando não há muitos corpos de prova para ensaios ou materiais à disposição.

Por utilização de dados, a modelagem da dureza em função da composição química  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  foi realizada por intermédio das redes neurais artificiais (Rajendra et al., 2022) para correlacionar os efeitos de cada espécie química à dureza desses vidros.

## MATERIAL E MÉTODOS

O banco de dados *SciGlass* (Zhao e Cole, 2022) foi utilizado para construir uma base de dados relacionando a composição química, em porcentagem em peso,  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$  com a dureza, em GPa. A partir de diferentes filtros ( $\text{SiO}_2+\text{CaO}+\text{Na}_2\text{O}>99.99$  e dureza $>3$  GPa) a base de dados, com um total de 84 diferentes dados, foi padronizada por meio do z-score (Kim et al., 2025) e posteriormente foram retirados os dados de treinamento e de teste, com uma proporção de 70%-30%. Não houve redução de dimensionalidade, ou seja, diminuição das variáveis de entrada  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$ , pela consideração que nenhuma delas possuem alta correlação ( $>0.9$ ) (Figura 1), e a modelagem foi feita pelas redes neurais artificiais por possuírem comportamento não paramétrico (Yang et al., 2024).

A construção do modelo por rede neural artificial foi feito através de 3 neurônios, ou nós, de entrada (variáveis de entrada:  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ), 10 nós na camada intermediária e 1 nó de saída (variável de saída: dureza). A escolha de 10 nós foi realizada a partir de critérios de convergência (coeficiente de correlação(teste) $>0,7$  e coeficiente de determinação(treinamento) $>0,9$ ). O limite mínimo, 4 nós, é baseado no limite inferior da largura (número de nós por camada) mínima para uma rede neural artificial apresentar a propriedade de aproximador universal (Hanin e Sellke, 2017).

Avaliações estatísticas do erro absoluto médio, erro percentual absoluto médio e o coeficiente de correlação (Chicco et al., 2021) foram realizadas para demonstrar a robustez da rede neural artificial implementada.

Gráficos como a dispersão dos dados de teste ( $Y_t$ ) em relação aos dados preditos ( $Y_p$ ) pela rede neural artificial  $N$  ( $Y_p = N(Y_t)$ ) e o histograma dos desvios (desvios=dados<sub>teste</sub> - dados<sub>predito</sub>), além de uma escala de desvios absolutos (módulo dos desvios), foram feitos para demonstrar a correlação dos dados. A contribuição relativa  $CR$  (adimensional) pelo método Connection Weights (Olden e Jackson, 2002) das variáveis de entrada à variável de saída foi computada e um gráfico ternário, com cada uma das variáveis de entrada, foi construído para indicar a influência de cada variável, a partir de sua variação, na dureza desses vidros.

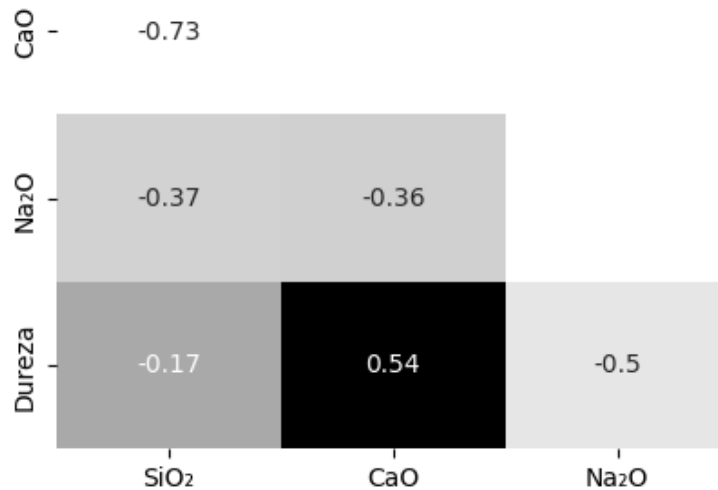
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A relação entre os dados de teste e os dados preditos pode ser visto na Figura 2 a).

A rede neural artificial apresentou um erro absoluto médio de 0,23 GPa e um erro percentual absoluto médio de 4,26%. Com um coeficiente de correlação calculado de 0,7953 é indicativo que a rede neural artificial demonstrou uma alta correlação (Vatcheva et al., 2016) com os dados preditos em

relação aos dados de teste. O desvio absoluto demonstrou um valor máximo menor que 1 GPa e o histograma dos desvios (Figura 2 b)) apresentou assimetria com um valor de 0,2209 GPa<sup>3</sup>, indicando uma assimetria positiva.

Figura 1. Relação entre variáveis pelo coeficiente de correlação.



A influência entre as variáveis SiO<sub>2</sub>-CaO-Na<sub>2</sub>O à dureza pode ser visto na Figura 3.

A variável Na<sub>2</sub>O possui CR de -1,09, sendo inversamente proporcional à dureza (Agwu et al., 2019), indicando que um aumento da quantidade de Na<sub>2</sub>O implica uma diminuição na dureza nos vidros SiO<sub>2</sub>-CaO-Na<sub>2</sub>O. Ao CaO (CR=0,81): Um aumento causa um incremento na dureza. Já em relação ao SiO<sub>2</sub> é variante em função das quantidades de CaO e Na<sub>2</sub>O, mas com mais indicação para a diminuição da dureza, pois possui CR=-0,08. Essas influências podem ser relacionadas com a correlação entre cada variável com o volume livre nesses vidros, sendo que os resultados possuem referência na literatura (Macedo et al., 2018; Aissou et al., 2018; da Silva et al., 2022).

A base de dados, a construção da rede neural artificial e os cálculos estatísticos, bem com os gráficos, podem ser vistos através do link <https://colab.research.google.com/drive/11LCqdDNwQbtDcTeUA62QWzGBy0jgHz7r?usp=sharing>.

## CONCLUSÃO

A dureza de vidros SiO<sub>2</sub>-CaO-Na<sub>2</sub>O foi modelada pela composição química por meio de uma rede neural artificial e apresentou uma correlação moderada (coeficiente de correlação=0,7953) em relação aos dados. As avaliações estatísticas de erro absoluto médio (0,23 GPa) e do erro percentual absoluto médio (4,26%) foram computadas e a influência da composição química em relação à dureza desses vidros foi calculada, demonstrando que a variação da composição química afeta diretamente na dureza, o que pode ser estudo para a produção de diferentes vidros.

Figura 2. Relação entre os dados de teste e os dados preditos na modelagem da dureza dos vidros  $\text{SiO}_2\text{-CaO-Na}_2\text{O}$ .

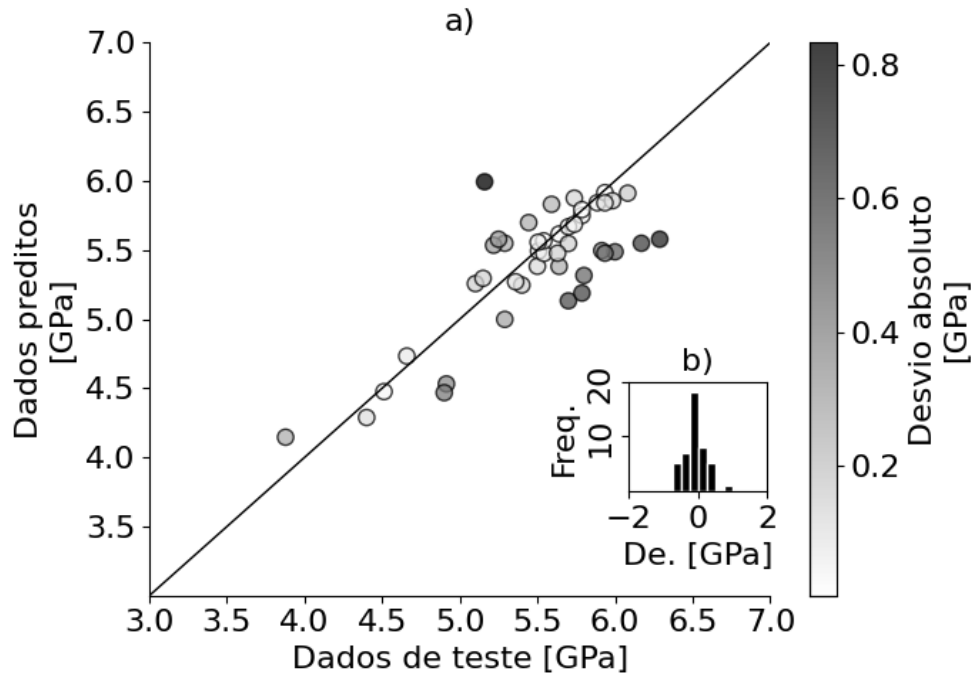
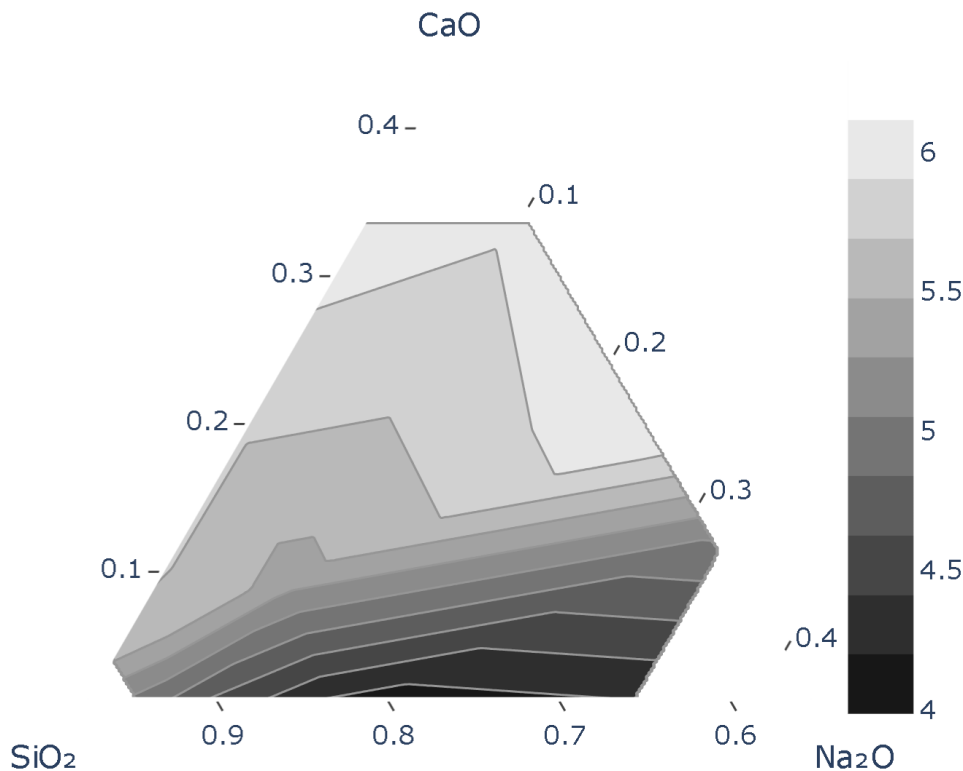


Figura 3. Relação entre a dureza e a composição dos vidros por meio de um gráfico ternário (Escala de cor: Dureza, em GPa).



## REFERÊNCIAS

- Aissou, S.; Boudizi, N.; Cormier, L.; Bonet-Martinez, E.; Merabet, D. Improvement of mechanical and optical properties of  $\text{Na}_2\text{O}$ - $\text{CaO}$ - $\text{SiO}_2$  glasses based on dune sand. *Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*. v.57, n.6, p.221-230, 2018.
- Agwu, O.; Akpabio, J.; Dosunmu, A. Artificial neural network model for predicting the density of oil-based muds in high-temperature, high-pressure wells. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*. v.10, p.1081-1095, 2019.
- Chicco, D; Warrens, M; Jurman, G. The coefficient of determination R-squared is more informative than SMAPE, MAE, MAPE, MSE and RMSE in regression analysis evaluation. *PeerJ Computer Science*, 7:e623, 2021.
- da Silva, M. D. C. R.; Bertuol, D. A.; Lopes, P. P. Characterization and potential applications of new boron-phosphate glass in the  $\text{CaO}$ - $\text{P}_2\text{O}_5$ - $\text{K}_2\text{O}$ - $\text{B}_2\text{O}_3$  system. *Cerâmica*. v.385, p.114-119, 2022.
- Hanin, B.; Sellke, M. Approximating Continuous Functions by ReLU Nets of Minimal Width. *ArXiv*. n. 1710.11278, 2017.
- Kim, Y-S.; Kim, M. K.; Fu, N.; Wang, J.; Srebric, J. Investigating the impact of data normalization methods on predicting electricity consumption in a building using different artificial neural network models. *Sustainable Cities and Society*. v. 118, 105570, 2025.
- Macedo, G; Sawamura, S; Wondraczek, L. Lateral hardness and the scratch resistance of glasses in the  $\text{Na}_2\text{O}$ - $\text{CaO}$ - $\text{SiO}_2$  system. *Journal of Non-Crystalline Solids*. v.492, p.94-101, 2018.
- Olden, J.; Jackson, D. Illuminating the “black box”: a randomization approach for understanding variable contributions in artificial neural networks. *Ecological Modelling*. v.154, p.135-150, 2002.
- Rajendra, P; Girisha, A; Naidu, T. Advancement of machine learning in materials Science. *Materials today: Proceedings*, v.68 (parte 8), p.5503-5507, 2022.
- Schaeffer, H. Scientific and technological challenges of industrial glass melting. *Solid State Ionics*. v.105, n.1-4, p.265-270, 1998.

- Vatcheva, K; Lee, M; McCormick, J, Rahbar, M. Multicollinearity in Regression Analyses Conducted in Epidemiologic Studies. *Epidemiology*, v.6, n.2, 227, 2016.
- Yang, Y.; Hu, R.; Wang, W.; Zhang, T. Construction and optimization of non-parametric analysis model for meter coefficients via back propagation neural network. *Scientific Reports*. v. 14, n. 11452, 2024.
- Zhao, J.; Cole, J. Reconstructing Chromatic-Dispersion Relations and Predicting Refractive Indices Using Text Mining and Machine Learning. *J. Chem. Inf. Model.* v. 62, n. 11, p. 2670-2684, 2022.