



**INSTITUTO LATINO-AMERICANO DE
TECNOLOGIA, INFRAESTRUTURA E
TERRITÓRIO (ILATIT)**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO Em
ENGENHARIA CIVIL (PPGECI)**

**PROPOSTA DE MODELO ENSEMBLE DE APRENDIZAGEM DE MÁQUINA PARA
A PREDIÇÃO DA PROFUNDIDADE DE CARBONATAÇÃO DE CONCRETOS
EXPOSTOS A CONDIÇÕES NATURAIS DE DEGRADAÇÃO**

BRENO DE MELO LAVINICKI

Foz do Iguaçu
2024



**INSTITUTO LATINO-AMERICANO DE
TECNOLOGIA, INFRAESTRUTURA E
TERRITÓRIO (ILATIT)**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO Em
ENGENHARIA CIVIL (PPGECI)**

**PROPOSTA DE MODELO ENSEMBLE DE APRENDIZAGEM DE MÁQUINA PARA A
PREDIÇÃO DA PROFUNDIDADE DE CARBONATAÇÃO DE CONCRETOS EXPOSTOS
A CONDIÇÕES NATURAIS DE DEGRADAÇÃO**

BRENO DE MELO LAVINICKI

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil.

Orientador: Prof. Dr. Emerson Felipe Félix

Foz do Iguaçu
2024

BRENO DE MELO LAVINICKI

**PROPOSTA DE MODELO ENSEMBLE DE APRENDIZAGEM DE MÁQUINA PARA A
PREDIÇÃO DA PROFUNDIDADE DE CARBONATAÇÃO DE CONCRETOS EXPOSTOS
A CONDIÇÕES NATURAIS DE DEGRADAÇÃO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil.

BANCA EXAMINADORA

Orientador: Prof. Dr. Emerson Felipe Félix
UNESP

Prof^a. Dra. Edna Possan
UNILA

Prof^a. Dra. Lisiane Pereira Prado
UNESP

Foz do Iguaçu, 30 de agosto de 2024.

Catálogo elaborado pelo Setor de Tratamento da Informação
Catálogo de Publicação na Fonte. UNILA - BIBLIOTECA LATINO-AMERICANA - CENTRAL

L412

Lavinicki, Breno de Melo.

Proposta de modelo ensemble de aprendizagem de máquina para a predição da profundidade de carbonatação de concretos expostos a condições naturais de degradação / Breno de Melo Lavinicki. - Foz do Iguaçu, 2024.

98 f.: il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal da Integração Latino-Americana. Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil. Foz do Iguaçu-PR, 2024.

Orientador: Emerson Felipe Félix.

1. Concreto - carbonatação. 2. Concreto - vida útil. 3. Redes neurais artificiais. 4. Ensemble learning. I. Félix, Emerson Felipe. II. Título.

CDU 666.972

Dedico este trabalho a meus pais, minha namorada, meus amigos e meu orientador, sem eles nada disto seria possível.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço ao meu professor orientador não só pela constante orientação neste trabalho, mas sobretudo por sua paciência e sua persistência para que juntos pudéssemos chegar até onde chegamos.

Aos professores das disciplinas cursadas no mestrado, por todo seu conhecimento e suas experiências compartilhadas em tão pouco tempo.

Aos colegas de curso pelo companheirismo e pelas boas conversas durante a execução dos trabalhos.

Algumas pessoas acham que foco significa dizer sim para a coisa em que você irá se focar. Mas não é nada disso. Significa dizer não às centenas de outras boas ideias que existem. Você precisa selecionar cuidadosamente.

Steve Jobs

RESUMO

O processo de carbonatação desempenha um papel muito importante no que se refere a vida útil de estruturas de concreto armado. Desenvolver modelos eficientes para prever a profundidade de carbonatação ao longo do ciclo de vida das estruturas tem sido objeto de investigação e exige profunda compreensão das diversas variáveis que influenciam o processo. Diante disso, neste estudo, avalia-se o emprego de técnicas ensemble de aprendizagem, do tipo Stacking, baseado no acoplamento de previsões obtidas via aprendizado de máquina, para a estimativa da profundidade da carbonatação do concreto. As modelagens foram realizadas considerando um banco de dados com 1021 dados de medições de profundidade de carbonatação em concretos expostos a ambientes de degradação natural. Foram utilizadas dez variáveis, relacionadas à composição da estrutura de concreto e às interferências do ambiente de exposição ao fenômeno da carbonatação. Ao todo 120 modelos individuais de redes neurais artificiais foram definidos e treinados, selecionando os cinco mais eficientes. O desempenho dos modelos foi avaliado utilizando o coeficiente de determinação (R^2) ponderado, que combina o R^2 de teste e o R^2 de treinamento. Para o modelo ensemble, foram consideradas como entradas, as previsões dos cinco modelos de RNAs com melhores performances. A abordagem ensemble do tipo Stacking resultou em uma melhoria de 9% no desempenho de generalização em comparação com o melhor modelo individual de RNAs, demonstrando um aprimoramento de 14% na precisão em relação aos modelos individuais. O modelo Ensemble com melhor performance, é capaz de prever a profundidade de carbonatação com um erro médio de 1,17 mm, com coeficiente de determinação de 0,92. Na análise de aplicabilidade, em um teste feito com dados desconhecidos na fase de geração do modelo, observou-se que a ferramenta desenvolvida proporcionou uma generalização de 91,4% na previsão da profundidade de carbonatação do concreto. Por fim, uma ferramenta computacional com interface gráfica foi desenvolvida e está disponível no site do grupo de pesquisa DASMAE (www.dasmae.com), com o objetivo de fomentar os desenvolvimentos do grupo e facilitar o emprego do modelo para avaliações práticas de durabilidade, auxiliando engenheiros e projetistas na tomada de decisões acerca do desenvolvimento de projetos com maior vida útil, segurança e sustentabilidade.

Palavras-chave: Carbonatação do Concreto. Vida Útil de Projeto. Redes Neurais Artificiais. Aprendizagem Ensemble.

ABSTRACT

The carbonation process significantly impacts the service life of reinforced concrete structures. Developing efficient models to predict the depth of carbonation throughout the lifecycle of these structures has been the focus of research and requires a deep understanding of the various variables influencing the process. In this study, the use of ensemble learning techniques, specifically the Stacking method, is evaluated based on the coupling of predictions obtained through machine learning for estimating the depth of concrete carbonation. The modeling was conducted using a database with 1021 measurements of carbonation depth in concretes exposed to natural degradation environments. Ten variables were used, related to the composition of the concrete structure and the environmental factors affecting carbonation. A total of 120 individual artificial neural network models were defined, trained, and the five most efficient were selected. The performance of the models was evaluated using the weighted coefficient of determination (R^2), which combines the test R^2 and training R^2 . For the ensemble model, the predictions of the five best-performing ANN models were used as inputs. The Stacking ensemble approach resulted in a 9% improvement in generalization performance compared to the best individual ANN model, demonstrating a 14% increase in accuracy over the individual models. The ensemble model with the best performance is capable of predicting carbonation depth with an average error of 1.17 mm and a coefficient of determination of 0.92. In an applicability analysis, a test with data not known to the model during its generation phase showed that the developed tool provided a 91.4% generalization in predicting concrete carbonation depth. Finally, a computational application with a graphical interface was developed and is available on the DASMAE research group website (www.dasmae.com) to support the group's developments and facilitate the use of the model for practical durability assessments, assisting engineers and designers in making decisions about developing projects with greater durability, safety, and sustainability.

Keywords: Carbonation. Concrete. Artificial Neural Network. Ensemble Learning.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação gráfica de uma árvore de regressão com três parâmetros de entrada.	16
Figura 2 – Representação de uma rede neural artificial com três parâmetros de entrada.	17
Figura 3 – Fluxograma das atividades do mestrado.....	24
Figura 4 – Representação da aplicação WEB - CARBENPRED.....	25
Figura 5 - Avanço da frente de carbonatação e alteração do pH do concreto no tempo.	27
Figura 6 - Fatores que influenciam a ocorrência da carbonatação.....	28
Figura 7 - Relação do processo de carbonatação com a umidade relativa do ambiente.....	29
Figura 8 - Influência da umidade dos poros no coeficiente de difusão do CO ₂	30
Figura 9 - Profundidade de carbonatação e diferentes tipos de cimento Portland. ...	31
Figura 10 - Influência da dimensão máxima dos agregados na carbonatação.	32
Figura 11 - Influência da proporção dos agregados na carbonatação.....	32
Figura 12 – Influência da cura na carbonatação do concreto em carbonatação acelerada, em concretos com CP II F – 32.	33
Figura 13 – Avanço da carbonatação no concreto.	44
Figura 14 - Modelo de elemento finito tridimensional da estrutura de concreto armado do estudo.	45
Figura 15 – Concentração de CO ₂ em função do tempo.....	46
Figura 16 - Resultados para concretos com (a) 25 MPa, (b) 30 MPa e (c) 35 MPa versus tempo.....	47
Figura 17 - Efeito dos cenários de mudanças climáticas na previsão da carbonatação para estrutura de concreto em Londres.	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Indicação das concentrações de CO ₂ de acordo com o ambiente.	30
Tabela 2 - Coeficientes do modelo.....	38
Tabela 3 - Coeficientes do modelo.....	39
Tabela 4 - Coeficientes do modelo em função (a) das características do concreto e das condições ambientais (b) das condições de exposição (POSSAN, 2010).....	40
Tabela 5 - Fatores de correção da carbonatação natural.....	42
Tabela 6 - Fatores do cimento para condutância da carbonatação.	43

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ILAACH	Instituto Latino-Americano de Arte, Cultura e História
ILACVN	Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza
ILAESP	Instituto Latino-Americano de Economia, Sociedade e Política
ILATT	Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e
UFPR	Universidade Federal do Paraná
UNILA	Universidade Federal da Integração Latino-Americana

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	14
1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO E MOTIVAÇÃO	14
1.2 OBJETIVOS.....	20
1.2.1 <i>Objetivo geral</i>	20
1.2.2 <i>Objetivos específicos</i>	21
1.3 HIPÓTESE DO TRABALHO.....	21
1.4 METODOLOGIA E CRONOGRAMA DAS ATIVIDADES	21
2 CARBONATAÇÃO DO CONCRETO	26
2.1 FENÔMENO DA CARBONATAÇÃO	26
2.2 FATORES QUE INFLUENCIAM NA CARBONATAÇÃO	27
2.2.1 <i>Umidade relativa do ar</i>	28
2.2.2 <i>Incidência e exposição a chuvas</i>	29
2.2.3 <i>Concentração de CO₂ no ambiente</i>	30
2.2.4 <i>Composição do concreto</i>	31
2.2.5 <i>Condições de execução e cura do concreto</i>	33
2.2.6 <i>Porosidade, relação água/cimento e resistência à compressão do concreto</i>	34
2.3 PREDIÇÃO DA PROFUNDIDADE DE CARBONTAÇÃO	34
2.3.1 <i>Formulações analíticas</i>	35
2.3.2 <i>Modelos numérico</i>	43
2.3 CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO	52
3 MATERIAIS E MÉTODOS: ARTIGO	54
4 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	89
4.1 LIMITAÇÕES DO TRABALHO	90
4.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	91
REFERÊNCIAS.....	93

1 INTRODUÇÃO

1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO E MOTIVAÇÃO

As estruturas de concreto armado são elementos fundamentais da construção civil, presentes nas diversas edificações e obras de infraestrutura, principalmente devido a sua durabilidade, versatilidade e custo-benefício. No entanto, estão sujeitas à deterioração ao longo do tempo, o que pode comprometer sua vida útil e causar falhas estruturais.

No Brasil, Carmona e Marega (1988), Dal Molin (1988), Andrade (1992) e Aranha (1994), verificaram a existência de um índice que varia entre 14 e 64% da ocorrência de corrosão em estruturas, sendo esta a deterioração mais frequente do concreto armado. Nestes estudos, verificou-se que a maior parte das estruturas tiveram a corrosão iniciada pela carbonatação do concreto.

Segundo Pauletti, Possan e Dal Molin (2007), a carbonatação, de forma simplificada, refere-se a uma reação físico-química entre os compostos hidratados do cimento e o CO_2 presente na atmosfera, que diminui o pH de materiais cimentícios. Este processo ocasiona na despassivação das armaduras, imersas no concreto, e tornando-as susceptíveis à corrosão, a qual causa a perda de resistência do concreto armado, desenvolvimento de fissuras no concreto e, em casos mais extremos, o colapso da estrutura.

Face aos problemas de degradação observados, especialmente devidos à corrosão do aço imerso no concreto, às novas necessidades competitivas e às exigências de sustentabilidade no setor da Construção Civil, nas últimas décadas verifica-se uma tendência mundial à elaboração de projetos voltados à durabilidade e à extensão de vida útil das estruturas de concreto armado. Com isso, modelos de previsão de vida útil, que possam descrever adequadamente o processo de degradação das estruturas de concreto armado ao longo do tempo, vêm sendo desenvolvidos (POSSAN, 2010).

Na literatura existem diversos trabalhos que tratam do desenvolvimento de formulações matemáticas para previsão da carbonatação (HAMADA, 1968; SMOLCZYK, 1968; HELENE, 1981; TUUTTI, 1982; VESIKARI, 1988; MORINAGA, 1990; PAPADAKIS, 1991; ANDRADE, 1992; HYVERT, 2009; POSSAN, 2010). Entretanto, muitos desses modelos são baseados em regressões lineares e não

lineares, onde determina-se a velocidade de difusão do CO₂ no concreto, com grande simplicidade, gerando acurácias insatisfatórias com as predições, enquanto outros apresentam relação não lineares complexas, com grande número de parâmetros de entrada, dificultando a aplicação pela dificuldade de obtenção de dados.

Diante disso, o mapeamento da carbonatação pode apresentar-se como uma tarefa complexa, já que envolve a modelagem de processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no concreto, assim como, a definição das relações entre a carbonatação e os parâmetros que a interferem, a exemplo da umidade relativa do ar, temperatura, concentração de dióxido de carbono, resistência do concreto, permeabilidade e composição dos materiais constituintes do concreto.

Segundo Martins (2011), a complexidade no desenvolvimento de modelos de regressão da profundidade de carbonatação e a falta de informações das correlações mútuas entre os diferentes parâmetros que se relacionam com o fenômeno, são motivos que justificam a busca por alternativas eficientes que facilitam o processo de modelagem.

Com o advento dos computadores, tornou-se possível aplicar técnicas numéricas avançadas para analisar grandes volumes de dados e desenvolver modelos de regressão mais precisos e complexos. Além disso, cita-se a capacidade de processar grandes conjuntos de dados, permitindo a análise de múltiplas variáveis simultaneamente. Isso é crucial para entender como fatores diversos interagem e influenciam o processo de carbonatação do concreto.

Dentre as técnicas atualmente disponíveis na literatura, os métodos associados à Inteligência Artificial (IA), são os que mais veem sendo empregados em tarefas de mapeamento e aprendizado de padrões. A inteligência artificial é a área da ciência da computação que busca o desenvolvimento de sistemas computacionais baseados no comportamento humano, ou seja, inspirados na capacidade de resolver problemas, bem como aprender com eles (AGGARWAL, 2018).

De modo geral, o aprendizado é a principal característica que liga as ferramentas computacionais advindas da IA com o comportamento humano, já que o homem é inteligente por aprender.

Hertzmann e Fleet (2012) definem o aprendizado de máquina como um conjunto de métodos que permitem ensinar aos computadores como executar tarefas por meio do fornecimento de exemplos. Assim, a inteligência artificial possibilita que máquinas aprendam por meio de experiências, se ajustem a novas situações e

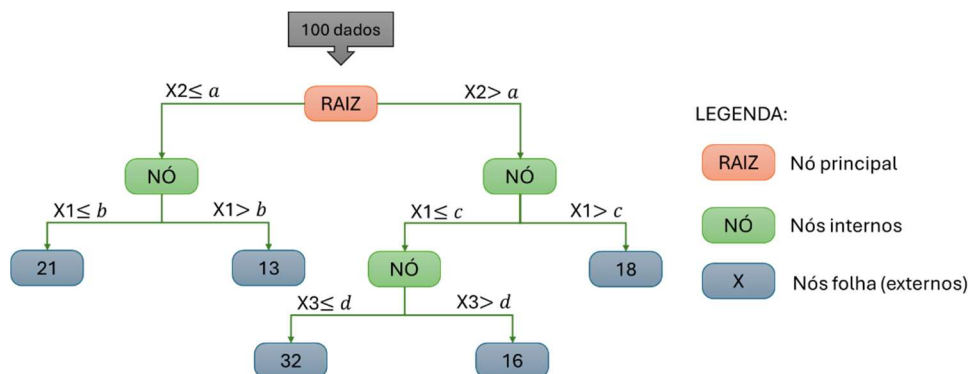
performem tarefas como os seres humanos.

Ao longo dos últimos anos, a evolução da Inteligência Artificial levou a criação de diversas técnicas e métodos de aprendizado de máquinas. Dentre essas ferramentas, se destacam as redes neurais artificiais (RNA) e as árvores de decisão (AD - quando usada em problemas de classificação) ou regressão (AR - quando usada em problemas de regressão) que possuem um baixo custo computacional e que entregam soluções simples e eficientes.

As árvores de regressão são um tipo de modelo de Aprendizado de Máquina usado para resolver problemas de regressão. As AR funcionam dividindo o espaço de entrada (os parâmetros de entrada) em regiões retangulares, e em cada uma dessas regiões, é ajustado um valor de saída.

Uma árvore de regressão (Ver Figura 5) começa com um nó raiz que representa todo o conjunto de dados e, em seguida, faz divisões recursivas com base nos atributos que melhor separam os dados em termos da variável de saída desejada. Essas divisões são feitas até que critérios de parada sejam atendidos, como um limite de profundidade da árvore ou número mínimo de amostras em um nó.

Figura 1 – Representação gráfica de uma árvore de regressão com três parâmetros de entrada.

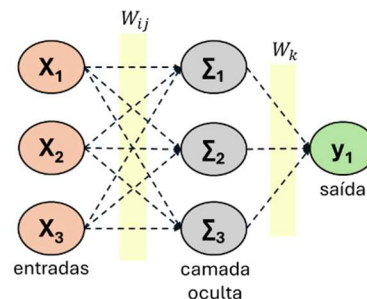


Fonte: Própria autoria.

As árvores de regressão são relativamente simples de compreender e interpretar. No entanto, elas podem ser propensas a *overfitting* (super ajuste dos dados) se não forem adequadamente controladas com técnicas como poda (redução do número de camadas) ou usando métodos ensemble, a exemplo das Florestas Aleatórias, onde diversas árvores, com menor complexidade, são combinadas por meio da média das previsões individuais. O uso das Florestas Aleatórias melhora a precisão dos modelos, reduz a chance de *overfitting* e maximiza a generalização das previsões.

Outra técnica que vem sendo amplamente utilizada, é a modelagem com Redes Neurais Artificiais (RNAs), que configura modelos computacionais inspirados no funcionamento do cérebro humano. As RNAs consistem em um conjunto de unidades interconectadas chamadas de neurônios artificiais ou nós, organizados em camadas. Uma RNA típica possui uma camada de entrada, uma ou mais camadas intermediárias, usualmente denominadas de camadas ocultas, e uma camada de saída, conforme ilustrado na Figura 2 – Representação de uma rede neural artificial com três parâmetros de entrada.

Figura 2 – Representação de uma rede neural artificial com três parâmetros de entrada.



Fonte: Própria autoria.

Cada neurônio em uma camada está conectado a neurônios na camada seguinte por meio de pesos, e esses pesos são ajustados durante o treinamento da rede para que a rede aprenda a mapear entradas para saídas desejadas. As RNAs são capazes de aprender a representar relações complexas entre os dados e são utilizadas em tarefas como reconhecimento de padrões, processamento de linguagem natural, visão computacional e previsões em geral, incluindo modelos de regressão.

As RNAs são comumente utilizadas na resolução de problemas complexos, onde o comportamento das variáveis não é rigorosamente conhecido. Uma de suas principais características é a capacidade de aprender por meio de exemplos e de generalizar a informação aprendida, gerando um modelo não-linear, tornando sua aplicação na análise espacial bastante eficiente (SPÖRL; CASTRO; LUCHIARI, 2011).

O desenvolvimento de modelos de previsão da profundidade de carbonatação utilizando técnicas de aprendizado é crescente. Diante de uma análise realizada no banco de dados do Science Direct, o número total de artigos relacionados à modelagem da carbonatação do concreto, publicados na última década é de 492. Dentre estes trabalhos, cerca de 27% fazem o uso de técnicas de Aprendizado de Máquina, apresentando-se como uma frente de trabalho atual e em exploração.

Mesmo com o crescente emprego das técnicas de aprendizado de máquina para mapear a profundidade de carbonatação do concreto, ainda não é possível empregar os modelos da literatura para avaliar a vida útil de projeto de estruturas reais, já que a maioria das modelagens foram desenvolvidas considerando apenas dados de carbonatação acelerada ou dados de carbonatação natural de estruturas de concreto com baixa idade (com no máximo 10 anos).

Taffese, Sistonen e Puttonen (2015) avaliaram a performance de RNAs, Árvores de Regressão e Florestas Aleatórias do tipo Bagged e Boosted, no mapeamento da profundidade de carbonatação do concreto, considerando dados mistos de carbonatação acelerada e natural. Os resultados encontrados apontaram as RNAs como a técnica que configura o melhor aprendizado e generalização, alcançando um coeficiente de determinação (R^2) de 0,94. As demais técnicas de aprendizado geraram modelos com R^2 de 0,90 (Árvore de regressão), 0,86 (Florestas Aleatórias do tipo Boosted) e 0,81 (Florestas Aleatórias do tipo Bagged). Mesmo com a boa performance gerada, os autores indicam que o modelo não pode ser empregado para análises de vida útil, já que os dados de carbonatação natural são de estruturas com no máximo 7 anos.

Felix, Possan e Carrazedo (2019) usaram Rede Neural Artificial para prever a profundidade de difusão de CO_2 no concreto. No estudo, foram implementadas e treinadas 120 redes neurais com diferentes topologias e algoritmos de treinamento. O modelo baseado em RNAs, com sete parâmetros de entrada (tipo de cimento, umidade relativa, exposição à chuva, teor de adições, teor de CO_2 no ambiente, resistência à compressão e tempo) e uma única camada oculta com seis neurônios, com algoritmo de treinamento Levenberg-Marquardt configurou a melhor performance, com R^2 de 0,92 e raiz do erro médio quadrático (REMQ) de 0,98 mm. Apesar do modelo gerado configurar boa performance de predição e utilizar dados de carbonatação com estruturas de até 60 anos, o modelo não permite avaliar qual o nível de confiabilidade nas predições, uma vez que os dados foram definidos por meio de um grupo focal desenvolvido em Possan (2010), em que os valores de carbonatação foram indicados por especialistas na área de durabilidade e patologia das construções.

Recentemente, Majlesi et al. (2023) desenvolveram um modelo baseado em Redes Neurais Artificiais, que considera dados de carbonatação natural. Os autores definiram um banco de dados com 110 dados de profundidade de carbonatação

natural de estruturas de até 9 anos de idade, situadas em dez diferentes países (Argentina, Bolívia, Colômbia, Chile, Costa Rica, Mexico, Portugal, Spain, Uruguai e Venezuela). O modelo mostrou-se eficiente na predição da profundidade de carbonatação, com coeficiente de determinação de 0,91 e raiz do erro médio quadrático igual a 3.43 mm. É importante pontuar, que as redes treinadas pelos autores, só alcançaram boas performances (R^2 superior a 0,85), quando mais de duas camadas ocultas foram empregadas para configurar as RNAs, o que já configura um modelo com alta complexidade que pode gerar grande instabilidade na fase de treinamento.

Luo, Niu e Dong (2014), Akpinar e Uwanuakwa (2016) e Felix, Carrazedo e Possan (2021), relatam que modelos eficientes para a predição da carbonatação do concreto podem ser obtidos por meio de RNAs, e que a depender do algoritmo de treinamento utilizado, o número necessário de iterações para a aprendizagem da rede pode ser otimizado, fazendo com que o tempo de modelagem seja baixo quando comparado às outras técnicas de aprendizado. Ademais, Felix, Carrazedo e Possan (2021) demonstram que na modelagem com RNA são necessárias no máximo duas camadas ocultas para obter níveis de acurácia superior à 85%, podendo assim, gerar modelos com boa generalização e de baixa complexidade.

Como alternativa, para contornar a necessidade de expandir o número de camadas ocultas para garantir bom aprendizado e generalização às RNAs, pesquisadores veem desenvolvendo modelos Ensemble de aprendizagem, onde dois ou mais modelos baseados em Aprendizado de Máquina são acoplados, configurando um modelo híbrido (CHEN ET AL., 2021; LI; SONG, 2022; CHEN ET AL., 2022; HUO, WANG E HUANG, 2023).

Os modelos ensemble com aprendizado de máquina são configurados ao combinar múltiplos modelos individuais para melhorar o desempenho preditivo ou a capacidade de generalização. O acoplamento de técnicas nesse contexto pode ser feito de diferentes formas:

- *Bagging*: Consiste em treinar vários modelos independentes com conjuntos de dados gerados por amostragem com reposição dos dados originais. Esses modelos são combinados através de média ou votação para reduzir a variância e evitar *overfitting*;
- *Boosting*: Os modelos são treinados sequencialmente, onde cada modelo subsequente foca nos erros do modelo anterior. O objetivo é

melhorar a precisão geral do ensemble;

- *Stacking*: Combina a saída de vários modelos de aprendizado de máquina em um meta-modelo que aprende a melhor forma de ponderar ou combinar as previsões individuais.

A principal vantagem no uso de técnicas ensemble é a melhoria da precisão preditiva e a redução de *overfitting*. Ao combinar múltiplos modelos, compensa-se as fraquezas individuais de cada um, resultando em previsões mais robustas e confiáveis (MINEU, 2011). Além disso, eles são capazes de lidar melhor com a complexidade dos dados e podem ser aplicados em uma variedade de problemas de aprendizado de máquina.

Frente ao exposto, este trabalho tem como propósito o desenvolvimento de um modelo ensemble de aprendizagem para a previsão da frente de carbonatação do concreto, incorporando dados de carbonatação natural de estruturas de concreto em idades avançadas e de fácil obtenção. A proposição de um modelo de carbonatação de concretos em condições naturais de exposição, que considera dados de estruturas em idades avançadas, é de substancial importância para entender e prever o comportamento a longo prazo das estruturas de concreto armado, além de subsidiar análises de vida útil e durabilidade com maior confiabilidade.

A definição de um banco de dados de carbonatação do concreto, em condições naturais de exposição e sob longos períodos de exposição, oferecerá uma visão mais completa e representativa do processo de carbonatação, considerando a evolução do fenômeno ao longo do tempo, o que é crucial para estimativas precisas a longo prazo.

O uso da técnica ensemble, especificamente a combinação via *Stacking*, a ser explorada neste trabalho para mapear a profundidade de carbonatação, configura ineditismo à pesquisa e permite superar limitações individuais dos modelos, uma vez que as RNAs captam relações complexas e não-lineares e, as Florestas Aleatórias lidam melhor com problemas de *overfitting* e podem reduzir a variância.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo geral

O objetivo deste trabalho configura-se na proposição de um modelo ensemble

de aprendizagem, do tipo *Stacking*, baseado no acoplamento de Redes Neurais Artificiais e Florestas Aleatórias, para a previsão da profundidade da carbonatação de concretos sujeitos a condições naturais de exposição ao CO₂.

1.2.2 Objetivos específicos

- Construir um banco de dados de carbonatação natural de estruturas de concreto em diferentes idades;
- Conduzir análises no banco de dados a fim de avaliar a influência dos atributos na carbonatação natural, e verificar se a influência destes parâmetros é variável no tempo;
- Implementar um código em linguagem Python e realizar o treinamento, validação e teste de Redes Neurais Artificiais e Florestas Aleatórias;
- Treinar, validar e testar modelos baseados em RNAs e Florestas Aleatórias para a predição da profundidade de carbonatação do concreto;
- Desenvolver uma aplicação gráfica Web, de fácil manipulação, para fomentar o uso do modelo proposto.

1.3 HIPÓTESE DO TRABALHO

Modelos ensemble de aprendizagem, que combinam diferentes técnicas de aprendizado de máquina, podem superar as limitações de modelos individuais, capturando relações complexas entre os atributos, reduzindo a variância, para gerar previsões acuradas e aplicáveis da profundidade de carbonatação do concreto.

1.4 METODOLOGIA E CRONOGRAMA DAS ATIVIDADES

A metodologia a utilizada no presente trabalho envolveu basicamente sete etapas: (i) Revisão bibliográfica e definição de um banco de dados de carbonatação natural do concreto; (ii) Análise estatística e tratamento dos dados; (iii) implementação, treinamento, validação e teste de Redes Neurais Artificiais; (iv) implementação, treinamento, validação e teste de Árvores de Regressão e Florestas Aleatórias; (v) proposição de modelos ensemble de aprendizagem e avaliação de performance; (vi) análise paramétrica e comparação do modelo proposto com modelos da literatura; (vii) desenvolvimento de aplicativo WEB do melhor modelo e produção de artigos para

disseminação dos resultados do trabalho.

A seguir, descreve-se a metodologia explorada e seguida no trabalho:

- I. **Revisão bibliográfica e definição do banco de dados:** esta etapa se estendeu por todo o período de desenvolvimento do trabalho, sendo a base de todas as outras fases da pesquisa. Foi durante a revisão bibliográfica que foram coletados dados de carbonatação em condições naturais de exposição ao CO_2 . A coleta de dados foi conduzida por meio da avaliação de trabalhos disponíveis nas bases de dados CAFE, Scielo, Scopus e Science Direct, considerando trabalhos de modelagem numérica, investigações experimentais e trabalhos de avaliação de durabilidade e manifestações patológicas de estruturas em serviço.
- II. **Análise estatística e tratamento dos dados:** nesta etapa foi implementado em linguagem Python, usando a IDE *Notebook*, com bibliotecas *Scikit-learn*, *Seaborn*, *Pandas*, *Numpy* e *Matplotlib*, um programa que possibilite a análise e o tratamento dos dados. Nesta etapa também foram avaliadas a existência de dados duplicados e dados com informações que poderiam dificultar o treinamento das técnicas de aprendizado, denominados de *outliers*.
- III. **Implementação, treinamento, validação e teste de Redes Neurais Artificiais:** foram desenvolvidos os códigos responsáveis pelo treinamento, validação e teste das Redes Neurais Artificiais. Neste trabalho foram empregadas RNAs do tipo *feedforward*, com no máximo duas camadas ocultas, função de ativação tangente hiperbólica. A busca dos pesos sinápticos, que configura o menor erro médio quadrático, seguiu o algoritmo ADAM, usualmente empregado para otimizar funções de objetivos estocásticos com gradientes de primeira ordem. O método empregado neste trabalho se baseia em estimativas adaptativas de momentos de ordens inferiores. O método é simples de implementar, eficiente computacionalmente, requer pouca memória, não é afetado por redimensionamento diagonal dos gradientes e é ideal para problemas com grandes conjuntos de dados ou parâmetros. Para a modelagem com as RNAs, os dados foram divididos inicialmente em conjuntos de treinamento (80%) e teste (20%), fazendo o uso da

amostragem estratificada, de forma a manter o padrão de distribuição do banco de dados. Utilizar-se-á a técnica de validação cruzada k-fold com $k=10$. O código foi implementado em linguagem *Python*, com a IDE *Notebook* e biblioteca *Scikit-learn*.

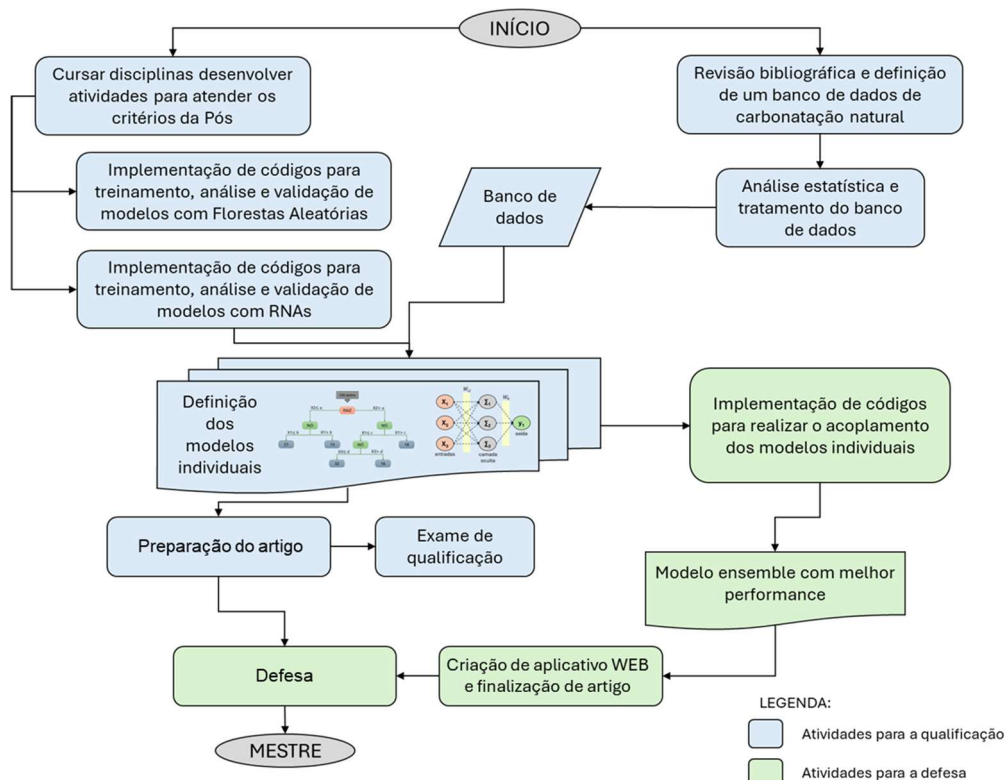
- IV. **Implementação, treinamento, validação e teste de Árvores de Regressão e Florestas Aleatórias:** o código responsável pelo treinamento, validação e teste das Árvores de Regressão e Florestas Aleatórias foi desenvolvido em linguagem *Python*, com a IDE *Notebook* e biblioteca *Scikit-learn*. Para o desenvolvimento do modelo com Árvores de Regressão, os dados foram divididos inicialmente em conjuntos de treinamento (80%) e teste (20%), fazendo o uso da amostragem estratificada, de forma a manter o padrão de distribuição do banco de dados. Árvores individuais foram construídas a partir de subconjuntos aleatórios dos dados de treinamento e dos atributos disponíveis. A definição da estrutura da árvore é feita pela minimização do erro médio quadrático associado à predição da profundidade de carbonatação. Posteriormente, para a formação das Florestas Aleatórias, diversas árvores foram criadas, entre duas e 100, com um subconjunto aleatório dos dados e atributos. As previsões de cada árvore são então agregadas, por meio da média simples de cada previsão, para formar a predição final do modelo com a floresta.
- V. **Proposição de modelos ensemble de aprendizagem e avaliação de performance:** após a avaliação de performance de todos os modelos individuais, baseados em RNAs e Florestas Aleatórias, foram exploradas estratégias para acoplar os dois melhores modelos individuais obtidos com cada técnica, utilizando a metodologia ensemble do tipo *Stacking*. Para o acoplamento, far-se-á a combinação dos melhores modelos individuais considerando modelo de RNAs com entradas definidas pelas predições individuais dos melhores modelos de RNAs e Florestas Aleatórias.
- VI. **Análise paramétrica e comparação do modelo proposto com modelos da literatura:** foram realizadas análises comparativas do modelo ensemble de melhor performance com os modelos analíticos da literatura. Além disso, far-se-á uma análise paramétrica com o

modelo ensemble, a fim de avaliar e confirmar a relação dos parâmetros de entrada com a profundidade de carbonatação.

VII. **desenvolvimento de aplicativo WEB do melhor modelo e produção de artigos para disseminação dos resultados do trabalho:** uma ferramenta computacional com interface gráfica, foi desenvolvida e está disponível no site do grupo de pesquisa DASMAE (www.dasmae.com), com o objetivo de fomentar os desenvolvimentos do grupo e facilitar o emprego do modelo para avaliações práticas de durabilidade, auxiliando engenheiros e projetistas na tomada de decisões acerca do desenvolvimento de projetos com maior vida útil, segurança e sustentabilidade. Para disseminar os resultados da pesquisa, foram desenvolvidos dois artigos de congresso e dois de periódicos. Ao mesmo tempo foram elaborados os textos relacionados à qualificação e à defesa.

Na Figura 3 – Fluxograma das atividades do mestrado. é apresentado um fluxograma contendo todas as atividades realizadas no mestrado e, na Figura 4 uma imagem ilustrativa da aplicação WEB proposta.

Figura 3 – Fluxograma das atividades do mestrado.



Fonte: Própria autoria.

Figura 4 – Representação da aplicação WEB - CARBENPRED.

CARBENPRED: A Machine Learning-Based Model to Predict Carbonation Depth

This software was created to promote the use of the proposed approach for forecasting the depth of carbonation in concrete exposed to natural environments, which was developed using machine learning techniques. We ask that while utilizing the model, you cite the following: A. A.; AUTHOR, A. A. Stack-Ensemble ANN model to predict the carbonation depth of concrete structures.



Caution: This version of the software is academic and may be used freely for teaching and evaluation of the results acquired from this tool; the institutions and authors indicated herein.

CaO and gypsum cement proportion (in %):

acceptable range of values: 65.0-97.5

Compressive strength at 28 days (in MPa):

acceptable range of values: 20.0-80.0

Exposure time (in years):

acceptable range of values: 0.5-50.0

Natural admixture-cement ratio (in %):

acceptable range of values: 0.0-45.0

Average temperature (in °C):

acceptable range of values: 6.0-30.0

Exposure condition:

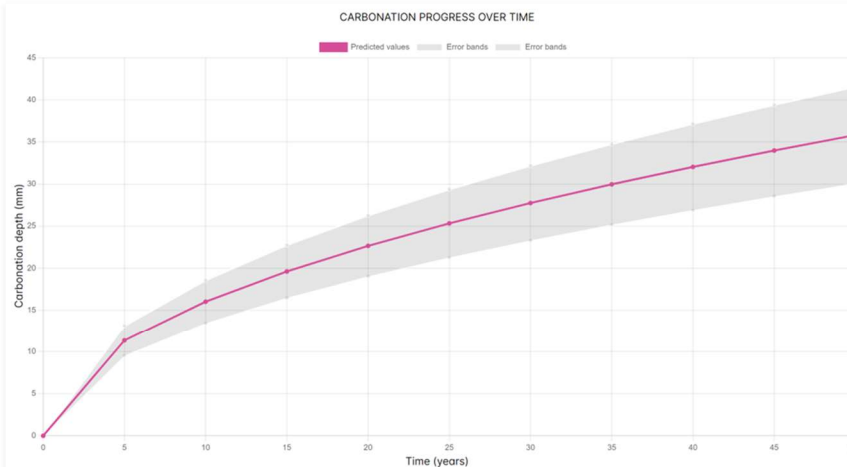
Outdoor, sheltered from rain

Water-binder ratio:

acceptable range of values: 0.27-0.65

Submit

The carbonation depth is: **16.019837212879576 mm**



Fonte: Própria autoria.

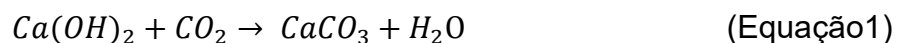
2 CARBONATAÇÃO DO CONCRETO

2.1 FENÔMENO DA CARBONATAÇÃO

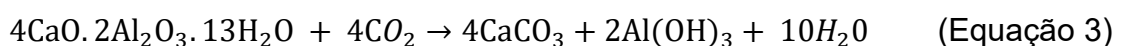
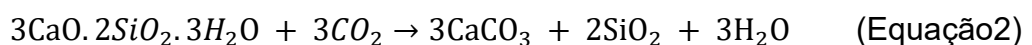
A carbonatação é um fenômeno importante no campo de estudo da construção civil. Com décadas de pesquisa, sabe-se que a carbonatação refere-se a um processo físico-químico gerado pela penetração de dióxido de carbono (CO_2) na estrutura porosa do concreto.

Segundo Possan (2010), a carbonatação é resultado da reação de gases ácidos (CO_2), presentes no ambiente, com produtos alcalinos do concreto, sendo esta alcalinidade gerada principalmente pela presença de hidróxido de cálcio (Ca(OH)_2), produto da hidratação do cimento. Esse fenômeno inicia na camada mais externa e avança na direção interna, formando uma camada carbonatada no elemento de concreto.

O processo tem início com a difusão do CO_2 na matriz cimentícia do concreto, prosseguido pela formação de ácido carbônico devido a presença de água e reação com o hidróxido de cálcio, conforme apresentado na Equação 1.



Na sequência ocorrem as reações com os silicatos e os aluminatos, conforme as equações 2 e 3.

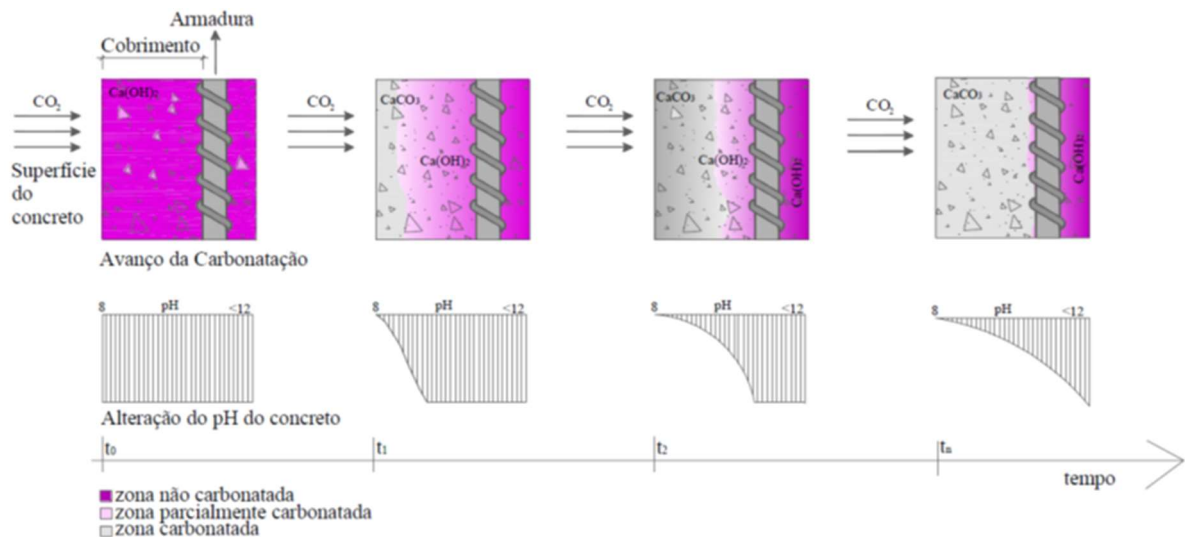


O resultado das reações de carbonatação podem ser classificados e vislumbrados de duas formas. Do ponto de vista associado à área de manifestações patológicas das estruturas de concreto armado, as reações do CO_2 com os produtos hidratados do concreto podem desencadear o processo de corrosão, devido à redução do pH da solução.

Segundo Mehta e Monteiro (2008), o pH do concreto após o processo de carbonatação pode chegar a valores inferiores a 8,5, enquanto em situações normais

este valor é igual ou superior a 12,5. Em estruturas de concreto armado essa redução de pH deixa as armaduras suscetíveis a corrosão (Ver Figura 5).

Figura 5 - Avanço da frente de carbonatação e alteração do pH do concreto no tempo.



Fonte: Possan (2010).

Já do ponto de vista associado à sustentabilidade, a carbonatação do concreto é um mecanismo que pode reduzir a pegada de carbono, já que a carbonatação permite ao concreto capturar CO₂ (YOUNSI; TURCRY; AÏT-MOKHTAR, 2022). De modo geral, em estruturas de concreto armado com aço, o concreto deve ter resistência à carbonatação necessária para garantir vida útil, já para todos os outros casos, estruturas armadas com materiais não metálicos, argamassas, e elementos não armados, a carbonatação pode servir como medida de mitigação das emissões de CO₂ associadas à produção dos materiais constituintes.

A profundidade da carbonatação no concreto aumenta gradativamente de acordo com o passar do tempo, quantidade de CO₂ disponível no ambiente, porosidade do concreto e com a taxa de hidróxido de cálcio livre para que ocorra a reação com o gás carbônico (VESIKARI, 1988; HAMADA, 1968).

Desta forma, vários parâmetros relacionam-se com o fenômeno da carbonatação, sejam eles provenientes do concreto ou do ambiente.

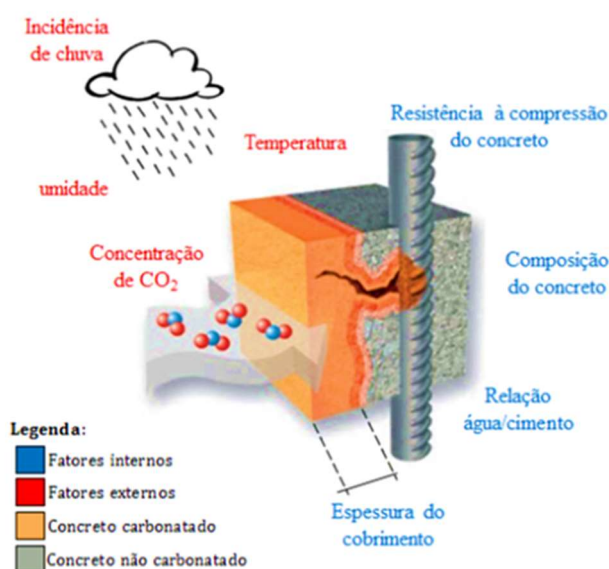
2.2 FATORES QUE INFLUENCIAM NA CARBONATAÇÃO

Existem diversos fatores que influenciam na ocorrência da carbonatação e na velocidade de propagação do CO₂ no concreto. Parrott (1987), Houst e Wittmann

(2002) dividem esses fatores de influência em dois grandes grupos, sendo o primeiro, os fatores internos ao concreto e, o segundo, os fatores externos, associados ao ambiente circundante, conforme representado na Figura 6.

Segundo Ferreira (2013), entre os principais fatores externos estão a umidade relativa do ambiente, incidência de chuvas, a concentração de CO_2 , entre outros. Quanto aos principais fatores internos, citam-se a composição do concreto com adições, resistência à compressão, relação água/aglomerante e as condições de execução do material.

Figura 6 - Fatores que influenciam a ocorrência da carbonatação.



Fonte: Felix (2018).

A seguir, são apresentados e discutidos os principais fatores que influenciam no processo de carbonatação.

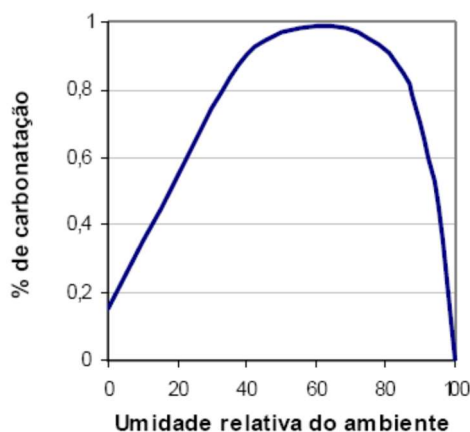
2.2.1 Umidade relativa do ar

A umidade relativa do ar é um fator relacionado às condições ambientais do meio aonde a estrutura de concreto está localizada. Este fator influencia diretamente na velocidade e na profundidade da carbonatação, visto que possibilita a difusão do CO_2 para o interior da matriz cimentícia.

Segundo Felix (2018), neste processo de difusão, a presença da água funciona como um meio de transporte para o CO_2 através da porosidade do concreto. Por isso a quantidade de água, associado à umidade do ar, é importante, visto que poros saturados ou poros secos não permitem o processo de difusão do dióxido de

carbono. De acordo com Verbeck (1958), o intervalo de maior favorecimento do processo de carbonatação situa-se entre 50% a 70% de umidade relativa do ar, conforme Figura 7.

Figura 7 - Relação do processo de carbonatação com a umidade relativa do ambiente.



Fonte: Verbeck (1958).

Felix, Carrazedo e Possan (2017) realizaram em seu estudo a modelagem da carbonatação do concreto em função da umidade do ambiente. Os resultados obtidos mostraram o nível máximo de carbonatação quando a umidade do ambiente é próxima aos 60%, reforçando o intervalo exibido por Verbeck (1958).

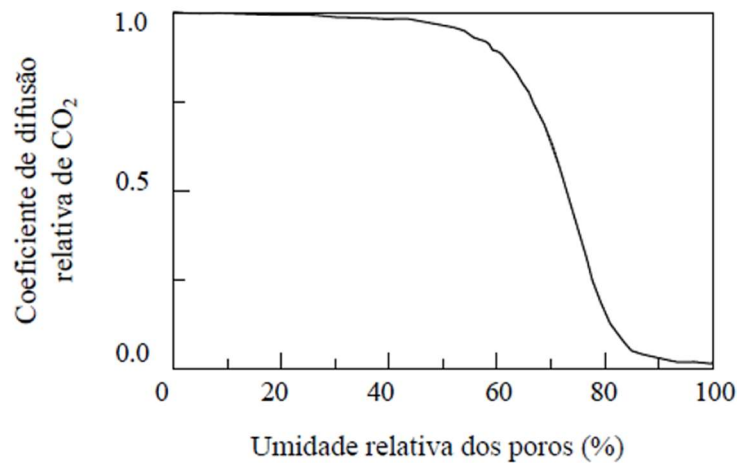
2.2.2 Incidência e exposição a chuvas

A exposição do elemento a chuvas é diretamente relacionada à umidade do material. O elemento de concreto pode encontrar-se em um ambiente interno, com pouca ou nenhuma exposição a chuvas, em um ambiente externo protegido da chuva, com média exposição ou, em um ambiente externo desprotegido da chuva, com alta exposição a chuvas.

Segundo Steffens, Dinkler e Ahrens (2002), diante da exposição da estrutura aos períodos de precipitação, os elementos expostos apresentam uma menor frente de carbonatação, visto que a presença das chuvas torna os poros saturados de água, permanecendo assim, durante boa parte do ano, impossibilitados de carbonatar. Em contrapartida, os elementos protegidos das chuvas apresentam uma frente de carbonatação mais acelerada, visto que não possuem poros saturados e permitem a penetração do CO_2 no concreto na maior parte de sua vida útil. Essa relação da umidade relativa dos poros com a facilidade de difusão do CO_2 no concreto, pode ser

observada na Figura 8.

Figura 8 - Influência da umidade dos poros no coeficiente de difusão do CO₂.



Fonte: Traduzido de Steffens, Dinkler e Ahrens (2002).

2.2.3 Concentração de CO₂ no ambiente

Por tratar-se de um fenômeno natural, a carbonatação do concreto acontece lentamente e, demora um grande período para avançar milímetros em um elemento de concreto, sendo isso justificado pela baixa concentração de CO₂ na atmosfera (PAPADAKIS; VAYENAS; FARDIS, 1991; HELENE, 1993).

Deste modo, o ambiente onde o elemento está localizado deve ser considerado nas análises de carbonatação, pois se relaciona diretamente com a quantidade de CO₂ disponível para reagir com os componentes da matriz cimentícia. Ambientes urbanos com grande tráfego de veículos, ambientes fechados ou ambientes industriais que possuam queima de combustíveis fósseis com regularidade, são exemplos de ambientes que tendem a ter uma maior concentração de CO₂, apresentando maiores velocidades de difusão do gás (MARTINS, 2011).

Na Tabela 1 constam as concentrações médias de CO₂ às quais as estruturas estão expostas de acordo com o ambiente que estão inseridas.

Tabela 1 - Indicação das concentrações de CO₂ de acordo com o ambiente.

Ambiente	Concentração de CO ₂ (% em volume)	
	(NEVILLE 1997)	(SAETTA; VITTALINA 2004)
Ambiente rural	0,03	0,015
Cidade	0,3 a 1	0,036
Ambiente de laboratório não ventilado	> 0,1	-
Ambiente industrial	-	0,045

Fonte: Autor (2023).

2.2.4 Composição do concreto

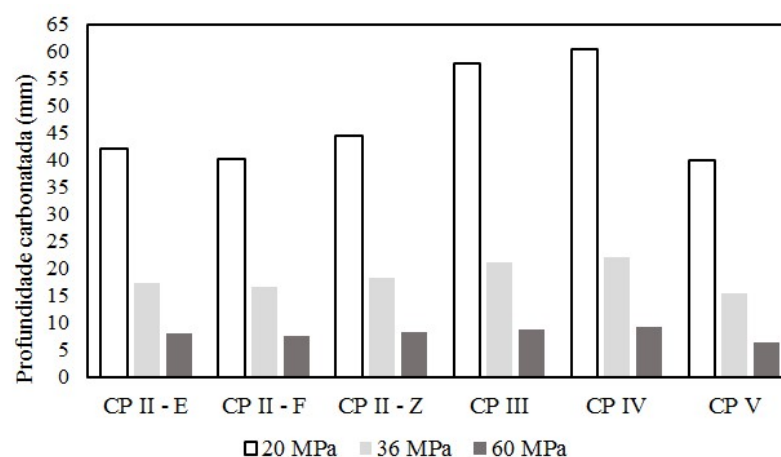
As adições são utilizadas com o intuito de somar-se ao cimento, para compor o material fino reativo, ou em algumas situações substituir o cimento de forma parcial. A utilização de adições minerais na indústria do concreto é impulsionada por razões tecnológicas, econômicas e ambientais (FONSECA, 2010).

Segundo Isaia (1999), a utilização de adições pozolânicas no concreto reduz a dimensão dos poros e, por sua vez, diminuem a permeabilidade do concreto. Entretanto, essas adições consomem o hidróxido de cálcio $\text{Ca}(\text{OH})_2$, reduzindo o pH da solução, gerando uma situação de aceleração da difusão do gás dentro do concreto. Por consequência as frentes de carbonatação podem se tornar mais velozes em concretos que possuem adições.

Diante disso, entende-se que a utilização de cimentos nacionais, compostos, com diferentes adições, podem gerar um material com menor resistência à carbonatação, ao comparar-se com cimento Portland puro. Porém, essa situação é balanceada pela redução da permeabilidade gerada pela adição, pela menor adição de água necessária e pelo refinamento da estrutura dos poros (FERREIRA; JALALI, 2006).

Um estudo realizado por Felix, Carrazedo e Possan (2017), comprovou a influência negativa das adições no avanço da carbonatação. Através da modelagem da carbonatação de concretos com diferentes tipos de cimento Portland, os autores constataram que em cimentos CP III (com escória) e CP IV (com pozolana), as profundidades de carbonatação são as maiores, e o uso do cimento CP V configura as menores profundidade de carbonatação, conforme mostra Figura 9.

Figura 9 - Profundidade de carbonatação e diferentes tipos de cimento Portland.

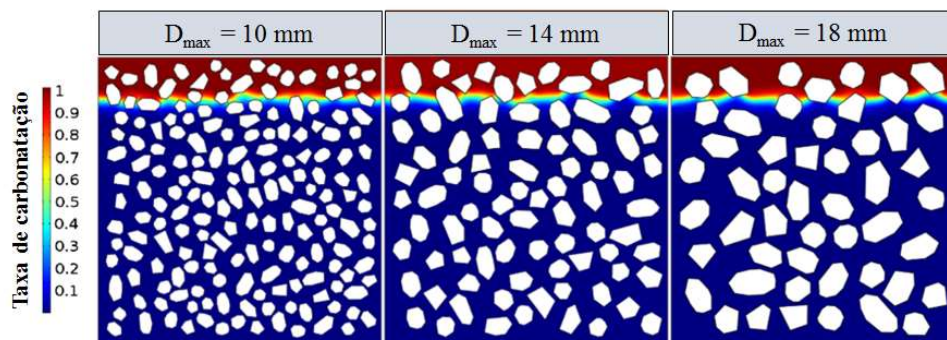


Fonte: Adaptado de Felix, Carrazedo e Possan (2017).

Em relação à proporção de agregados graúdo, dois efeitos opostos são observados na carbonatação do concreto: (i) aumento da velocidade de carbonatação, uma vez que à medida que é aumentada a fração de agregados graúdos, ocorre a redução da proporção de cimento e, desta forma, há uma redução no teor de $\text{Ca}(\text{OH})_2$, componente necessário para que ocorra a reação de carbonatação; (ii) diminuição da carbonatação, o transporte de CO_2 torna-se mais difícil e a difusividade diminui, isso ocorre porque o agregado graúdo é muito mais denso do que a pasta de cimento endurecida (MI; PAN; SHEN, 2019).

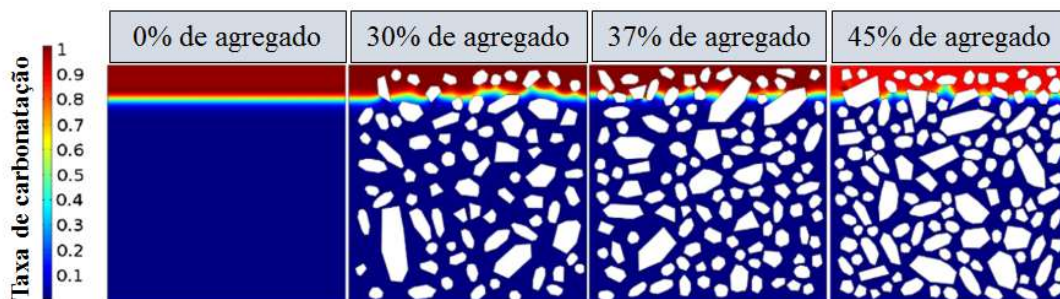
Enquanto isso, tratando-se das características dos agregados graúdo, Han et al. (2016) avaliaram o efeito das características dos agregados graúdos na difusão do CO_2 no concreto, por meio da modelagem com elementos finitos. Os autores inferiram a não existência de uma relação entre a frente de carbonatação e a dimensão máxima dos agregados (Ver Figura 10), em contrapartida, quanto maior é a proporção de agregados na mistura, menores são os índices de carbonatação do concreto (Ver Figura 11), observação posteriormente comprovada por experimentos em Mi, Pan e Shen (2019).

Figura 10 - Influência da dimensão máxima dos agregados na carbonatação.



Fonte: Traduzido de Han et al. (2016).

Figura 11 - Influência da proporção dos agregados na carbonatação.



Fonte: Traduzido de Han et al. (2016).

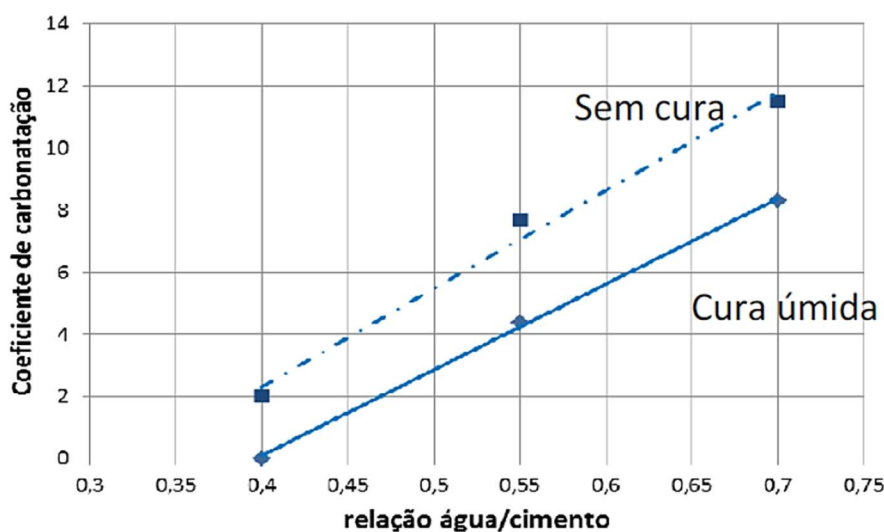
2.2.5 Condições de execução e cura do concreto

As condições de execução durante a concretagem podem influenciar na permeabilidade do concreto e por consequência no processo de carbonatação. Ressalta-se a importância da dosagem, lançamento, transporte, adensamento e cura do concreto.

Segundo Ferreira (2013), a maneira como a cura úmida é executada influencia decisivamente no desempenho do concreto ao longo da sua vida útil, principalmente em relação ao fenômeno da carbonatação. Se o concreto for submetido a cura inicial prolongada, a taxa de carbonatação será bastante reduzida, visto que possibilitará uma melhor hidratação do cimento, diminuição dos poros e aumento da compacidade.

A Figura 12 representa a relação da influência no coeficiente de carbonatação do concreto com cura úmida realizada de forma efetiva.

Figura 12 – Influência da cura na carbonatação do concreto em carbonatação acelerada, em concretos com CP II F – 32.



Fonte: Cascudo e Carasek (2011).

Uma deficiência na cura do concreto pode facilitar o acesso de agentes agressivos no interior do elemento, uma vez que promove o aparecimento de uma rede de capilaridade na superfície. Portanto, a cura correta objetiva evitar o processo de retração devido à evaporação precoce de água, proporcionando um maior nível de hidratação do cimento, maior resistência e diminuindo a permeabilidade o material (MEHTA; MONTEIRO, 2008; AİTCIN, 2000).

Segundo Pauletti (2009), o processo de cura do concreto tem papel decisivo na reação de carbonatação, visto que pode influenciar a microestrutura do concreto,

que por sua vez afeta a difusão do CO_2 através dos poros da matriz cimentícia. Portanto, a profundidade carbonatada depende diretamente do processo de cura empregado nele, pois incide nas propriedades de hidratação do cimento.

2.2.6 Porosidade, relação água/cimento e resistência à compressão do concreto

Um dos grandes fatores influenciadores no processo de carbonatação é a permeabilidade do concreto e a estrutura dos poros. Esses fatores estão relacionados com a relação água-cimento empregada na mistura e com a resistência à compressão do material.

A relação água-cimento tem influência direta na frente de carbonatação do concreto, visto que está correlacionada à porosidade total da pasta (MEHTA; MONTEIRO, 2008). Com a redução da relação água-cimento ou com o aumento da resistência à compressão, o volume dos poros diminui e por consequência a estrutura dos poros torna-se mais fina (RABEHI; MEZGHICHE; GUETTALA, 2013). Ademais, a qualidade da pasta está diretamente relacionada à relação água-cimento, parâmetro que controla a carbonatação juntamente com a concentração de $\text{Ca}(\text{OH})_2$ presente na solução (HELENE, 1993).

A resistência à compressão e a relação água-cimento exercem um nível de influência similar no mapeamento do processo de carbonatação. Isso ocorre por quê concretos mais (ou menos) resistentes são produzidos com menores (ou maiores) relações água-cimento e resultam em menores (ou maiores) taxas de carbonatação (FELIX, 2018).

2.3 PREDIÇÃO DA PROFUNDIDADE DE CARBONTAÇÃO

Ao longo das últimas décadas, inúmeros investigadores têm se dedicado ao desenvolvimento de modelos de previsão da profundidade de carbonatação do concreto. De acordo com Possan (2010), as formulações encontradas na literatura são provenientes do esforço da comunidade técnico-científica em entender e modelar os fatores que influenciam na durabilidade das estruturas de concreto.

Existem diversos dados experimentais disponíveis, entretanto, a tarefa mais difícil quando se tratará de modelos de previsão é a generalização dos fatores que afetam os parâmetros do fenômeno, isso é justificado pela grande variação entre as condições dos experimentos e as diferentes misturas que compõem os concretos

testados em laboratório, além disso, até hoje não foi possível encontrar uma correlação entre as velocidades de carbonatação obtidas em ambiente acelerado e natural (TONGARIA; MANDAL; MOHAN, 2018).

É interessante notar que os estudos sobre a carbonatação se dividem em duas vertentes: os modelos baseados em formulações matemáticas e os modelos numéricos.

De acordo com Possan (2010), as formulações matemáticas são desenvolvidas com base em princípios matemáticos e físicos que descrevem o fenômeno da carbonatação. Elas se concentram em identificar e considerar os parâmetros que têm maior influência no processo de carbonatação. Isso geralmente envolve a formulação de equações ou modelos algébricos que relacionam as variáveis de entrada (a exemplo da concentração de dióxido de carbono, umidade, temperatura e idade do concreto) com a taxa de carbonatação.

Os modelos numéricos são mais complexos e buscam abranger um número maior de variáveis de entrada, levando em consideração a interação complexa entre essas variáveis. Eles são construídos com base em algoritmos de aprendizado de máquina que podem aprender padrões a partir de dados históricos ou experimentais. Esses modelos conseguem capturar nuances e relações não-lineares, que acontecem no processo de carbonatação e que são difíceis de representar com os modelos matemáticos tradicionais.

2.3.1 Formulações analíticas

A maior parte dos modelos analíticos desenvolvidos para predição da profundidade carbonatada tiveram como base o modelo desenvolvido por Tuutti (1982), o qual é apresentado na sequência. O modelo de Tuutti é amplamente empregado no estudo da carbonatação em laboratório, pois permite determinar a velocidade de difusão do CO_2 para o material em análise.

2.3.1.1 Modelo de TUUTTI

A formulação de Tuutti (1982), define a penetração do dióxido de carbono no concreto, e baseia-se no processo de difusão de um gás em um meio poroso, conforme apresenta a Equação 4.

$$y = k\sqrt{t} \quad (\text{Equação 4})$$

Onde:

k = coeficiente de carbonatação (mm/ano^{0,5});

t = tempo (anos).

É importante observar que essa equação é uma simplificação e pode não capturar todas as nuances do processo de carbonatação para as mais distintas situações, devido à dificuldade de determinação do coeficiente de carbonatação “k”. Esse complicador fez com que a comunidade científica procurasse determinar formas alternativas de correlacionar o coeficiente de carbonatação com parâmetros internos ao material, possibilitando proposição de modelos mais simples de usar.

2.3.1.2 Modelo de SMOLCZYK

Smolczyk (1976) definiu a profundidade de carbonatação que uma estrutura de concreto está submetida ao longo do tempo por meio da Equação 5.

$$y = a \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{f_c}} - \frac{1}{\sqrt{f_{clim}}} \right) \cdot \sqrt{t} \quad (\text{Equação 5})$$

Onde:

y = profundidade carbonatada (cm);

a = velocidade de carbonatação;

f_c = resistência à compressão do concreto (kgf/cm²);

f_{clim} = valor limite da resistência à compressão do concreto que pode ser carbonatada (kg/cm²);

t = tempo de exposição (semanas).

Neste modelo, diferente do apresentado na Equação 4, considera-se a resistência à compressão do concreto como fator de interferência na profundidade de carbonatação. Entretanto, assim como existe a dificuldade na determinação do coeficiente de carbonatação “k”, a Equação 5 impossibilita a sua utilização de forma prática, devido à necessidade de determinação, à priori, da velocidade de carbonatação, variável “a”.

2.3.1.3 Modelo de VESIKARI

O modelo de Vesikari (1988) busca contornar as dificuldades associadas ao emprego do modelo de Tuutti (1982) propondo um cálculo para o coeficiente de carbonatação “k”, baseando-se na relação água-cimento da mistura, conforme Equação 6.

$$k = 26. (ac - 0,3)^2 + 1,6 \quad (\text{Equação 6})$$

Onde:

k = coeficiente de carbonatação (mm/ano^{0,5});

ac = relação água-cimento, limites: 0,45 < ac < 0,75.

Com o coeficiente de carbonatação definido a profundidade de carbonatação via Equação 4. Segundo Vesikari (1988) as condições do ambiente podem interferir no modelo apresentado, desta forma, em ambientes externos desprotegidos o coeficiente “k” calculado deve ser multiplicado por 4.

2.3.1.4 Modelo de PAPADAKIS, VAYENAS E FARDIS

O modelo desenvolvido por Papadakis, Vayenas e Fardis (1991) proporcionou maior acurácia, na época, à predição da carbonatação, comparado à performance que previamente descritos. O modelo (Equação 7), foi baseado na avaliação da microestrutura do concreto, e sua correlação com a facilidade de difusão do CO₂.

$$e_c = \sqrt{\frac{2D_{CO_2}[CO_2]^0}{[Ca(OH)_2]^0 + 3[CSH]^0 + 3[C_3S]^0 + 2[C_2S]^0}} t \quad (\text{Equação 7})$$

Onde:

e_c = profundidade de carbonatação (m);

CO_2 = concentração molar do CO₂ (mol/m³);

D_{CO_2} = coeficiente de difusão efetivo do CO₂ no material carbonatado (m²/s);

t = tempo (s);

$Ca(OH)_2$ e CSH = concentração molar dos hidratos (mol/m³);

C_3S e C_2S = concentração molar dos anidros (mol/m³);

O índice 0 indica as concentrações iniciais.

Com o modelo de Papadakis, Vayenas e Fardis (1991), foi possível pela

primeira vez gerar uma base teórica para o cálculo do coeficiente de carbonatação “k” do modelo de Tuutti (1982).

2.3.1.5 Modelo de BOB E AFFANA

O modelo desenvolvido por Bob e Afana (1993), apresentado na Equação 8, foi definido considerando resultados de um longa campanha experimental, onde foi possível observar os fatores que mais influenciavam na difusão do gás carbônico. Os autores definem a Equação 8, por meio da correlação entre a profundidade de carbonatação com a concentração de CO₂, a umidade relativa do ambiente, resistência à compressão do concreto e a composição do cimento, representada por alguns tipos.

$$y = 150. \left(\frac{c \cdot k \cdot d}{f_c} \right) \cdot \sqrt{t} \quad (\text{Equação 8})$$

Onde:

c = coeficiente do tipo de cimento (Tabela 2);

k = coeficiente dependente da umidade relativa do ar (Tabela 2);

f_c = resistência à compressão do concreto (MPa);

d = coeficiente referente à quantidade de CO₂ (Tabela 2).

Tabela 2 - Coeficientes do modelo.

a) Coeficiente dependente da umidade do ar.		b) Coeficiente da concentração de CO ₂ .	
Umidade Relativa	k	Quantidade de CO ₂	d
UR ≤ 60	1,0	CO ₂ ≤ 0,03%	1,0
70 ≤ UR ≤ 75	0,7	0,03% < CO ₂ ≤ 0,1%	2,0
80 ≤ UR ≤ 85	0,5		
UR ≤ 90	0,3		

c) Coeficiente associado ao tipo de cimento.	
Tipo de cimento	c
Cimento Portland (CP40 e CP45)	0,8
Cimento Portland (CP50 e CP55)	1,0
Cimento Portland + 15% de adições	1,2
Cimento Portland + 30% de adições	1,4
Cimento Portland + 50% de adições	2,0

Fonte: Bob e Afana (1993).

2.3.1.6 Modelo de EHE

O modelo determinado pela norma EHE (2008) estabeleceu através da Equação 9 uma nova forma de determinar a carbonatação no concreto, levando em consideração fatores ainda não explorados na literatura, e não considerados em outros modelos, como a presença de ar nos poros da matriz cimentícia.

$$y = C_{amb} \cdot C_{ar} \cdot a \cdot f_{cm}^b \cdot \sqrt{t} \quad (\text{Equação 9})$$

Onde:

y = profundidade de carbonatação (m);

f_{cm} = resistência média a compressão (Mpa);

C_{amb} = coeficiente do ambiente (Tabela 3);

C_{ar} = coeficiente do ar incorporado (Tabela 3);

a , b = parâmetros em função do tipo de aglomerante (Tabela 3).

A base deste modelo é a equação de Tuutti (1982), sendo o coeficiente de carbonatação “ k ” representado pelo produto entre os quatro primeiros termos da Equação 9.

Tabela 3 - Coeficientes do modelo.

a) Coeficiente do ar incorporado.		b) Coeficiente do ambiente.	
Ar incorporado	C_{ar}	Ambiente	C_{amb}
< 4,5%	1,0	Protegido de chuva	1,0
≥ 4,5%	0,7	Desprotegido de chuva	0,7

c) Coeficientes dependentes dos tipos de cimento.		
Tipo de cimento	a	b
Cimento Portland	1800,00	-1,70
Cimento Portland + 28% de CV	360,00	-1,20
Cimento Portland + 9% de AS	400,00	-1,20
Cimento Portland + 65% de Escória	360,00	-1,20

Fonte: EHE (2008).

2.3.1.7 Modelo de POSSAN

Em seu estudo, Possan (2010) desenvolveu uma formulação, apresentada na Equação 10, que considera diversos fatores que interferem no processo de carbonatação do concreto. Em relação aos modelos apresentados anteriormente,

observa-se vários parâmetros adicionais em função do tipo de cimento escolhido, ambiente e condição de exposição do elemento. O modelo considera a influência da exposição a chuvas, condição explorada apenas no modelo de Vesikari (1988), apresentado na Equação 6.

$$y = k_c \cdot \left(\frac{20}{f_c}\right)^{k_{fc}} \cdot \left(\frac{t}{20}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp \left[\left(k_{ad} \cdot ad^{\frac{3}{2}} \right) + \left(k_{CO_2} \cdot CO_2^{\frac{1}{2}} \right) - \left(\frac{k_{UR} \cdot (UR - 0,58)^2}{100 + f_c} \right) \right] \cdot k_{ce} \quad (\text{Equação 10})$$

Onde:

y = profundidade de carbonatação (mm);

f_c = resistência média à compressão (MPa);

k_c = fator dependente do tipo de cimento (Tabela 4 “a”);

k_{fc} = fator de resistência à compressão do concreto, em função do cimento (Tabela 4 “a”);

t = tempo (anos);

ad = teor de adição pozolânica no concreto (% em relação à massa do concreto);

k_{ad} = fator dependente das adições, em função do cimento (Tabela 4 “a”);

UR = umidade relativa do ar (%*0,01);

k_{UR} = fator dependente da umidade relativa do ar, em função do cimento (Tabela 4 “a”);

CO_2 = teor de dióxido de carbono no ambiente (%);

k_{CO_2} = fator dependente do teor de dióxido de carbono, em função do cimento (Tabela 4 “a”);

k_{ce} = fator dependente do ambiente de exposição (protegido ou desprotegido), em função das condições de exposição do concreto (Tabela 4 “b”).

Tabela 4 - Coeficientes do modelo em função (a) das características do concreto e das condições ambientais (b) das condições de exposição (POSSAN, 2010)

Tipo de cimento	a)					b)	
	Características do concreto			Condições ambientais		Condições de exposição da estrutura	
	Cimento	f_c	Adição	CO_2	UR	Proteção a chuva	k_{ce}
	k_c	k_{fc}	k_{ad}	k_{CO_2}	k_{UR}		
CP I	19,80	1,70	0,24	18,00	1300	Ambiente interno Protegido da chuva	1,30
CP II E	22,48	1,50	0,32	15,50	1300	Ambiente externo Protegido da chuva	1,00
CP II F	21,68	1,50	0,24	18,00	1100	Ambiente externo Desprotegido da chuva	0,65
CP II Z	23,66	1,50	0,32	15,50	1300		
CP III	30,50	1,70	0,32	15,50	1300		
CP IV	33,27	1,70	0,32	15,50	1000		
CP V ARI	19,80	1,70	0,24	18,00	1300		

2.3.1.7 Modelo de LIU, YU e CHEN

Liu, Yu e Chen (2020) desenvolveram um modelo de previsão baseado em medições realizadas nos experimentos de carbonatação acelerada executados por eles. Nesse experimento, amostras de concreto em formato cúbico foram confeccionados, curados em condições normais e depois submetidos a uma estufa que simula concentrações de CO₂. Baseado nos dados medidos, o modelo abaixo descrito foi desenvolvido considerando os fatores que influenciam no processo de carbonatação de estruturas de concreto.

$$d_c = K_x \cdot \left(\frac{W}{C} - 0.106 \right) \cdot (C_e^2 - 508.351 \cdot C_e - 1195.624) \cdot (F + 112.460) \cdot (T - 277.662) \cdot (C_d^{0.538}) \cdot (RH^2 - 125.410RH + 2351.806) \cdot \sqrt{t} \quad (\text{Equação 11})$$

Onde:

d_c = profundidade de carbonatação (mm);

C_e = teor de cimento (kg/m³);

F = teor de aditivo (kg/m³);

T = temperatura de carbonatação (Kelvin);

C_d = concentração de CO₂ (%);

RH = umidade relativa (%).

2.3.1.7 Modelo de EKOLU

Em seu estudo, Ekelu (2018) propôs um modelo, apresentado na Equação 12, baseando-se em funções matemáticas que fossem capazes de considerar a influência da composição do concreto e das condições ambientes na carbonatação natural do concreto.

$$d_{(f,t)} = e_h \cdot e_s \cdot e_{co} \cdot cem(F_{c(t)})^g \cdot \sqrt{t} \quad (\text{Equação 12})$$

Onde:

$d_{(f,t)}$ = profundidade de carbonatação (mm);

e_h = coeficiente de umidade relativa (Equação 12);

e_s = coeficiente de condição de exposição a chuva (Equação 13);

e_{co} = coeficiente da concentração de CO₂ (Equação 14);

cem = fator escalar do cimento (Tabela 6);

g = fator de condutância do cimento (Tabela 6);

$F_{c(t)}$ = função de crescimento da resistência do concreto (Equação 15);

t = tempo (anos).

Para o desenvolvimento e calibração do modelo, foram utilizados dados de um estudo de 10 anos de carbonatação natural. Porém, para a construção do modelo, foram considerados somente dados coletados de estruturas situadas em ambientes externos, protegidas ou desprotegidas da chuva. Eklou (2018), define os coeficientes do ambiente e_h , e_s e e_{co} , conforme segue:

$$e_h = 16 \left(\frac{RH-35}{100} \right) \left(1 - \frac{RH}{100} \right)^{1.5} \text{ para } 50\% \leq RH \leq 80\% \quad (\text{Equação 13})$$

Onde:

RH = umidade relativa (%).

$$e_s = \begin{cases} 1.0 & \text{para ambientes externos protegidos} \\ f_c^{-0.2} & \text{para ambientes externos desprotegidos} \end{cases} \quad (\text{Equação 14})$$

Onde:

f_c = é a resistência a compressão em 28 dias do concreto.

$$e_{co} = \begin{cases} \alpha f_c^r & \text{para } 20 < f_c < 60 \text{ MPa} \\ 1.0 & \text{para } f_c \geq 60 \text{ MPa} \end{cases} \quad (\text{Equação 15})$$

Onde:

α = fator de correção para carbonatação natural sob variadas concentrações de CO_2 ;

r = fator de correção para carbonatação natural sob variadas concentrações de CO_2 .

Tabela 5 - Fatores de correção da carbonatação natural.

Resistência aos 28 dias (MPa)	Fator de correção	Concentração de CO ₂					
		200 ppm	300 ppm	500 ppm	1000 ppm	2000 ppm	
20 < f _c < 60	e _c = α f _c ^r	α	1.4	1.0	2.5	4.5	14
		r	-1/4	0	-1/4	-2/5	-2/3
f _c ≥ 60	e _c = 1.0						

Fonte: Eklou (2018).

A função $F_{c(t)}$ relacionada ao aumento da resistência à compressão com o passar do tempo é definida pela Equação 16, sendo as constantes a e b, definidas em: (i) Equação 17, em análises com $t < 6$ anos, considerando resistência à

compressão aos 28 dias; (ii) Equação 18, em análises com $t \geq 6$ anos, considerando resistência à compressão aos 28 dias; (iii) Equação 19, em análises com $t < 15$ anos, considerando resistência à compressão na data de ensaio; (iv) Equação 20, em análises com $t \geq 15$ anos, considerando resistência à compressão na data de ensaio.

$$F_{c(t)} = \frac{t}{a+bt} \cdot f_c, \text{ onde } f_c = f_{c28} \text{ ou } f_{cbn} \quad (\text{Equação 16})$$

$$a = 0.35, \quad b = 0.6 - t^{0.5}/50 \quad (\text{Equação 17})$$

$$a = 0.15t, \quad b = 0.5 - t^{0.5}/50 \quad (\text{Equação 18})$$

$$a = 0.35, \quad b = 1.15 - t^{0.6}/50 \quad (\text{Equação 19})$$

$$a = 0.15t, \quad b = 0.95 - t^{0.6}/50 \quad (\text{Equação 20})$$

Tabela 6 - Fatores do cimento para condutância da carbonatação.

Materiais cimentícios suplementares	Tipos de cimento	<i>cem</i>	Fator de condutância, g
20% qualquer	CEM I, CEM II/A	1000	-1,5
30% cinza volante	CEM II/B, CEM IV/A	1000	-1,4
50% escória	CEM III/A	1000	-1,4

Fonte: (EKOLU, 2018).

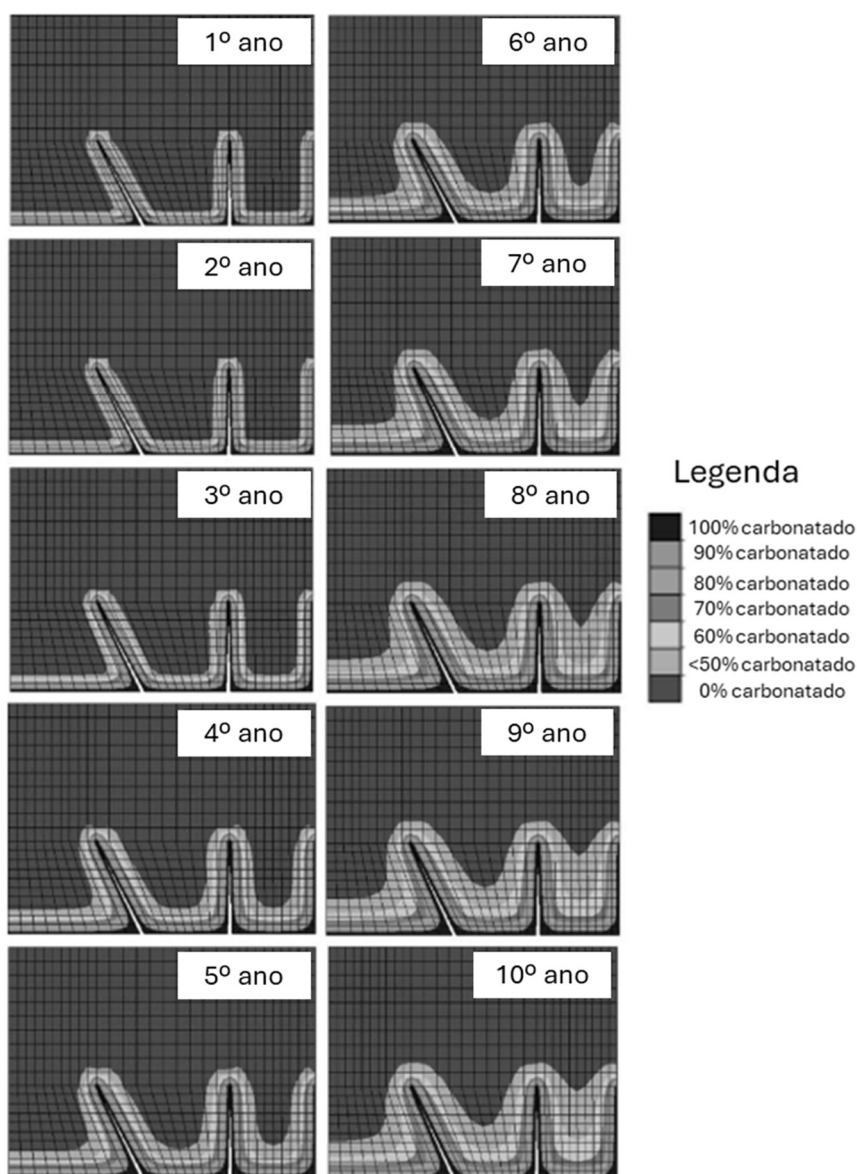
2.3.2 Modelos numérico

Nos últimos anos, tem sido notável uma mudança no cenário da produção acadêmica no âmbito da previsão da carbonatação do concreto. Observa-se uma diminuição na produção de novas formulações analíticas, em contrapartida, um aumento significativo na adoção de técnicas numéricas. Essa transição da abordagem tradicional, baseada em fórmulas matemáticas, para abordagens mais computacionalmente intensivas, é uma tendência marcante na pesquisa contemporânea.

Os modelos numéricos desenvolvidos dividem-se basicamente em dois grupos, os modelos formados pela representação de fluxo de um gás, empregando as técnicas de simulação com elementos finitos ou elementos de contorno, e o uso de aprendizado de máquina para mapear a profundidade de carbonatação ou velocidade de difusão do gás, a exemplo das redes neurais artificiais, árvores de decisão, máquinas vetores de suporte, entre outros.

Uma abordagem física não-linear, usando elementos finitos foi adotada por Isgor e Razaqpur (2004) para rastrear o avanço espacial e temporal da frente de carbonatação em estruturas de concreto, com e sem fissuras. Um programa de computador tridimensional baseado no Windows, chamado CONDUR, foi desenvolvido, e os resultados obtidos a partir do programa são comparados com dados experimentais disponíveis. O software foi projetado para ser flexível e abrangente em sua abordagem. A Figura 14 apresenta os resultados, em mapa de calor, do avanço anual, da carbonatação do concreto, considerando um elemento estrutural com fissuras. É possível observar que a difusão do gás, na região das fissuras, ocorre com mesma velocidade da face exposta ao CO_2 .

Figura 13 – Avanço da carbonatação no concreto.

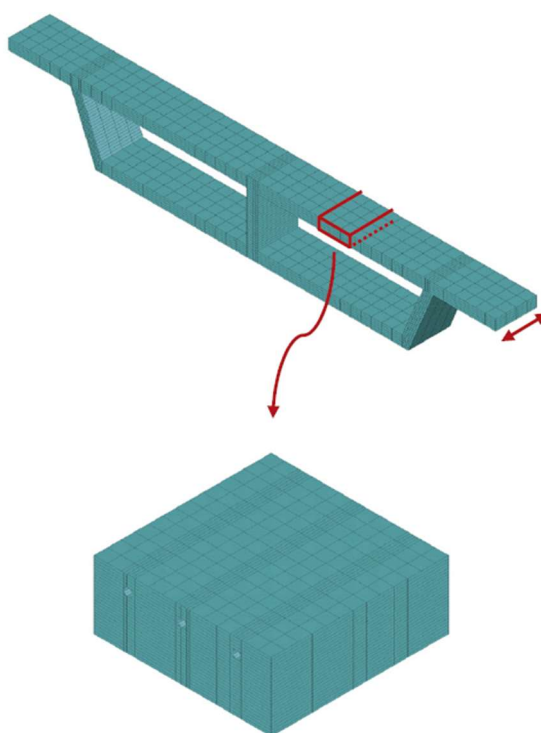


Fonte: Traduzido de Isgor e Razaqpur (2004).

Shafei, Alipour e Shinozuka (2012) empregaram o método dos elementos finitos para realizar uma análise estocástica da concentração de CO_2 no concreto, avaliando a interferência de parâmetros ambientais. Para isso, os autores utilizaram elementos finitos tridimensionais e examinaram a interferência de diversos parâmetros associados ao ambiente de exposição. Para a representação da difusão do gás, os autores consideraram as leis da termodinâmica e difusão de gás em um meio poroso. As análises dos ambientes simulados foram baseadas no conceito de análise térmica transitória com modificações apropriadas. A novidade da estratégia de modelagem, configura-se em considerar as características não lineares e dependentes do tempo, dos parâmetros envolvidos, juntamente com suas interações.

A modelagem foi realizada no programa ANSYS e para execução da análise térmica transitória os autores modelaram parte de um elemento estrutural, conforme representado na Figura 14.

Figura 14 - Modelo de elemento finito tridimensional da estrutura de concreto armado do estudo.

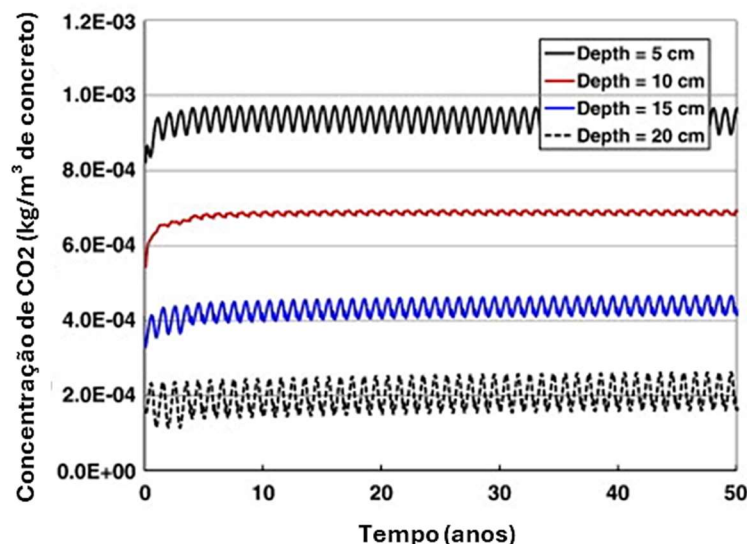


Fonte: Shafei, Alipour e Shinozuka (2012).

Com as modelagens, foi possível definir a concentração média de CO_2 , para diferentes profundidades, considerando um período de 50 anos, conforme apresentado na Figura 15. Os autores verificaram que o coeficiente de difusão é também uma função de vários parâmetros internos e externos, e que a variabilidade

espacial e temporal desse parâmetro deve ser também levada em consideração através de análises estocásticas.

Figura 15 – Concentração de CO₂ em função do tempo.



Fonte: Traduzido de Shafei, Alipour e Shinozuka (2012).

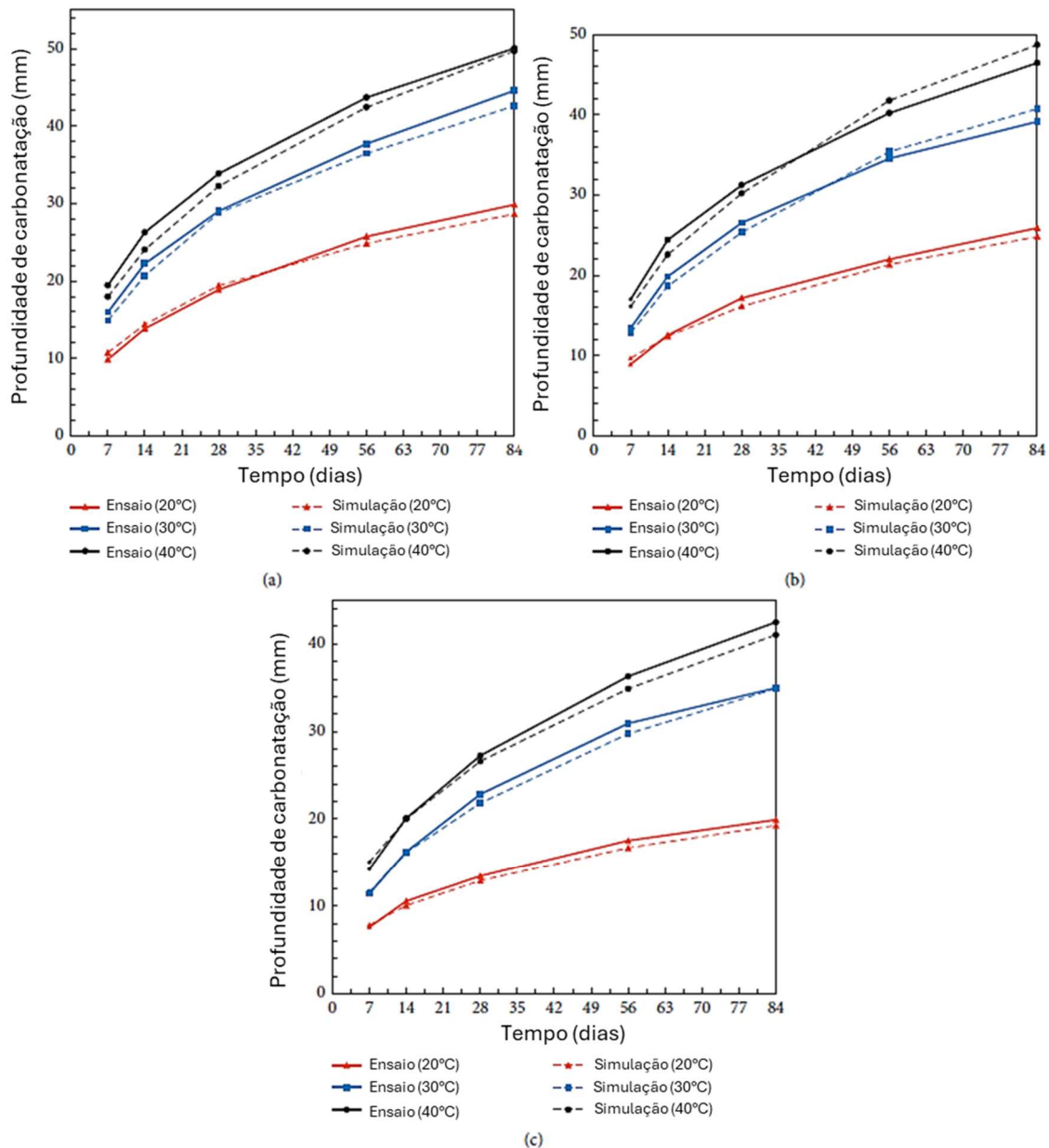
O modelo numérico desenvolvido por Peng et al. (2018), é baseado na difusão de CO₂ na matriz do concreto, considerando a dependência do tempo e da temperatura, com base na lei de conservação de massa. Para isso, os autores estabeleceram uma equação de transferência de massa bidimensional para a difusão de CO₂ no concreto, empregando o método dos elementos finitos.

Paralelamente à proposição do modelo, foi realizado um experimento de carbonatação acelerada utilizando blocos de concreto. Os resultados experimentais confirmaram a acurácia do modelo de elementos finitos e demonstraram que a metodologia proposta permite simular com eficiência a carbonatação do concreto, e possibilita análises rápidas e práticas, quando comparado a outros métodos que incorporam formulações analíticas. A Figura 16 apresenta as profundidades de carbonatação do modelo e dos experimentos, considerando diferentes temperaturas e resistências à compressão.

No estudo desenvolvido por Al-Ameeri et al. (2021), avaliou-se o impacto das mudanças climáticas nas velocidades de carbonatação do concreto. Segundo os autores, os modelos analíticos existentes, possuem limitações no que diz respeito à implementação de fatores associados às mudanças climáticas. Desta forma, foi proposto um modelo numérico que leva em conta as variações, ao longo do tempo,

da concentração de CO₂, temperatura ambiente e umidade relativa do ar.

Figura 16 - Resultados para concretos com (a) 25 MPa, (b) 30 MPa e (c) 35 MPa versus tempo.



Fonte: Traduzido de Peng et al. (2018).

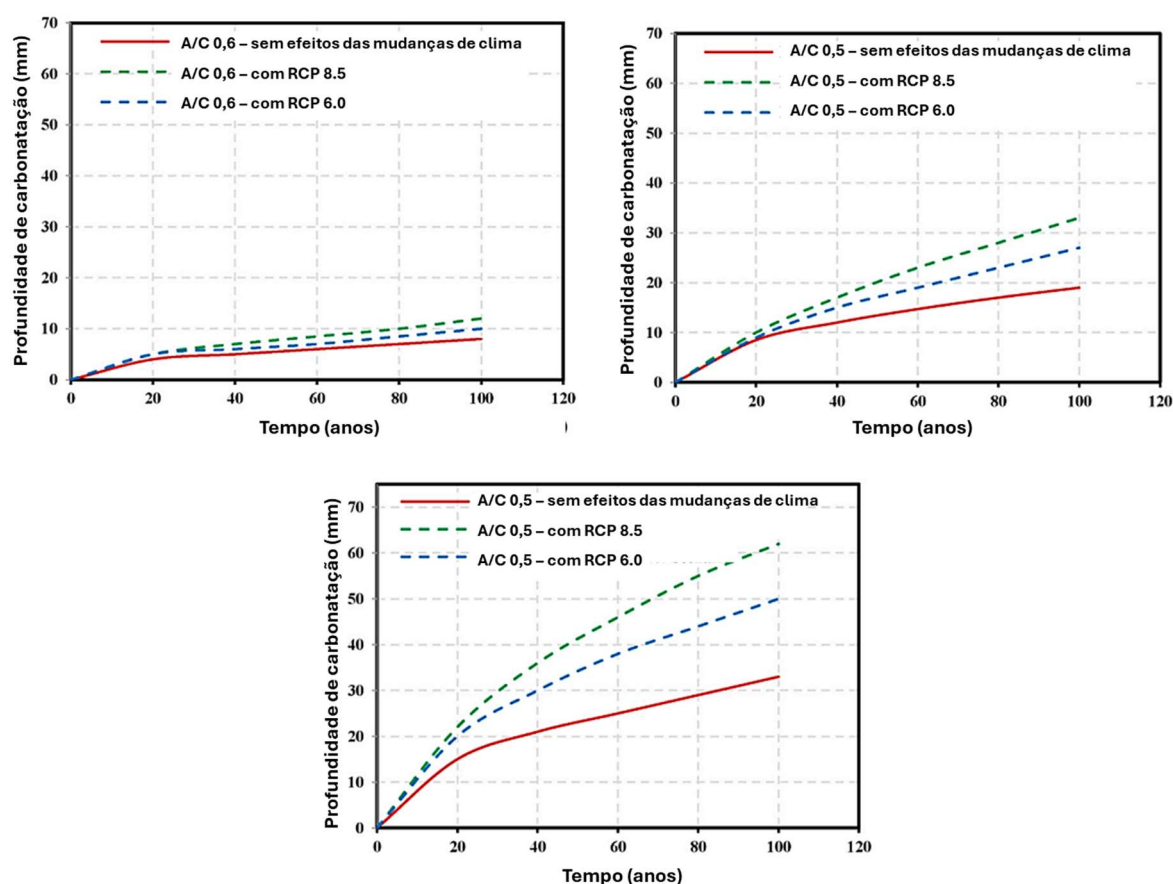
Para a modelagem da frente de carbonatação, Al-Ameeri et al. (2021) utilizaram a simulação com elementos finitos, considerando uma abordagem física não-linear, que possibilitou mapear as reações do CO₂ e Ca(OH)₂. Para validação do modelo foram realizados experimentos de carbonatação acelerada.

Foram feitas previsões utilizando o modelo para três cenários diferentes. Os cenários considerados foram os expostos no Painel Intergovernamental de mudanças climáticas (IPCC, 2014). Os cenários são identificados com base em possíveis níveis

de concentração dos gases do efeito estufa, desta forma, os RCPs (*Representative Concentration Paths*) utilizados foram o RCP 6.0 e RCP 8.5, sendo este último o pior cenário considerado, prevendo que a concentração de CO₂ na atmosfera ultrapasse os 1000 ppm e o acréscimo de temperatura alcance valores de 5,75°C em 2100.

Além dos cenários, a cidade de localização da estrutura foi definida como Londres e concretos com relações água-cimento de 0,4, 0,5 e 0,6. A Figura 17 apresenta a variação da profundidade de carbonatação nos diferentes cenários avaliados, considerando uma prospecção de 100 anos, onde é possível notar que as mudanças climáticas trarão grandes impactos na durabilidade e vida útil das estruturas de concreto armado, fazendo-se necessário considerar esses efeitos no projeto de novas estruturas.

Figura 17 - Efeito dos cenários de mudanças climáticas na previsão da carbonatação para estrutura de concreto em Londres.



Fonte: Al-Ameeri et al. (2021).

Ainda considerando a modelagem numérica, é crescente o uso de técnicas de aprendizado de máquina para modelar a carbonatação do concreto e mapear a profundidade de carbonatação. Após uma análise do banco de dados do Science

Direct, observou-se que o total de artigos dedicados à modelagem da carbonatação do concreto publicados na última década alcança 492. Dentro desse conjunto de trabalhos, aproximadamente 27% incorporam técnicas de Aprendizado de Máquina, destacando-se como uma abordagem contemporânea em constante exploração.

No trabalho desenvolvido por Lu e Liu (2009), foram propostas duas redes neurais artificiais para previsão da profundidade de carbonatação em concretos protendidos submetidos a diferentes níveis de estresse. A primeira rede trata-se de uma rede neural de retropropagação e a segunda uma rede neural de função de base radial. Para elaboração dos dados de teste e treinamento das ANNs foi conduzido um experimento acelerado de carbonatação, no qual 19 amostras foram geradas. Ambos os modelos de RNA demonstraram alta capacidade de previsão e generalização na avaliação da profundidade de carbonatação, sendo que os maiores erros percentuais absolutos foram de 10,88% para rede neural de retropropagação e 8,46% para rede neural de função de base radial.

O estudo de Luo, Niu e Dong (2014) seguiu uma vertente de estudo similar. Visando a previsão de profundidade de carbonatação no concreto duas redes neurais diferentes foram desenvolvidas, primeiro uma rede neural de retropropagação e depois uma rede neural de retropropagação otimizada com algoritmo de enxame de partículas. Para treinamento da rede neural foram utilizados 30 dados de carbonatação acelerada. Para teste e utilização dos modelos 5 amostras de medidas foram realizadas em uma ponte, localizada na China. Na comparação de resultados, a rede neural de retropropagação otimizada mostrou um erro relativo máximo de 3,5% enquanto a rede de retropropagação simples atingiu um erro relativo máximo de 12,8%, portanto a utilização de enxame de partículas como forma de otimização foi capaz de melhorar a acurácia da previsão do modelo de forma considerável.

Taffese, Sistonen e Puttonen (2015) propuseram em seu estudo modelos de previsão de carbonatação integrando 4 diferentes técnicas de aprendizado de máquina. A base de dados utilizada para desenvolvimento do modelo teve origem no projeto *Finnish DuraInt*. Os dados utilizados foram medidos nos ensaios experimentais de carbonatação acelerada do projeto em questão. As técnicas de aprendizado aplicadas no modelo foram as redes neurais artificiais, as árvores de decisão e os modelos *ensemble (bagged and boosted decision trees)*. Por fim, os resultados da aplicação das redes neurais na base de dados indicaram resultados mais satisfatórios, alcançando MSE de 0.2417, RMSE de 0.4916 e MAE de 0.2860.

No trabalho de Felix e Possan (2018), as redes neurais artificiais foram aplicadas para previsão da profundidade de carbonatação em ambientes marítimos. Ao todo, foram implementadas 91 redes *Perceptron* de múltiplas camadas. Os dados utilizados no trabalho foram coletados por Meira, Padaratz e Borba Junior (2006) e referem-se à profundidade de carbonatação de estruturas de concreto em ambiente marítimo, localizadas na cidade de João Pessoa, PB. O melhor resultado obtido neste estudo teve uma raiz do erro médio quadrático (*Root Mean Squared Error - RMSE*) de 0,130, valor do R^2 de 0,973 e cerca de 0,54mm de erro na previsão da profundidade de carbonatação.

No estudo conduzido por Malami et al. (2021) diferentes métodos de inteligência artificial foram utilizados para modelagem da profundidade de carbonatação do concreto. Utilizou-se o sistema de inferência neuro-fuzzy adaptativo (*ANFIS*), máquina de aprendizado extremo (*ELM*), máquina de vetores de suporte (*SVM*) e por fim um modelo de regressão multilinear convencional (*MLR*). O banco de dados foi composto por 10 estruturas de concreto, sendo cinco localizadas na região interior (Nicósia) e as outras cinco na área costeira (Quirênia) da República Turca do Norte de Chipre. Neste banco de dados a estrutura de concreto mais antiga possuía uma idade de 41 anos. Em termos de resultado, o modelo composto pelo sistema de inferência neuro-fuzzy adaptativos (*ANFIS*) obteve o melhor resultado, apresentando *RMSE* de 0,0238 e R^2 de 0,9997 durante a calibração e durante o teste um *RMSE* de 0,2919 e R^2 de 0,9998.

O estudo de Nunez e Nehdi (2021), propõe um modelo de árvore de regressão por impulso de gradiente (*GBRT*) para determinar a profundidade de carbonatação do concreto com agregado reciclado incorporando diferentes adições minerais, incluindo metacaulim, escória de alto-forno, sílica ativa e cinzas volantes. O banco de dados foi composto por 713 dados provenientes de trabalhos anteriores. Dentre eles, estão dados de carbonatação e também de carbonatação acelerada. A idade máxima de exposição dos dados foi de 10 anos. O modelo *GBRT* atingiu para o teste valor de R^2 de 0,9707 e *RMSE* de 1,5139.

Liu et al. (2021) desenvolveu e comparou diversos modelos híbridos de redes neurais artificiais com outras técnicas de aprendizado para a previsão da profundidade de carbonatação em concretos feitos com agregados reciclados. Para isso foi utilizado uma base de 593 dados de carbonatação acelerada que serviam para treinamento e teste das redes neurais. O modelo com melhor desempenho geral na previsão da

carbonatação foi o modelo chamado pelo autor de *WOANN*, que se trata de um modelo de rede neural com pesos sinápticos e bias otimizados com o algoritmo *Whale optimization algorithm* (Algoritmo de otimização de baleias). Este modelo atingiu um R^2 de 0,947 e um RMSE de 2,012.

No trabalho de Biswas et al. (2022), foram desenvolvidos modelos que combinam quatro algoritmos meta-heurísticos com regressão de vetores de suporte (SVR) visando aumentar a precisão da previsão da profundidade de carbonatação em concretos feitos com cinzas voantes. 300 dados de experimentos anteriores de carbonatação acelerada foram utilizados para desenvolver, treinar e testar o modelo SVR. Os modelos desenvolvidos tratam-se de modelos híbridos composto por Otimização de Enxame de Galinhas (CSO), Otimização de Lobos Cinzentos (GWO), Otimização de Enxame de Partículas (PSO) e Algoritmo de Otimização de Gaivotas (SOA). Como resultado, o modelo híbrido desenvolvido com otimização de enxame de galinhas (CSO-SVR) apresentou melhor resultado para predição neste banco de dados, atingindo um R^2 de 0,9871 e MSE de 1,074 para o treino e um R^2 de 0,9593 e MSE de 3,987 para o teste.

Huo, Wang e Huang (2023) desenvolveram em seu trabalho modelos de previsão de carbonatação usando métodos híbridos *ensemble* de aprendizado de máquina. Dois métodos foram utilizados, a variância inversa e o método ensemble baseado em redes neurais artificiais, foram propostos para integrar múltiplos algoritmos. O banco de dados foi composto por 532 dados de carbonatação acelerada provenientes de outros trabalhos de publicações científicas. Os resultados mostraram que os modelos de conjunto híbridos tiveram um desempenho superior aos modelos individuais, sendo que o modelo baseado em variância inversa alcançou o melhor desempenho ($R = 0,975$, RMSE = 2,978 mm).

O trabalho desenvolvido por Kumar et al. (2023) propôs um modelo híbrido de inteligência artificial para estimar a profundidade de carbonatação e a existência a compressão de concretos. O modelo desenvolvido foi uma rede neural convolucional unidimensional baseada em memória de curto e longo prazo (*1D-CNN-LSTM*). A base de dados utilizada para treinamento e teste da rede proposta foi formada utilizando-se dados de carbonatação acelerada controlada em laboratório. Por fim, o modelo em questão atingiu resultados de R^2 de 0,800 e RMSE de 0,448 para a previsão da carbonatação e de R^2 de 0,960 e RMSE de 0,169 para previsão de resistência a compressão do concreto.

Majlesi et al. (2023) desenvolveram modelos com redes neurais para previsão da profundidade de carbonatação em concretos expostos a diferentes ambientes naturais. Foram construídas 8420 estruturas de redes neurais artificiais para encontrar o modelo mais preciso e eficiente para previsão no longo prazo (até 10 anos). O banco de dados foi extraído do projeto *DURACON* no qual mais de 20 amostras de concreto foram expostas em ambientes naturais em 10 países diferentes. O tempo de exposição máximo dos dados considerados foi de 8 anos. A arquitetura de rede que apresentou o melhor resultado era composta por 3 camadas e atingiu valor de R^2 de 0,98 e RMSE de 3,027 na fase de teste do modelo.

Zhang et al. (2023) desenvolveram uma estrutura híbrida com base na máquina de vetores de suporte de mínimos quadrados (*LSSVM*) e de algoritmos metaheurísticos para previsão da carbonatação em concretos com adição de cinzas volantes. O banco de dados foi composto de 500 dados de carbonatação acelerada provenientes de trabalhos acadêmicos anteriores. Dentre os modelos híbridos desenvolvidos o que atingiu melhores resultados foi o modelo *LSSVM* otimizado pelo algoritmo metaheurístico de lobos cinzas, tendo R^2 de 0,9819 e RMSE de 1,7309.

Concha (2024) propôs um modelo de previsão da profundidade de carbonatação em concretos com agregados reciclados usando redes neurais artificiais. A base de dados utilizada para composição do modelo foi formada com dados de trabalhos anteriores, totalizando 445 dados de carbonatação acelerada e de carbonatação natural em concretos com agregado reciclado. Os dados mais antigos possuem um tempo de exposição de 10 anos. A melhor arquitetura de rede encontrada na pesquisa foi 8-10-1, com 1 camada de 10 neurônios. Os resultados mostraram um MSE de 2,00 e coeficiente de correlação do modelo de 0,97.

2.3 CONSIDERAÇÕES FINAIS DO CAPÍTULO

A carbonatação é um fenômeno complexo e multifacetado que desempenha um papel crucial no campo da engenharia civil. Ao longo das décadas, o desenvolvimento de modelos para o mapeamento da frente de carbonatação evoluiu significativamente, transitando de abordagens analíticas tradicionais para técnicas numéricas e de aprendizado de máquina mais avançadas. Essa mudança de paradigma reflete não apenas avanços tecnológicos, mas também uma compreensão mais profunda das complexidades envolvidas no fenômeno. A integração de modelos

numéricos e técnicas de aprendizado de máquina oferece uma visão mais abrangente e precisa do fenômeno, permitindo previsões mais confiáveis e aprimoramento contínuo das práticas de engenharia. No entanto, desafios ainda persistem, especialmente no que se refere à disponibilidade de dados de carbonatação natural e de condições reais de exposição, levando em conta as mudanças climáticas e efeito destas na carbonatação das estruturas de concreto. Em última análise, a pesquisa contínua nessa área é fundamental para o desenvolvimento de estratégias eficazes de construção e manutenção de infraestrutura, garantindo um ambiente construído seguro, durável e sustentável.

3 MATERIAIS E MÉTODOS: ARTIGO

Os materiais utilizados no projeto, o método adotado, os resultados obtidos e suas devidas discussões estão apresentadas em forma de artigo, os qual foi submetido para publicação em periódico internacional.

Stacking-Ensemble ANN model to predict the carbonation depth of concrete structures exposed to natural environments

Breno de Melo Lavinicki^a; Emerson Felipe Felix^{b*}

^a Latin American Institute of Technology, Infrastructure and Territory, Federal University of Latin American Integration, UNILA, Foz do Iguaçu, Brazil

e-mail: brenolavinicki0@gmail.com

^b Department of Civil Engineering, São Paulo State University (UNESP), School of Science and Engineering, Guaratinguetá 12516-410, Brazil

e-mail: emerson.felix@unesp.br

* Corresponding author: Emerson F. Felix | emerson.felix@unesp.br

ABSTRACT

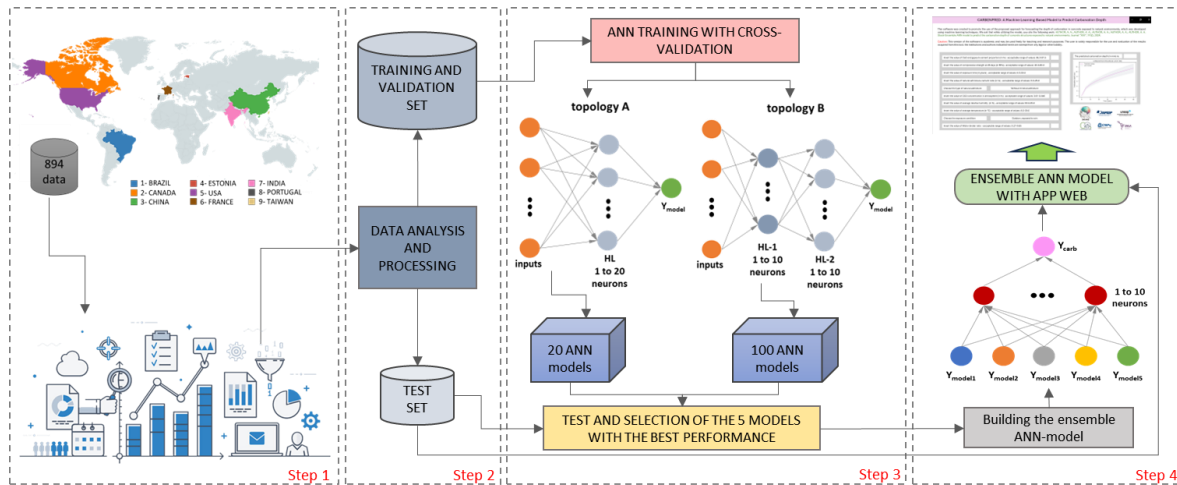
This study aims to enhance the accuracy of predicting concrete carbonation depth using artificial neural networks (ANNs) by accounting for temperature effects and using solely natural carbonation data from structures in diverse geographical regions with different climate zones. Furthermore, as a significant innovation, this study analyzes the possibilities of using Ensemble learning approaches, specifically the Stacking fusion strategy, to improve prediction accuracy and model generalization. For this, 1021 data on concrete carbonation depth was collected from the literature, with natural CO₂ exposure ages up to 60 years. The model was built considering ten input variables: the proportion of clinker and gypsum in cement, compressive strength, the type and consumption of mineral admixture, CO₂ concentration, relative humidity, environmental temperature, rain exposure condition, water-binder ratio, and the time of exposure. Findings pointed out that the Stacking fusion strategy improved generalization performance by 9% over the top individual ANN model, resulting in a 14% increase in accuracy, and that the proposed model demonstrated superior accuracy than other literature formulations, particularly for older structures. The Stacking-Ensemble model's coefficient of determination value is 0.914, and the root mean squared error is 1.175 mm. The proposed approach, complemented by its accessible software interface, offers a robust and practical tool for accurately predicting concrete carbonation depths, contributing to the field of structural engineering by enhancing the ability to assess concrete's durability.

Keywords: Concrete carbonation; Natural exposure conditions; Machine Learning; Stacking fusion strategy.

HIGHLIGHTS

- The Stacking fusion strategy is introduced to the concrete carbonation depth prediction problem.
- Model developed with over 1000 carbonation data from concrete elements exposed only to natural environmental conditions.
- The carbonation depth was mapped considering the environmental climatic conditions.
- The approach considers ten parameters readily available for new reinforced structures.

GRAPHICAL ABSTRACT



1. Introduction

The chemical reaction of carbonation occurs when atmospheric CO₂ reacts with calcium-based compounds in concrete in the presence of water. This process substantially threatens concrete durability, causing degradation of steel reinforcement in concrete structures and elevated maintenance costs for older structures [1]. The current trend toward developing innovative concrete, characterized by lower CO₂ emissions and increased durability, has sparked significant interest in recent research focused on understanding and mitigating the carbonation process in concrete [2–5].

A global trend has emerged over the past decades in response to the observed degradation issues, mainly due to the corrosion of steel embedded in concrete, new competitive demands, and sustainability requirements in the Civil Construction sector [6]. This trend focuses on designing projects based on durability to extend the service life of reinforced concrete structures. Consequently, service life prediction models have been proposed.

According to Possan et al. [6], mapping carbonation progress can be a complex task as it involves modeling the physical, chemical, and biological processes occurring in concrete. It also requires defining the relationships between carbonation and influencing parameters such as relative humidity, temperature, carbon dioxide concentration, concrete strength, permeability, and the composition of the concrete materials [7]. The complexity of developing models to map carbonation depth and the lack of information on the mutual correlations among different parameters related to the phenomenon underscores the need for efficient methods that facilitate the modeling process [8–10].

With the advent of computers, advanced numerical techniques have become possible to analyze large volumes of data and develop more precise and complex regression models. Additionally, the ability to process large datasets allows for the simultaneous analysis of multiple variables. This capability is crucial for understanding how various factors interact and influence the carbonation process in concrete.

1.1 Mathematical or statistical formulations

Studies on concrete carbonation have been performed and documented in the literature over six decades, with a well-established theoretical foundation [11–22]. Most of the studies demonstrated that the carbonation mechanism is partially influenced by CO₂ diffusion and can be represented by the square root of the time (Equation 1),

which is based on Fick's first Law [18], in which k is the CO₂ diffusion coefficient (in mm/time^{0.5}). Nevertheless, the observed carbonation behavior doesn't consistently conform to this typical trend and doesn't rely solely on the diffusion coefficient. Various models are available in the literature designed to predict concrete carbonation depth [1,6,7,10,23–36].

$$Y_{carb} = k\sqrt{t} \quad (1)$$

Smolczyk [25] defined the carbonation depth through Equation 2. The proposed model, based on Equation 1, establishes the carbonation coefficient k as a function of the concrete compressive strength (CS in kgf/cm²), the limit value of the compressive strength in which there is no carbonation (CS_{lim} in kgf/cm²), and the CO₂ diffusion velocity (A). However, similar to the challenge in determining the carbonation coefficient k in Equation 1, Equation 2 poses practical difficulties in its application due to the requirement for a prior determination of the carbonation velocity (A).

$$Y_{carb} = A \left(\frac{1}{\sqrt{CS}} - \frac{1}{\sqrt{CS_{lim}}} \right) \sqrt{t} \quad (2)$$

Vesikari's [26] model (Equation 3) aims to overcome the challenges associated with applying Equation 1 by proposing a simple definition for the diffusion coefficient based on the water-cement ratio (W/C). The model was proposed to perform predictions on concrete with W/C varying from 0.45 to 0.75. Moreover, after validating the model with natural and accelerated carbonation data, the author observed that Equation 3 performs differently for concrete subjected to different rain exposure conditions, indicating that for concrete exposed to external environments unprotected from rain, the depths should be multiplied by a factor of 4.

$$Y_{carb} = \left[26 \left(\frac{W}{C} - 0.3 \right)^2 + 1.6 \right] \sqrt{t} \quad (3)$$

Also, to generate an easy-to-apply model, Bob and Afana [28] formulated Equation 4, considering carbonation data of an extensive experimental campaign that enabled the identification of critical factors influencing carbon dioxide diffusion. The model was proposed by correlating carbonation depth with CO₂ concentration (CCO_2), environmental relative humidity (K_{RH}), concrete compressive strength (CS in MPa), and cement composition (C_{co}). The CCO_2 , K_{RH} , and C_{co} values are specified in Bob and Afana [28].

$$Y_{carb} = 150 \left(\frac{C_{co} \cdot K_{RH} \cdot CCO_2}{CS} \right) \sqrt{t} \quad (4)$$

Considering the same aspects of Equation 4, Hamada [37] proposed a

mathematical formulation to correlate the concrete carbonation depth of elements exposed to natural environments (Equation 5), with the water-cement ratio (W/C), the cement composition (K_c), the aggregate type (K_{ag}), and the presence of surface-active agent (K_{ad}). Since the data utilized in the modeling were linked to concrete under the same exposure conditions, the author mapped the carbonation depth only depending on factors inherent to the materials.

$$Y_{carb} = \sqrt{\frac{K_c K_{ag} K_{ad} \left(\frac{W}{C} - 0.25\right)^2}{0.003 \left(1.15 + 3 \frac{W}{C}\right)}} t \quad (5)$$

Until the mid-1980s, models were defined through linear and nonlinear regression methods, considering various factors such as water-cement ratio, concrete compressive strength, and exposure conditions [23–26]. Subsequently, researchers enhanced their models by incorporating physical-chemical formulations related to cement paste hydration reactions and CO_2 dissolution in the porous concrete matrix, thereby refining the assessment of carbonation depth [6,7,27–32].

Papadakis et al. [27] provided greater accuracy in predicting carbonation depth at the time than previously proposed models. The formulation proposed by the authors, as presented in Equation 6, was based on assessing the concrete's microstructure and its correlation with the CO_2 diffusion on the cementitious matrix. To propose Equation 7, the authors considered the molar concentration of carbon dioxide (CO_2 in mol/m^3), the effective diffusion coefficient of CO_2 in carbonated material (D_{CO_2} in m^2/s), the molar concentration of hydrates ($Ca(OH)_2$ and CSH in mol/m^3), and the molar concentration of anhydrous compounds (C_3S and C_2S in mol/m^3).

$$Y_{carb} = \sqrt{\frac{2D_{CO_2}[CO_2]^0}{[Ca(OH)_2]^0 + 3[CSH]^0 + 3[C_3S]^0 + 2[C_2S]^0}} t \quad (6)$$

Although the Papadakis et al. [27] model provides a more accurate determination of the carbonation coefficient as a function of the cement composition, it does not incorporate other factors involved in carbonation, such as exposure conditions, as Vesikari [26], Bob and Afana [28] and Hamada [37] had already been explored.

Two decades later, Possan et al. [6] proposed Equation 7, which gathered all the knowledge from previous models in the literature, considering the influence of concrete composition, exposure conditions, and the material's properties. The model was proposed with easily obtained input parameters, divided into concrete properties and exposure conditions, in which: SC is the concrete compressive strength (in MPa); k_c is related to the cement type; k_{SC} is associated with the axial compressive strength and

the cement type; ad is the content of addition (in % to the cement mass; k_{ad} is related to additions depending on the cement type; RH is the relative humidity (in %*0.01); K_{RH} is related to relative humidity and cement type; CO_2 refers to the CO_2 content in atmosphere (in %); k_{CO_2} is associated with the CO_2 content of the environment, depending on the cement type; and k_{ce} is related to the concrete exposure conditions.

$$Y_{carb} = k_{sc} \cdot \left(\frac{20}{S_c}\right)^{k_{fc}} \cdot \left(\frac{t}{20}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp \left[\left(\frac{k_{ad} \cdot ad^{\frac{3}{2}}}{40 + S_c} \right) + \left(\frac{k_{CO_2} \cdot CO_2}{60 + S_c} \right) - \left(\frac{k_{RH}(RH - 0.68)^2}{100 + S_c} \right) \right] \cdot k_{ce} \quad (7)$$

The model presented in Equation 7 was developed by integrating diffusion equations based on Fick's First Law. The parameters of Equation 7 were defined using 1298 data points gathered from experts' knowledge and natural data found in the literature. Although the composition of the concrete and the exposure conditions were considered input parameters, the formulation was developed and validated using carbonation data from concrete structures located in one country, considering three microclimates: equatorial, tropical, and temperate. This may make it inapplicable in countries with adverse climatic conditions to those found in Brazil.

The DURACON project [38,39], collaborative research that characterizes environmental and material parameters to understand their correlation with reinforced concrete structures, evaluated mathematical formulations in the literature estimating concrete carbonation depth with six years of natural exposure. The findings pointed out that analytical models failed to map the natural carbonation depth when considering concrete located in different microclimates, indicating the need to include the ambient temperature as an input parameter [40].

Thus, even with the existence of various mathematical formulations for mapping the progress of carbonation in concrete, and considering that most of them are based on a mathematical curve fitting or, more complexly, in solving the physical-chemical equations that govern the carbonation mechanism, challenges arise in modeling the phenomenon due to the intricate nature of the material, and the large number of parameters influencing the carbonation mechanism, posing obstacles in analyzing their impact on concrete durability and the service life of concrete structures [10,41].

1.2 Machine Learning models

In this context, Machine Learning (ML) is promising because computational tools such as Artificial Neural Networks (ANN) can circumvent the difficulties in the carbonation modeling process. ANN is a feasible and effective alternative for modeling

different nature problems [40,42–49]. Knowing this, ANN studies have been developed over the last decade [9,10,34,35,40,50–54]. Londhe et al. [52] demonstrated the ANN's ability to map the complex and nonlinear concrete carbonation phenomena. Lee et al. [9] compared the performance of the finite element method (FEM) to simulate the CO₂ diffusion on concrete and the ANN mapping, considering data of accelerated carbonation, and the results pointed out that ANNs generated more accurate predictions than FEM simulations.

Taffese et al. [33] assessed the performance of ANN, Regression Trees, and Bagged and Boosted Random Forests in mapping concrete carbonation depth. The study considered mixed data from accelerated and natural carbonation. The results identified ANNs as the technique demonstrating the best learning and generalization, achieving a coefficient of determination (R^2) of 0.94. Despite the favorable performance, the authors caution against employing the model for assessing the service life of concrete structures since the data used to build the model is mixed from accelerated and natural carbonation.

Even with ANNs' excellent ability to capture non-linear correlations between carbonation and parameters linked to concrete and exposure conditions, most of these were generated using only accelerated carbonation data or combining accelerated and natural carbonation data, meaning that many of these models have no application in long-term analysis of reinforced concrete's service life.

More recently, Majlesi et al. [40] developed a model based on Artificial Neural Networks that incorporates only natural carbonation data. The authors curated a database containing 110 entries of natural carbonation depth from concrete structures up to 9 years old located in 10 countries (Argentina, Bolivia, Colombia, Chile, Costa Rica, Mexico, Portugal, Spain, Uruguay, and Venezuela). The model proved effective in predicting carbonation depth, achieving a coefficient of determination of 0.91 and a root mean square error of 3.43 mm. However, the limitation of this model is its validation with data from structures at most nine years, raising questions about its generalizability to evaluate older structures.

In response to the gaps presented, this study aims to extend the applicability of ANN-based models by incorporating the temperature influence and considering only natural carbonation data. The database was defined by considering carbonation data from concrete elements up to 60 years old. Also, as a point of substantial innovation, this work investigates the potential of applying an Ensemble learning technique, the

Stacking fusion procedure, to couple different individual ANN models, in which each model contributes its unique ability to capture different patterns or dependencies within the data and to leverage their respective strengths and mitigate their limitations.

2. Modeling

As previously explained, this study proposes a predictive Stacking-Ensemble ANN model to predict the long-term carbonation depth of concrete exposed to natural environments. An Ensemble learning approach was employed, considering the combination of individual artificial neural network models, in which each neural network architecture contributes to the final prediction. The subsequent sections detail the methodology used in this work, including data collection, analysis, processing, and the Ensemble model's building and testing.

2.1 Data collection, processing, and analysis

A crucial prerequisite to train a Machine Learning model effectively is the dependability of the dataset utilized. The dataset was constructed based on 1021 data, which were compiled from the literature [6,35,55–65]. These sources included studies that measured carbonation depths in concrete under various natural environmental conditions and were related to concrete elements located in thirteen countries with different weather conditions (Brazil, Canada, China, Estonia, France, Germany, India, Italy, Portugal, South Korea, South Africa, Taiwan, and USA). In some cases, it was necessary to determine missing information, such as average annual temperature and relative humidity. This was done by collecting information from climate databases [66], considering the age of the concrete indicated in the study and the work's publication period. Also, in certain cases, just the concrete's actual compressive strength was available, necessitating an estimate of the material's strength at 28 days, a parameter to be employed in the modeling. This was done according to the standards of the Brazilian concrete structural design standard NBR 6118 [67].

Several variables affect the depth of concrete carbonation, such as the binder's composition, concrete mix design, and environmental and exposure conditions. Besides, in this research, ten parameters have been identified and selected to be the model's input parameters: the average proportion of clinker + gypsum in the cement *CG+* (*in %*), concrete's compressive strength at 28 days (*CS*), type of admixture "*TMADX*" (0 - to concrete without mineral admixture; 1 – with blast furnace slag; 2 –

with fly ash; 3 – with limestone filler; 4 – other pozzolanic materials), the proportion of mineral admixture by cement consumption used in the concrete mixture “*MADX*” (in %), CO₂ concentration in the atmosphere “*CO2*” (in %), annual average relative humidity “*RH*” (in %), annual average temperature “*TEMP*” (in °C), concrete exposure condition “*EXP*” (0.65 – to outdoor, exposed to rain; 1.0 to outdoor, sheltered from rain; 1.3 – to indoor), the water-binder ratio “*W/B*”, and the age of concrete “*TIME*” (in years), representing the exposure time. Figure 1 shows the frequency distribution of all continuous variables following the Interquartile Range Outliers analysis, in which any observations with carbonation depth larger than 25.55 mm were eliminated from the modeling database, resulting in 851 data. Table 1 displays the maximum, minimum, average, and standard deviation values of the features. The *EXP* and *TMADX* are discrete parameters, so their histograms were not presented in Figure 1.

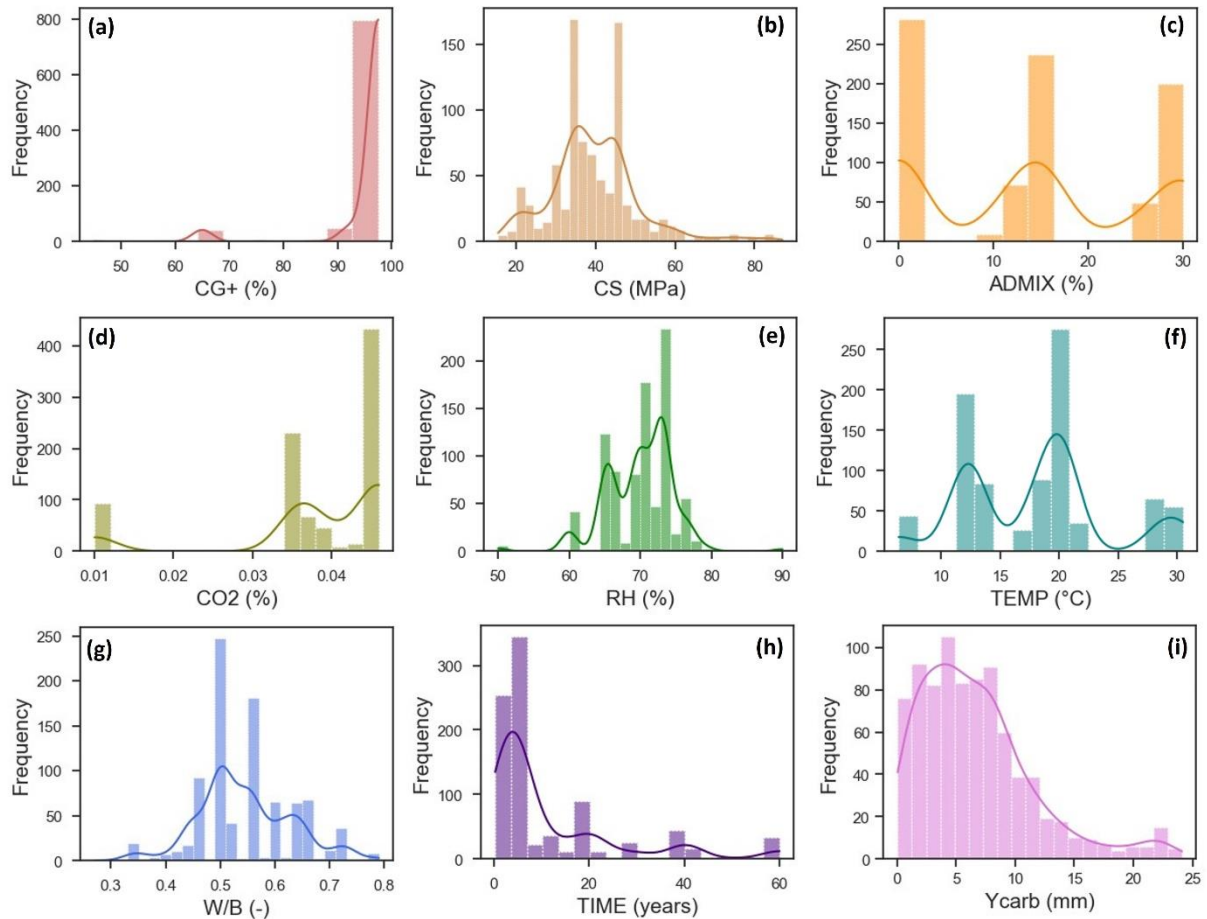


Figure 1. Histograms of the continuous variables of the original dataset.

For the collected data, *CG+* and *CO2* exhibit a left skewness (Figures 1.a and 1.d), with most instances falling within the range of 90–100% and an average value of 93.48% for the average proportion of clinker + gypsum in the cement, and with most

instances falling within the range of 0.03–0.046% and an average value of 0.038% for the CO₂ concentration. The histograms of CS (ranging from 13.90 to 87.0 MPa), TIME (ranging from 0.25 to 60.0 years), and YCARB (ranging from 0.07 to 24.9 mm) display a right skewness (Figures 1.b, 1.h and 1.i). Figure 1.g shows that 50% of the database had a W/B range of 0.45 and 0.6. Figure 1.c shows that the proportion of mineral admixtures in the concrete varies between 0 up to 30% and that three concentration peaks exist, indicating more than one high frequency in the data. For temperature and relative humidity average values (Figures 1.e and 1.f), there is more than one peak, and the most proportion of data is located close to the average values.

Table 1: Statistical parameters of the dataset features.

Feature	Unit	Minimum	Maximum	Average	Standard deviation
proportion of clinker + gypsum (CG+)	%	60.00	97.50	93.48	6.75
compressive strength at 28 days (CS)	MPa	13.90	87.00	40.24	10.95
mineral admixture-cement ratio (MADX)	%	0.00	30.50	13.74	11.56
CO ₂ concentration (CO ₂)	%	0.01	0.046	0.038	0.01
annual average relative humidity (RH)	%	50.00	90.00	69.95	4.64
annual average temperature (TEMP)	°C	5.90	30.50	18.71	6.02
water-binder ratio (W/B)	-	0.27	0.78	0.54	0.08
exposure time (TIME)	years	0.25	60.00	11.67	14.57
Carbonation depth (YCARB)	mm	0.07	24.90	7.55	4.90

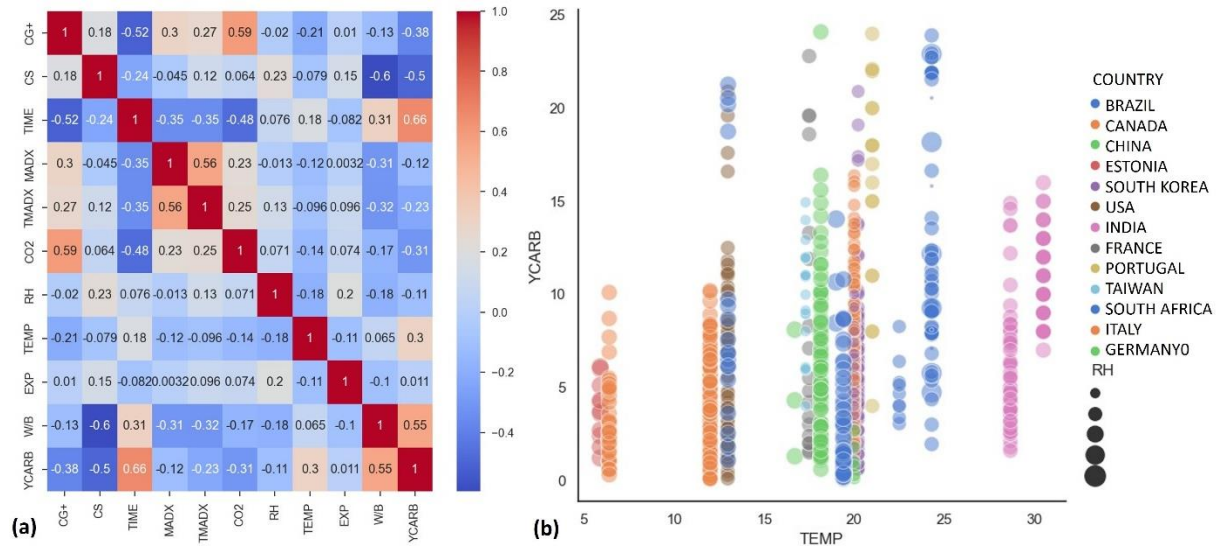


Figure 2. (a) Correlation matrix and (b) data distribution according to country and environmental parameters.

Figure 2.a presents the Pearson correlation matrix between all features to provide additional information about the dataset. No stronger linear correlations between the features and the carbonation depth (YCARB) can be observed. The carbonation depth exhibits moderate relationships with the exposure time (0.66), water-binder ratio (0.55), compressive strength (-0.50), the proportion of clinker + gypsum in the cement (-0.38),

CO₂ concentration (-0,31), and annual average temperature (0.30), indicating that these parameters influence the carbonation depth progress. It is important to note that temperature showed a median positive linear correlation with carbonation depth, suggesting the importance of considering it to map the phenomena.

Figure 2.b shows the data distribution as a function of the environmental parameters and the countries where the concrete elements are located. It is possible to notice that as the relative humidity, the temperature does not have a linear relationship with carbonation depth since the lowest carbonation depths are observed in countries with the lowest and highest values of annual average temperature. The data show that carbonation progresses faster in concretes with annual average temperatures between 15°C and 25°C. A median correlation between temperature-carbonation and relative humidity-carbonation was also observed by Majlesi et al. [40], indicating that these parameters are consistently linked in any given environment.

Before developing the model, the features reported in Table 1 were normalized to improve the performance and precision of the ANN models. In addition, the dataset was split into two subsets for the modeling process: one with 80% of the data to train and cross-validate the models (with the k-fold procedure – with k equal to 10) and one with 20% of the data to test and evaluate the models' generalization. This strategy is essential as it provides a more reliable estimate of the model's generalization ability by reducing the risk of overfitting to a specific subset of data [68–70]. The data splitting was performed using stratified sampling to preserve the features' characteristics [71].

2.2 Artificial neural networks

Artificial neural networks (ANNs) mimic the human brain to tackle Machine Learning tasks, comprising interconnected layers of artificial neurons [72]. Neurons receive weighted inputs, compute a sum, apply non-linear activation functions, and transmit outputs to subsequent layers (Figure 3.a). The ANN structure includes input, hidden, and output layers, with weights adjusted during training via optimization algorithms like gradient descent. ANNs learn intricate data patterns, executing tasks like classification, regression, and natural language processing. They find extensive utility in diverse domains, including image recognition, speech processing, medical diagnosis, and financial forecasting, epitomizing the power of Machine Learning in contemporary applications.

A Multilayer Perceptron ANN (MLP-ANN) is an artificial neural network consisting

of multiple layers of interconnected neurons, including an input layer, one or more hidden layers, and an output layer (Figure 3.b). Backpropagation is a technique for training MLP-ANN, enabling them to learn from data and make predictions.

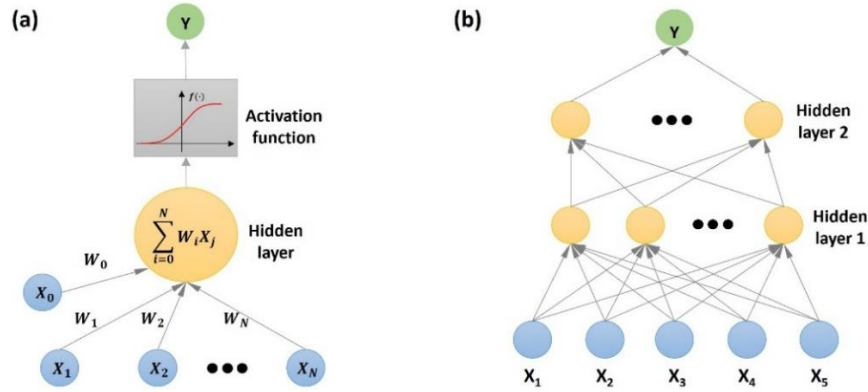


Figure 3. (a) Perceptron ANN (b) MLP-ANN with two hidden layers.

The process of training an MLP-ANN using backpropagation involves several steps. Firstly, the network architecture (topology) needs to be defined, including the number of layers, neurons in each layer, and the activation functions used. Next, the network parameters, such as weights and biases, are initialized randomly. During the training phase, input data is fed forward through the network, with each neuron in one layer connected to every neuron in the subsequent layer. The network output is then compared to the target values using a chosen loss or error function, such as mean squared error or cross-entropy loss. Backpropagation is then employed to update the network parameters to minimize errors between the predicted and actual outputs. This process involves computing the error gradient concerning each parameter using the chain rule of calculus and then adjusting the parameters in the opposite direction of the gradient using an optimization algorithm, such as gradient descent.

2.3 Performance analysis

In Machine Learning regression, several metrics could assess the model's performance in predicting continuous numerical values. In this study, it was utilized the mean absolute error (MAE), root-mean-square error (RMSE), coefficient of determination (R^2), and the explained variance score (EVS).

The mean absolute error is a widely used metric in regression analysis to measure the absolute average magnitude of errors between predicted and actual values, as shown in Equation 8. It is advantageous when is necessary to understand the average

absolute difference between the predicted outputs and the observed values in a straightforward and interpretable manner.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Y_i - O_i| \quad (8)$$

in which Y_i are the observed values and O_i represent the model outputs, and n is the amount of data samples evaluated.

Equation 9, which evaluates the average size of errors while assigning greater weight to more significant errors, is a good choice in scenarios where large errors have a greater potential for harm or criticality. By squaring the differences, RMSE highlights the significance of significant errors and estimates the average prediction error, which is advantageous.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - Y_i)^2} \quad (9)$$

The coefficient of determination (Equation 10), often called R-squared (R^2), is a statistical measure used in regression analysis to evaluate how well a regression model fits the observed data. R^2 quantifies the proportion of the variance in the dependent variable (the target) that is predictable from the model's independent variables (features). R^2 typically ranges from 0 to 1, where an R^2 of 0 signifies that the model fails to account for any variance in the target variable, offering no improvement over using the mean for predictions. Conversely, an R^2 of 1 indicates that the model perfectly elucidates the variance in the target variable.

$$R^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}} \right)^2 \quad (10)$$

in which $\bar{Y}$ are the means of observed values and $\bar{O}$ the means of model outputs.

The explained variance score (Equation 11) is a metric used to assess the proportion of variance in the dependent variable. The EVS is a metric used to understand how well the model captures and explains the variability in the data.

$$EVS = 1 - \left[\frac{Var(Y - O)}{Var(Y)} \right] \quad (11)$$

in which $Var(Y)$ is the variance of the observed values, $Var(Y - O)$ and represents the variance of the residuals.

2.4 Building the Stacking-Ensemble ANN model

Altogether 120 topologies were used to build the individual ANN models, differing by the number of hidden layers (one or two) and the number of neurons in each. The number of neurons varied from 1 to 20 in ANNs with only one hidden layer and 1 to 10 in ANNs with two hidden layers, as depicted in Figure 4. These topologies were defined to have individual ANN models with low complexity, ensuring that all ANNs have a maximum of 20 neurons.

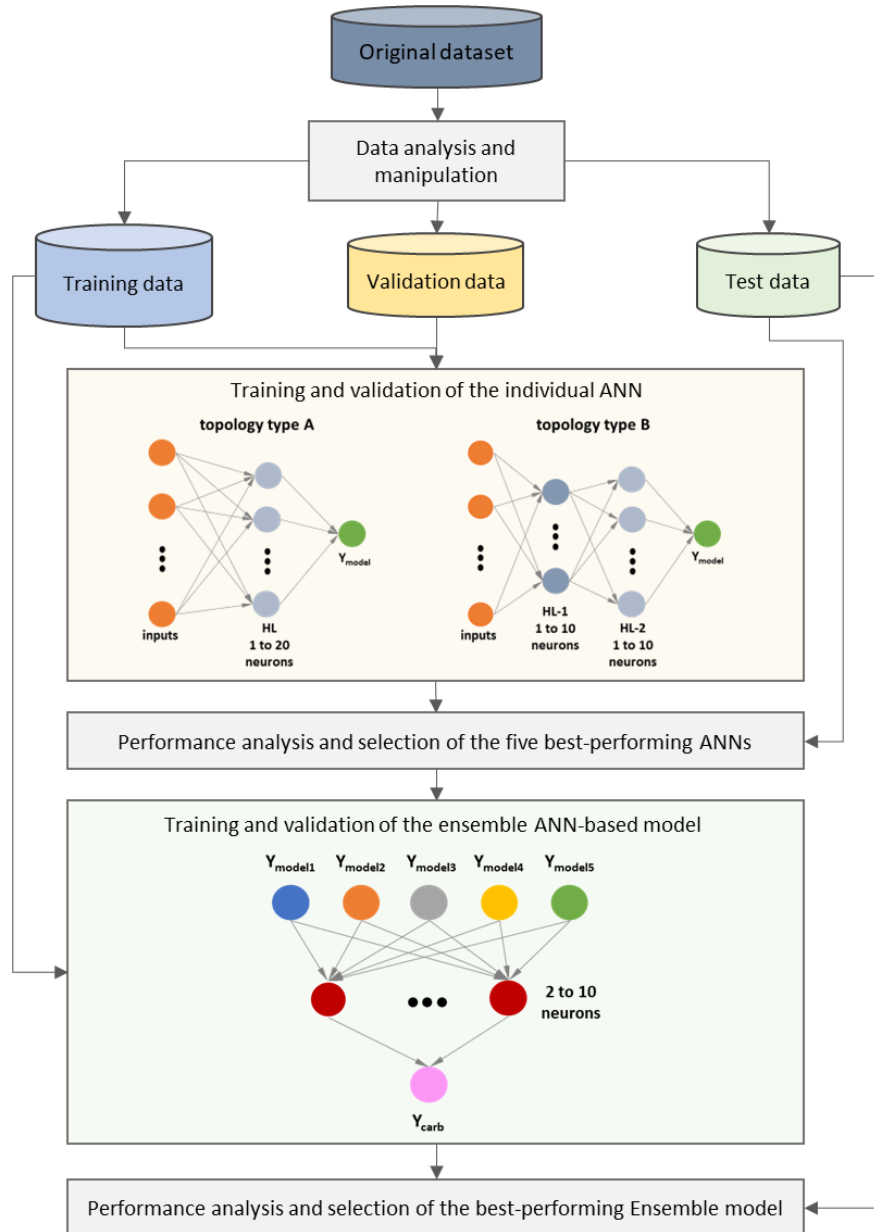


Figure 4. Topologies of the ANN trained.

Considering that supervised learning with the backpropagation training algorithm was utilized, it was necessary to establish a learning rate since it is directly associated with the network's convergence rate [49]. Based on Felix et al. [35], the learning rate and momentum variable were fixed at 0.4 and 0.7, respectively. The hyperbolic tangent

function was defined as the activation function in all training, and the mean square error was established as a training convergence criterion, with a maximum of 10^6 iterations.

To analyze the influence of topology on the learning process, the initial weights were defined at 0.5 for all training. After training all 120 individual ANN models, a performance analysis was conducted to identify the five models with the best predictions and generalizations.

To generate the Stacking-Ensemble ANN model, the prediction outcomes of the five individual ANN models with the highest performance were used as new input variables to train the Ensemble models, with nine different topologies (Figure 4), following the same Stacking fusion strategy used in Huo et al. [36]. All the Ensemble models were trained and tested to define the predictor with the best performance. Figure 4 summarizes the methodology used to build the Ensemble model.

3 Results and discussion

3.1 Performance analysis of the individual ANN models

The 120 individual ANNs were first trained, validated, and tested to define the Stacking-Ensemble ANN model, as described in section 2.4. Afterward, the R^2 and RMSE metrics assessed the networks' performance. The R^2 was examined for the training and testing datasets, while the RMSE was calculated using the complete database. Figure 5 displays the performance of ANNs with topology A, according to Figure 4, utilizing a single hidden layer.

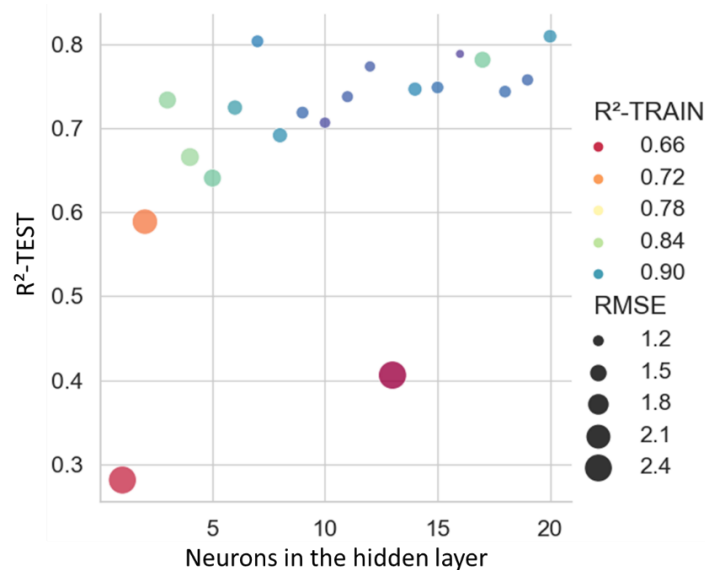


Figure 5. Performance of the ANNs with one hidden layer.

Based on Figure 5, the generalization performance of the networks (R^2 -TEST) improves with an increase in the number of neurons, except when 13 neurons were utilized. The average R^2 -TEST score was 0.693, suggesting moderate predictive ability for data not included in the learning process. As the number of neurons increases, there is a tendency to improve R^2 -TRAIN and RMSE. The average value of the determination coefficient for the training phase was 0.871, with a root mean square error of 1.607 mm. The ANN with the best generalization has a topology defined with 7 neurons in the hidden layer, with an R^2 -TEST of 0.804 and an R^2 -TRAIN of 0.913, with an explained variance score of 0.9.

To better assess the performance of networks with two hidden layers, contour maps of the R^2 -TRAIN (Figure 6), R^2 -TEST (Figure 7), and RMSE (Figure 8) were generated and presented.

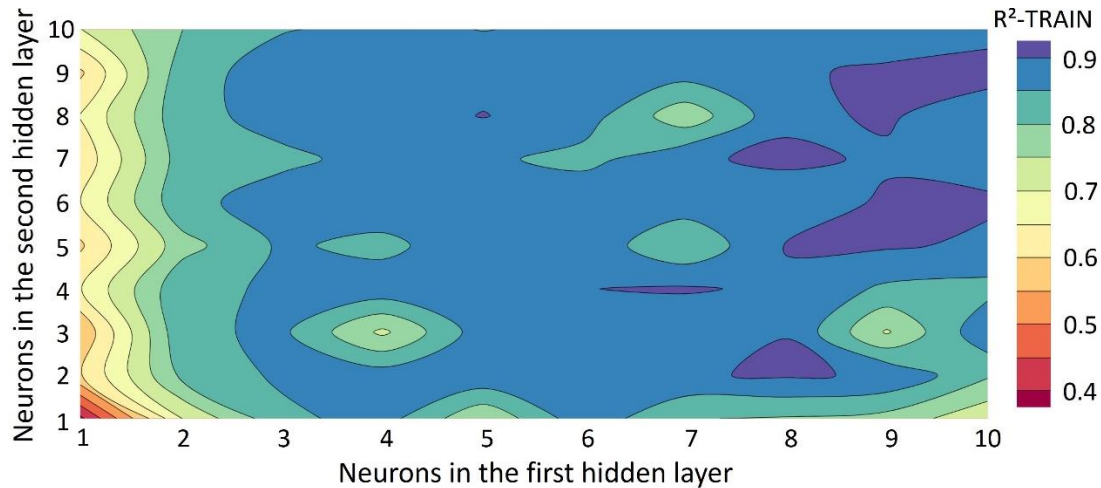


Figure 6. R^2 -TRAIN values of ANNs with two hidden layers.

Figures 6 and 7 show that employing two hidden layers requires more than one neuron in the first hidden layer to achieve training and testing performances comparable to networks with a single hidden layer (Figure 5). Findings suggest that utilizing more than three neurons in the first hidden layer leads to MLL-ANN with superior performance compared to artificial neural networks with a single hidden layer. Networks containing over three neurons in the first hidden layer achieved an average R^2 -Train of 0.897. Networks with two hidden layers, including a minimum of three neurons in the first hidden layer, had an average RMSE of 1.503 mm, which was 6.4% lower on average than those generated by ANNs with only one hidden layer.

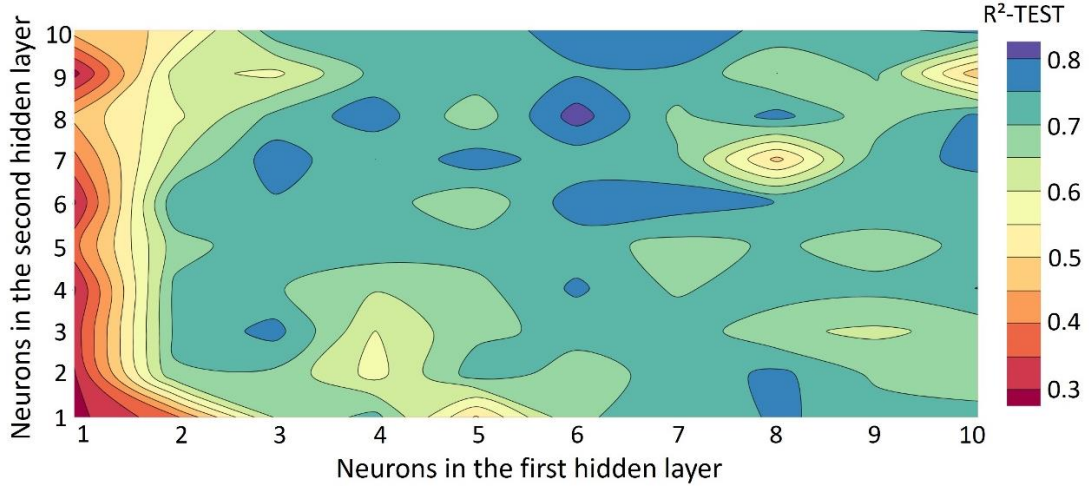
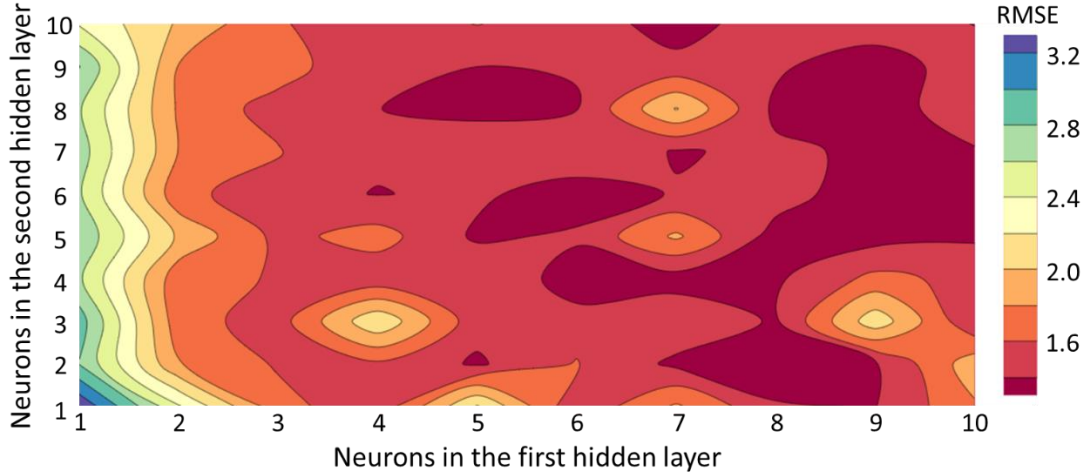
Figure 7. R²-TEST values of ANNs with two hidden layers.

Figure 8. RMSE values (in mm) of ANNs with two hidden layers.

To identify the top five performing networks to build the Ensemble model, a strategy was defined to simplify the evaluation of the individual ANN models. A performance metric called R^2_{WEIGHTED} (Equation 12) was established, which combines the R^2 values of the training and testing phases. The R^2_{WEIGHTED} was calculated by combining 40% of the R^2_{TRAIN} , with the testing performance contributing 60% to the overall measure. The weights definition of the test and training performances were established to select ANNs with the highest generalization ability, creating an Ensemble model that could provide more reliable predictions. Figure 9 shows the R^2_{WEIGHTED} values calculated for all ANNs.

$$R^2_{\text{WEIGHTED}} = 0.4R^2_{\text{TRAIN}} + 0.6R^2_{\text{TEST}} \quad (12)$$

in which R^2_{TRAIN} is the determination coefficient achieved during the training phase, while R^2_{TEST} is the determination coefficient calculated in test phase.

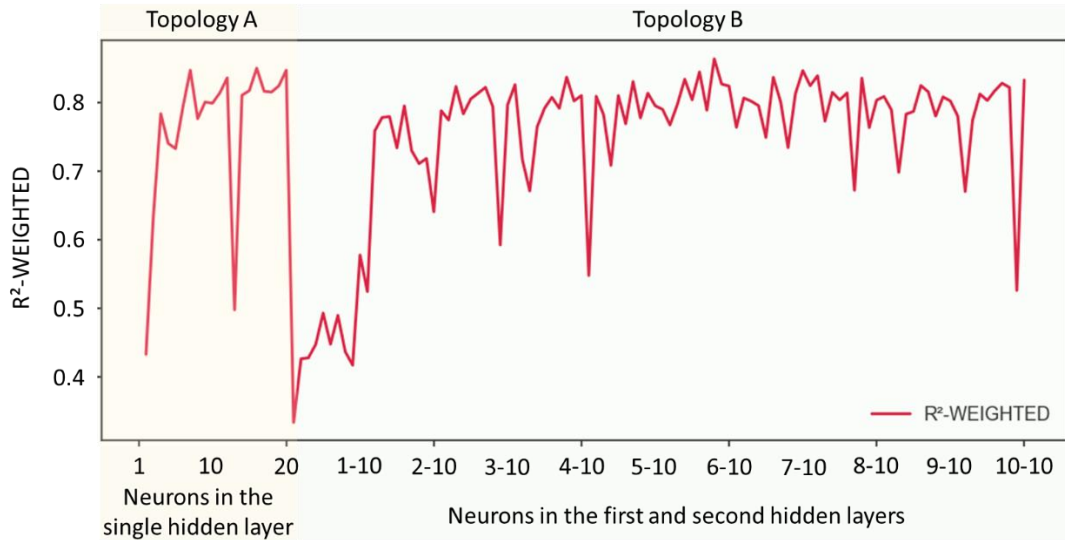


Figure 9. R^2 -WEIGHTED values for all individual ANNs.

Figure 9 compares the overall performance of all the networks, showing that ANNs with two layers and fewer than three neurons in the first layer, do not provide good mappings of concrete carbonation. Using these values, the five networks with the best R^2_{WEIGHTED} were defined, and their performance metrics are shown in Table 2 and Figures 10 and 11. The ANN's topology was described as [10-X-Y-1], in which 10 is the number of inputs for all the ANNs, X and Y are the number of neurons used in the first and second hidden layers, respectively, and 1 refers to the output.

Table 2: ANNs with the five highest R^2_{WEIGHTED} .

ANN TOPOLOGY	R^2 -WEIGHTED	R^2 -TRAIN	R^2 -TEST	RMSE	EVS
[10-6-8-1]	0.864	0.902	0.839	1.391	0.895
[10-7-1]	0.848	0.913	0.804	1.357	0.900
[10-20-1]	0.848	0.904	0.810	1.404	0.893
[10-7-10-1]	0.847	0.922	0.797	1.305	0.908
[10-6-6-1]	0.845	0.926	0.791	1.288	0.911

The five best individual ANN models provided average values of R^2 -TRAIN and R^2 -TEST of 0.913 and 0.808, respectively. Given the complexity, the number of variables involved in the phenomenon, and the heterogeneity of the dataset, these values indicate that the individual ANN models are effectively learning the patterns associated with concrete carbonation but cannot provide a generalization with the same level of accuracy. For example, the ANN [10-6-8-1], with the highest R^2 -WEIGHTED (0.864), obtained an R^2 -TRAIN of 0.902 with an R^2 -TEST of 0.839, indicating excellent training with moderate generalization.

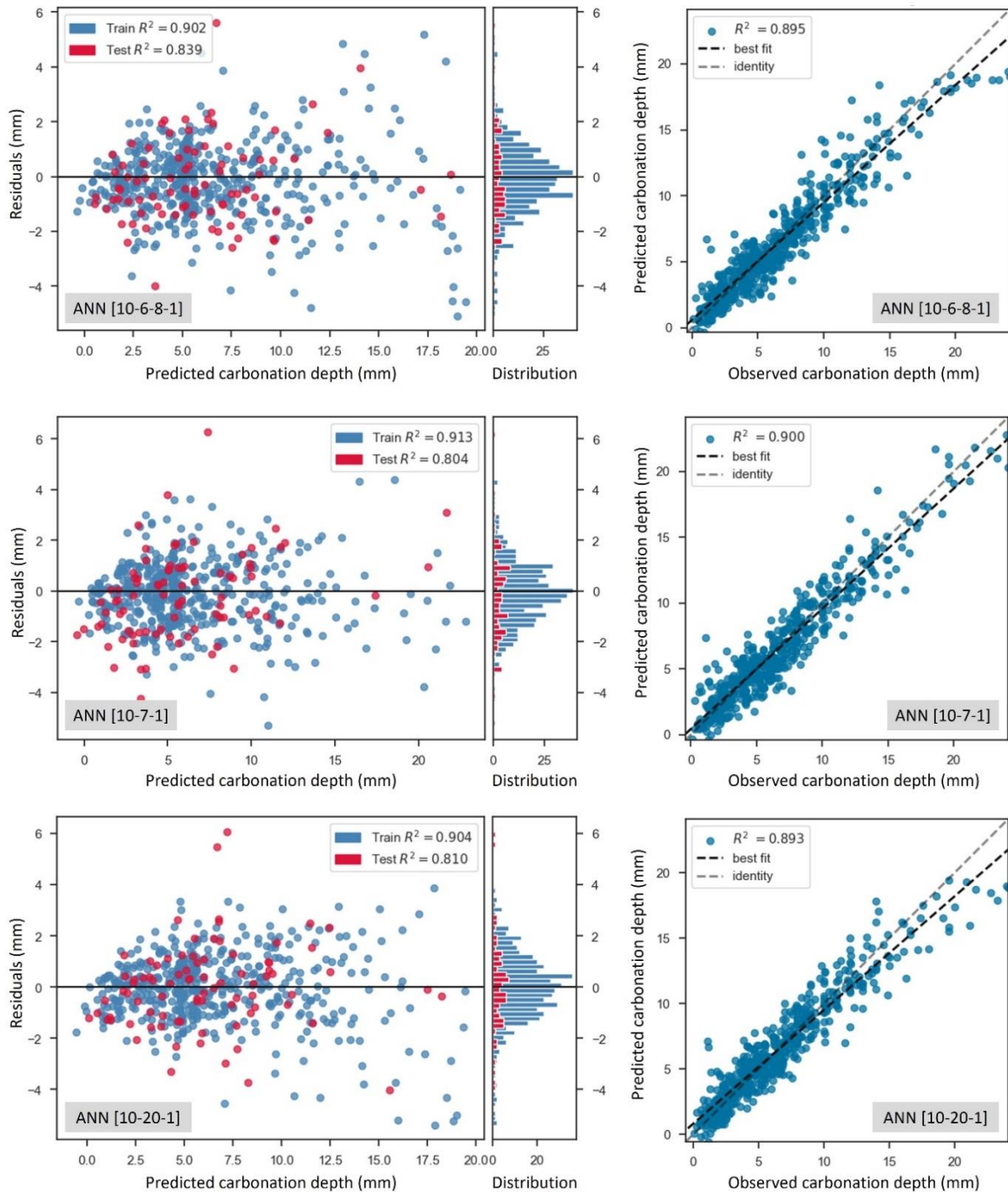


Figure 10. Residuals and performance plots of the ANNs [10-6-8-1], [10-7-1] and [10-20-1].

The imbalance between the R^2 values of the training and testing phases, with R^2 -TRAIN higher than R^2 -TEST, may indicate that the individual ANN models are overfitting or that the training dataset size is insufficient to generate models with a high generalization due to the phenomenon complexity and heterogeneity of the dataset. To improve the model's performance, focusing on its generalization and evaluating if the data could generate a model with high accuracy, the predictions of the five ANN models were used as input parameters to build an Ensemble ANN model, using the

Stacking fusion strategy and following the approach presented in section 2.4.

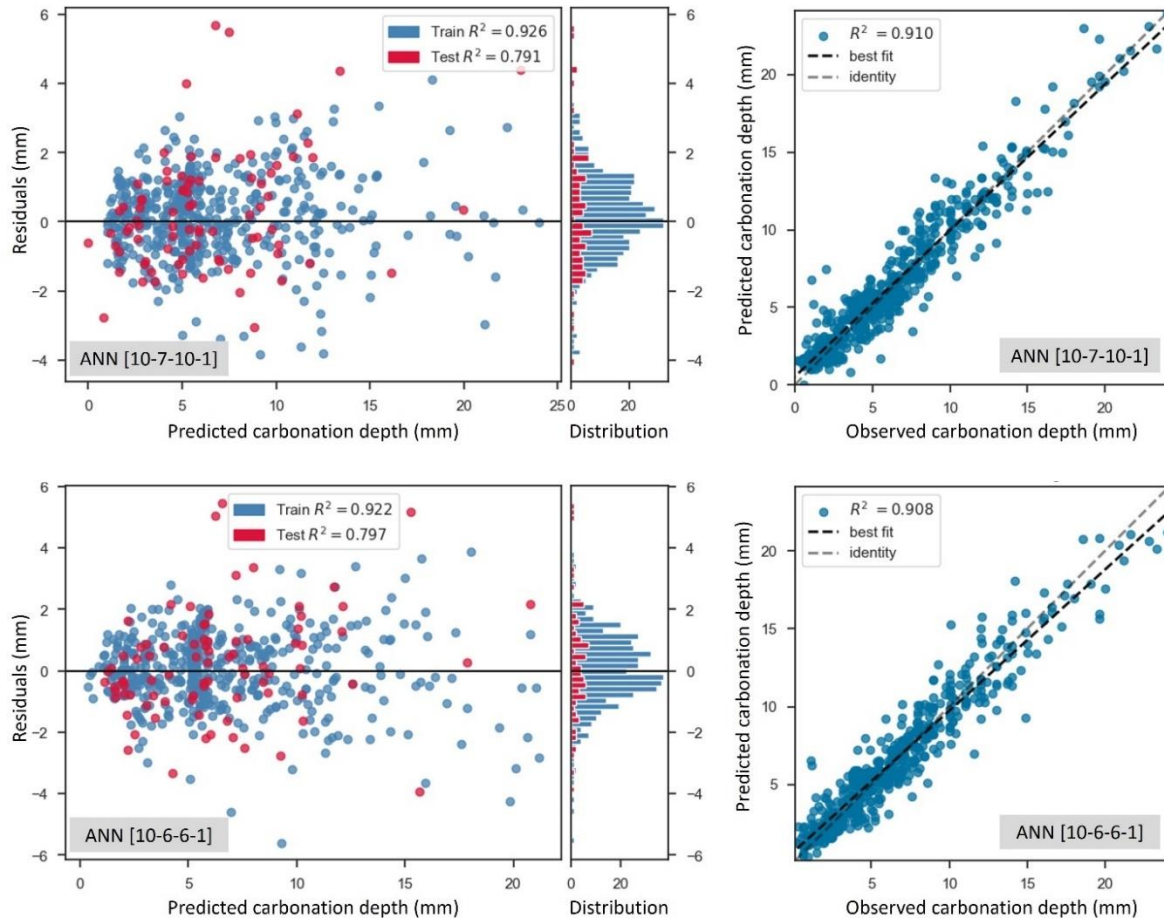


Figure 11. Residuals and performance plots of the ANNs [10-7-10-1] and [10-6-6-1].

3.2 Performance analysis of Stacking-Ensemble models

To build the Ensemble models, nine networks with diverse topologies, defined by a single hidden layer and varying numbers of neurons, were trained using the prediction outcomes of the five individual ANN models with the highest R^2 -WEIGHTED values, as indicated in Table 2.

Figure 12 shows the performance of the training and testing phases and the RMSE for all the Ensemble ANN models. The results show that regardless of the number of neurons used in the hidden layer, the Ensemble technique made it possible to balance the level of accuracy obtained in the training and testing phases, in which the difference between R^2 -TRAIN and R^2 -TEST was less than 4% for all models. Additionally, models with a better degree of generalization were produced using the Ensemble learning technique; their average R^2 -TEST of 0.907 was 12.25% higher than that obtained by the individual ANN models (0.808).

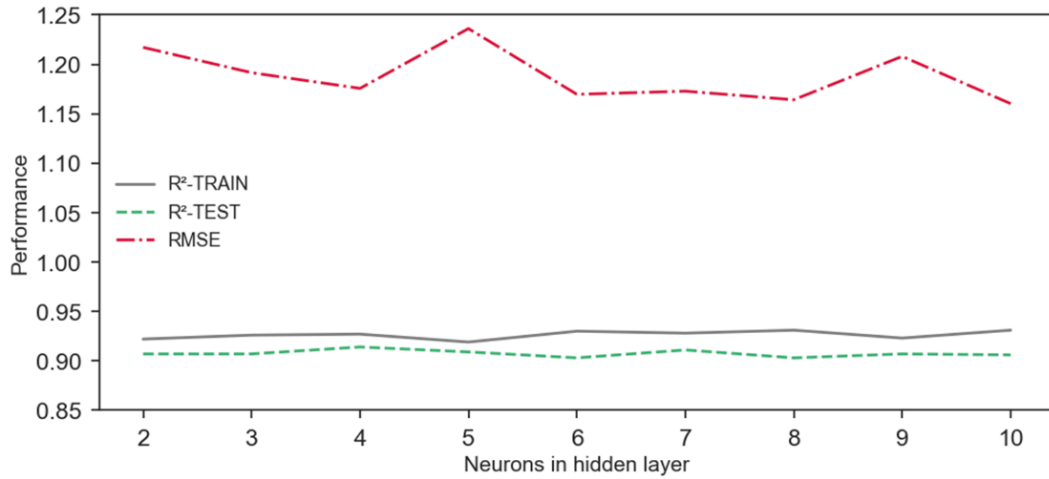


Figure 12. R^2 -TRAIN, R^2 -TEST, and RMSE of all Ensemble ANN models.

Equation 12 was used to obtain the R^2 -WEIGHTED values to establish the Ensemble model with the best performance. The best Ensemble model's R^2 -WEIGHTED value is 0.917, 9% higher than the maximum value obtained with the best individual ANN model, with the topology [10-6-8-1], as indicated by the results displayed in Figures 10 and 13. The best Ensemble model's R^2 -TEST value is 0.914, 9% higher than the value obtained with the best individual ANN model. The optimal Ensemble model's RMSE is 1.175 mm, 15.52% less than the RMSE produced by the best individual ANN.

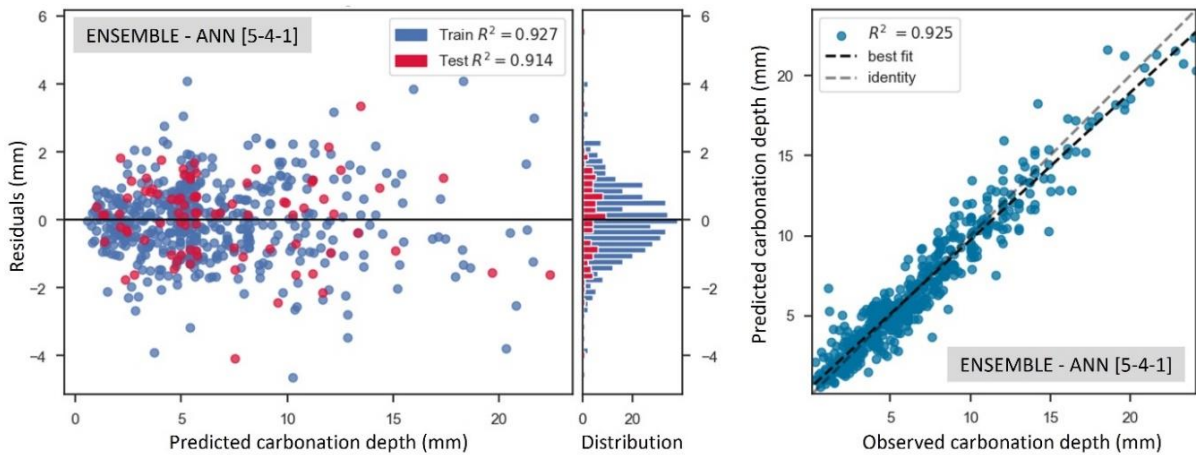


Figure 13. Residuals and overall performance of the best Ensemble model.

The Ensemble approach demonstrates a 14% increase in accuracy in predicting carbonation depth compared to individual ANN models. This suggests that Ensemble techniques have the potential to enhance the generalization of machine-learning models by balancing the accuracy levels of predictions during training and test stages. Recently, Li and Song [73] used the Stacking fusion strategy to generate an Ensemble

model to predict the compressive strength of rice husk ash concrete, and the results also showed that the procedure is efficient in enhancing the accuracy of machine-learning-based models. The results indicated that the Stacking model can properly fuse the base learners' prediction outcomes and improve the model's prediction property.

3.3 Importance and Parametric Analysis

The widespread adoption of Machine Learning models stems from their ability to adeptly capture intricate, nonlinear data relationships, thereby facilitating the development of robust forecasting methodologies. However, the opacity inherent in artificial neural network models occasionally leads to challenges in interpretation and an inability to quantify the influence of input variables on the output, especially with an Ensemble model. A sensitivity analysis was conducted to assess the significance of input features in addressing this limitation.

Feature importance of all the five individual ANNs was determined using the method proposed by Milne [74], which relies on synaptic weights, as depicted in Equation (13), and operates without making assumptions about the data's underlying characteristics. In this study, using the feature importance of each individual ANN model (inputs of the Ensemble model), an approach was established to assess the importance of each input parameter on the carbonation depth predictions by the Ensemble model, presented in Figure 14, considering the weighted average of the feature importance calculated for each individual ANN model (Equation 14).

$$Feature\ Importance = \frac{\sum_{k=1}^{n_{hidden}} \frac{w_{ji}}{\sum_{l=1}^{n_{feature}} |w_{jl}|} w_{oj}}{\sum_{k=1}^{n_{feature}} \left(\sum_{j=1}^{n_{hidden}} \left| \frac{w_{jk}}{\sum_{l=1}^{n_{feature}} |w_{jl}|} w_{oj} \right| \right)} \quad (13)$$

in which w_{ji} is a synaptic weight that connects input and hidden layers, w_{oj} is a synaptic weight that connects hidden and output layers, i, j , and k refer to the input layer neuron, $n_{feature}$ is the input neuron number, and n_{hidden} is the neurons in the hidden layer.

$$FEX_k = \sum_{m=1}^5 [FEX^m \cdot FEX_k^m] \quad (14)$$

in which FEX_k is the feature importance of a variable k in the Ensemble ANN model, FEX^m is the feature importance of the individual ANN model m in the assemble model, and FEX_k^m is the feature importance of the variable k in the individual ANN model m .

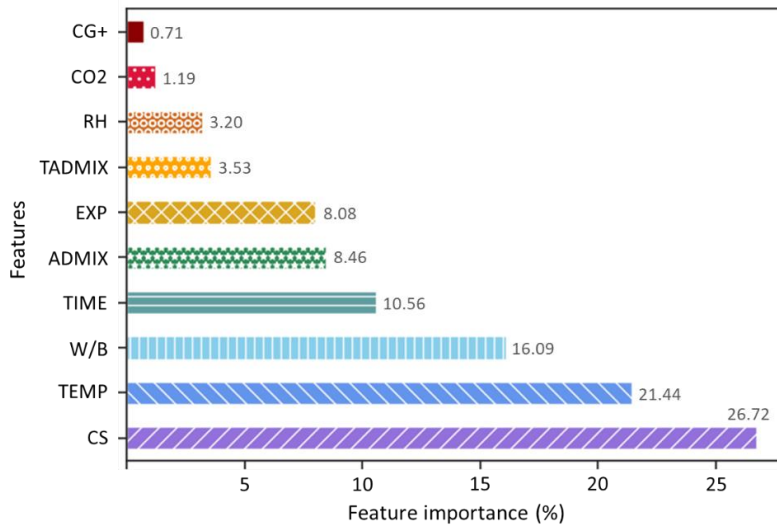


Figure 14. Feature importance of the Stacking-Ensemble model.

Based on the data shown in Figure 14, the water-binder ratio “W/B” (16.09%), annual average temperature “TEMP” (21.44%), compressive strength “CS” (26.72%), time of exposure “TIME” (10.56%), mineral admixture-cement proportion “ADMIX” (8.46%), and exposure condition “EXP” (8.08%) have each significantly impacted the Ensemble model’s performance. Combined, these features provided 91.35% of the accuracy predictions.

The findings highlight the need to consider the average environmental temperature as an input parameter when mapping the carbonation depth of concrete structures exposed to natural environments (with an importance level of 21.44%). These results are in line with the results of the DURACON project [38,39], where the authors demonstrated that analytical models failed to map the natural carbonation depth when considering concrete located in different microclimates, indicating the need to insert features that represent the different climatic conditions of the environments.

Recently, Majlesi et al. [40], which also used ANN modeling to study concrete carbonation of elements exposed only to natural environments, observed that the temperature and cumulative precipitation are the environmental features most important in mapping the phenomenon. A high temperature causes the concrete’s moisture content to decrease, which allows CO₂ to enter the cementitious material. The researchers also noted that increased precipitation accumulation lowers the carbonation depth of concrete by increasing relative humidity within the material.

Considering the model generated with carbonation data from concrete exposed to real degradation conditions, a parametric analysis was conducted to evaluate the relationship between the inputs associated with the weather conditions and the

carbonation depth. The analysis evaluated a concrete element made by a CEM I (with 95% clinker + gypsum proportion), without mineral admixture, with a compressive strength of 30 MPa, and 0.5 water/binder ratio. The following concrete environmental parameters were considered: it was outside and protected from the rain; the CO₂ content was equal to 430 parts per million; the relative humidity ranged from 60 to 85%; and the temperature ranged from 5 to 30 °C. The forecasts for the carbonation depth over a 50-year period are shown in Figures 15 and 16, respectively, and only consider temperature and relative humidity variations.

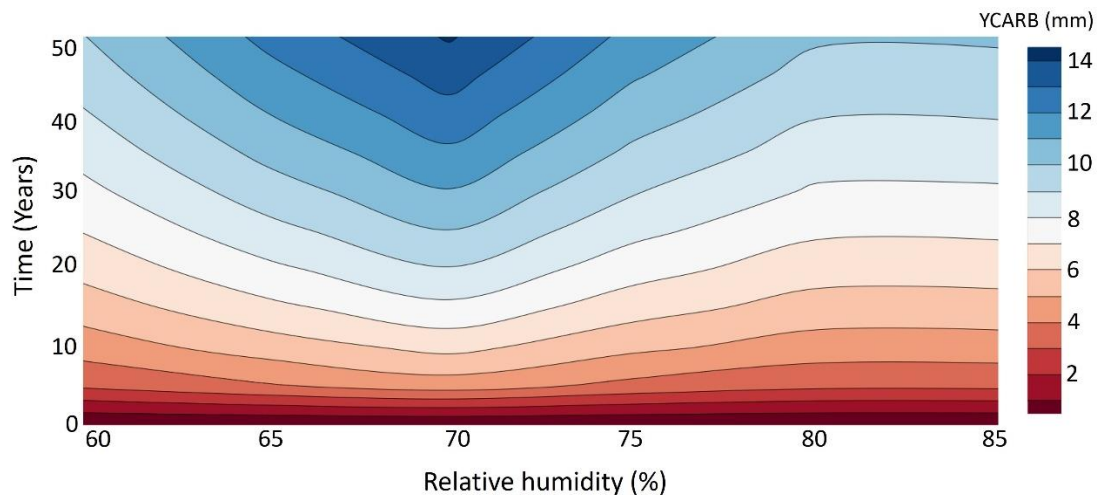


Figure 15. Carbonation depth over time as a function of the relative humidity.

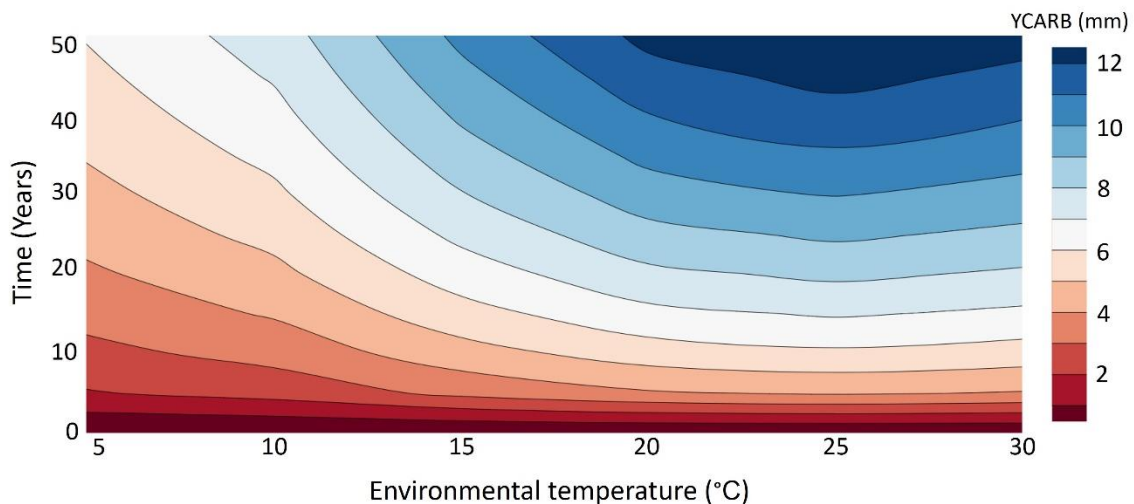


Figure 16. Carbonation depth over time as a function of the temperature.

Figure 15 brings up the relative humidity influences on the carbonation depth predictions, where it is clear to see that the carbonation peaks at roughly 70% of relative humidity. For Liu et al. [75] the carbonation of concrete was more significant when the relative humidity was within the range 60-80%. Possan et al. [76]. Silva et

al. [16], Papadakis et al. [27] and López-Arce et al. [77] pointed out that the carbonation depth reaches its maximum value when relative humidity lies between 50 and 70. Elsalamawy et al. [78] confirmed that the optimal humidity is within this interval and further elaborated that the relationship between carbonation depth and humidity is a polynomial function, the same behavior captured by the proposed Ensemble model, as shown in Figure 15. Thus, the findings indicated that the carbonation rate is maximum when humidity is close to 70%, regardless of the concrete age, according to the literature results.

Figure 16 shows that, like relative humidity, temperature has a non-linear relationship with carbonation depth, which can be mapped by a quadratic function. According to Xu et al. [79] the relationship between carbonation rate and temperature can be expressed by a quadratic function mapped by the proposed model. Xu et al. [79] pointed out that an optimum carbonation temperature in the range of 0 up to 100 °C varies for different supplementary cementitious materials. Emeline et al. [80] investigated the impact of temperature on carbonation in laboratory conditions using a device developed for this purpose. Two hardened cement pastes (CEM I and CEM V/A) were tested between 20 °C and 80 °C at different relative humidity values. The carbonation rate of the CEM I increased with temperature, whereas that of CEM V/A reached a maximum of around 50 °C.

At this point, it is important to consider that most studies investigating the effect of temperature on carbonation were performed in accelerated conditions, with the temperature and CO₂ concentration being artificially controlled. Thus, the values in Figure 16 indicated that the maximum carbonation occurs at temperatures between 20 and 30 °C, and a 5 °C variation in temperature results in a 6% variation in carbonation depth. The influence of environmental temperature highlights the need to carry out service life analyses during the design phase so that new structures can meet durability requirements in the face of climate change.

3.4 Comparison analysis

A comparison analysis was performed with other literature models to evaluate the model's applicability. Figure 17 shows the predictions of the carbonation depth obtained by the proposed model and the formulations of Vesikari [26] (Equation 3), Hamada [37] (Equation 5) and Possan [6] (Equation 7). The analysis used data not employed in the model's development regarding a real reinforced concrete structure in

service, exposed to natural degradation conditions, with 22 MPa (Figure 17.a) and 35 (Figure 17.b) years old. The structures, which have a 28-day compressive strength of 23.60 (Figure 16.a) and 21.59 MPa (Figure 16.b) and are situated in Brasília-DF, Brazil, where the average temperature is 21.9 °C, the average relative humidity is 60%, and the average CO₂ concentration is 0.035%, were constructed using Brazilian Portland cement, CP II F (equal to CEM II/A-L). All carbonation data pertains to concretes in outdoor environments, exposed to rain.

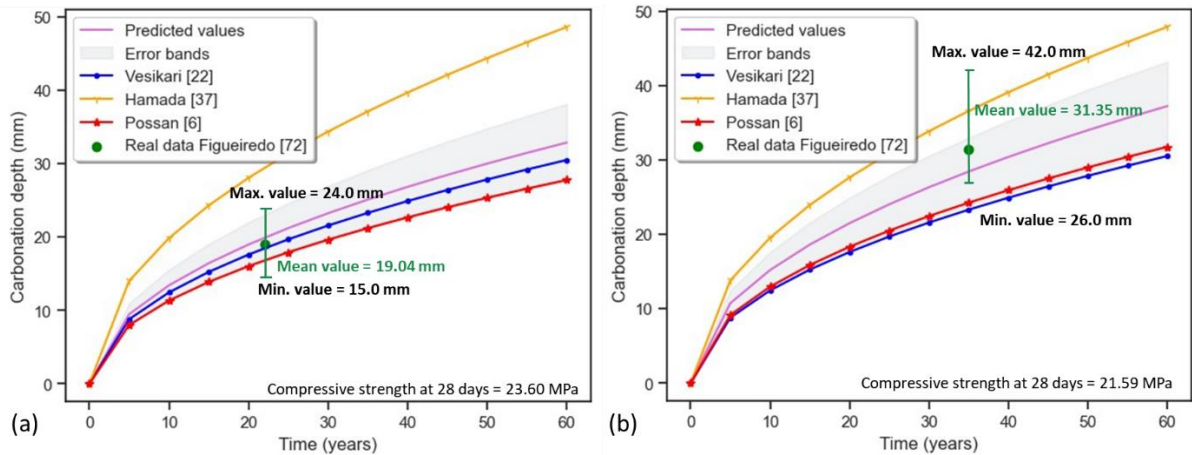


Figure 17. Residuals and overall performance of the Ensemble model.

Figure 17.a demonstrates that the proposed model, the Vesikari [26] and Possan [6] formulations are highly accurate in forecasting the average value of the carbonation depth measured for the 22-year-old structure, with percentage differences of less than 5%. However, when predicting the carbonation depth of the 35-year-old concrete structure (Figure 17.b), the proposed model was the only one that accomplished a percentage difference of less than 5% from the average value of the depths measured on site. On the other hand, the predictions proved by Hamada's [37] model (Equation 5) produced more cautious values, with depths roughly 30% greater than the measured values. Therefore, as expected, the model proposed in this work is more reliable in predicting the carbonation depth for older structures.

4 Conclusions

This research introduces a novel approach to enhancing the accuracy and applicability of artificial neural network models for forecasting concrete carbonation depth and assessing the long-term durability of concrete structures. The innovation involves integrating temperature effects and analyzing natural carbonation data from various geographical zones. Also, as a point of substantial innovation, this work investigates the potential of

applying Ensemble learning techniques, particularly the Stacking fusion strategy, to enhance the accuracy of predictions and model generalization.

Utilizing MLP-ANN reveals that the top five individual models exhibit average R^2 -TRAIN and R^2 -TEST values of 0.913 and 0.808, respectively. The ANN [10-6-8-1], with the highest R^2 -WEIGHTED (0.864), demonstrates excellent training performance (R^2 -TRAIN of 0.902) with moderate generalization (R^2 -TEST of 0.839).

The Stacking Ensemble modeling resulted in a 9% increase in generalization performance compared to the top individual ANN model [10-6-8-1], demonstrating a 14% gain in accuracy above individual ANN models. The optimal Ensemble model [5-4-1] produces a decreased RMSE of 1.175 mm, marking a notable enhancement of 15.52% compared to the RMSE produced by the standalone ANN [10-6-8-1]. Furthermore, the Ensemble technique helped balance the accuracy levels between the training and validation phases, with the difference between R^2 -TRAIN and R^2 -TEST being less than 4% for all models. The Stacking technique successfully reduced overfitting in individual ANN models, resulting in consistent performance on training and validation datasets.

Feature importance and parametric analysis highlight the substantial impact of temperature on the accuracy of predicting carbonation depth. The annual average temperature of the concrete exposure environment significantly influences the model's prediction capacity, accounting for 21.44% of its contribution.

The Stacking-Ensemble model showed significant improvements in accuracy, particularly for older structures. When applied to a 35-year-old concrete structure, the Ensemble model outperformed the other literature formulations, being the only one to maintain a percentage difference of less than 5% from the real measured carbonation depths. This indicates that the model is particularly reliable for older structures.

To promote widespread adoption and facilitate day-to-day usage by engineers, user-friendly software has been developed and is now available on the research group's website ([the link to access the software will be added here after the review stage to avoid exposing the authors' identities](#)). This platform simplifies the application of the model by providing practical and accessible durability assessments, enabling professionals to make well-informed decisions regarding maintenance strategies and design improvements efficiently.

5 Limitations of the work and future developments

Although the database was carefully prepared, the necessity to determine missing information from climatic databases, such as average yearly temperature and relative

humidity, creates uncertainty. Furthermore, calculating the compressive strength at 28 days based on strength data from advanced ages of the concrete may not precisely reflect the reality of the materials, which can impair the accuracy of the model's predictions.

To address the database's limitations, additional data is proposed to be acquired directly from concrete structures in natural environments, with careful monitoring of environmental variables throughout time. Future research could focus on developing a more comprehensive database and incorporating additional variables such as concrete porosity, water quality, and aggregate qualities to improve model accuracy. Creating hybrid models that include several machine learning techniques could also provide a more robust approach to forecasting carbonation in different environments, while enhanced ways of imputing missing data could improve prediction reliability.

Acknowledgments

This research was funded by the São Paulo Research Foundation (FAPESP) (Grant # 2023/04364-9). This study was also financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

REFERENCE

- [1] Z. Chen, J. Lin, K. Sagoe-Crentsil, W. Duan, Development of hybrid machine learning-based carbonation models with weighting function, *Constr Build Mater* 321 (2022) 126359. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.126359>.
- [2] N. Lippiatt, T.-C. Ling, S.-Y. Pan, Towards carbon-neutral construction materials: Carbonation of cement-based materials and the future perspective, *Journal of Building Engineering* 28 (2020) 101062. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2019.101062>.
- [3] M. Kazemian, B. Shafei, Carbon sequestration and storage in concrete: A state-of-the-art review of compositions, methods, and developments, *Journal of CO2 Utilization* 70 (2023) 102443. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2023.102443>.
- [4] F. Winnefeld, A. Leemann, A. German, B. Lothenbach, CO2 storage in cement and concrete by mineral carbonation, *Curr Opin Green Sustain Chem* 38 (2022) 100672. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2022.100672>.
- [5] Supriya, R. Chaudhury, U. Sharma, P.C. Thapliyal, L.P. Singh, Low-CO2 emission strategies to achieve net zero target in cement sector, *J Clean Prod* 417 (2023) 137466. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.137466>.
- [6] E. Possan, J.J.O. Andrade, D.C.C. Dal Molin, J.L.D. Ribeiro, Model to Estimate Concrete Carbonation Depth and Service Life Prediction, in: 2021: pp. 67–97. https://doi.org/10.1007/978-3-030-50998-9_4.
- [7] S.O. Ekolu, Model for practical prediction of natural carbonation in reinforced concrete: Part 1-formulation, *Cem Concr Compos* 86 (2018) 40–56. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2017.10.006>.
- [8] T.T.H. Nguyen, B. Bary, T. de Larrard, Coupled carbonation-rust formation-damage modeling and simulation of steel corrosion in 3D mesoscale reinforced

- concrete, *Cem Concr Res* 74 (2015).
<https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2015.04.008>.
- [9] H. Lee, H.-S. Lee, P. Suraneni, Evaluation of carbonation progress using AIJ model, FEM analysis, and machine learning algorithms, *Constr Build Mater* 259 (2020) 119703. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.119703>.
- [10] E.F. Felix, R. Carrazedo, E. Possan, Carbonation model for fly ash concrete based on artificial neural network: Development and parametric analysis, *Constr Build Mater* 266 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.121050>.
- [11] C.D. Atiş, Accelerated carbonation and testing of concrete made with fly ash, *Constr Build Mater* 17 (2003) 147–152. [https://doi.org/10.1016/S0950-0618\(02\)00116-2](https://doi.org/10.1016/S0950-0618(02)00116-2).
- [12] E. Rozière, A. Loukili, F. Cussigh, A performance based approach for durability of concrete exposed to carbonation, *Constr Build Mater* 23 (2009) 190–199.
<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2008.01.006>.
- [13] J.P. Balayssac, Ch.H. Détriché, J. Grandet, Effects of curing upon carbonation of concrete, *Constr Build Mater* 9 (1995) 91–95. [https://doi.org/10.1016/0950-0618\(95\)00001-V](https://doi.org/10.1016/0950-0618(95)00001-V).
- [14] M.D.A. Thomas, J.D. Matthews, Carbonation of fly ash concrete, *Magazine of Concrete Research* 44 (1992) 217–228.
<https://doi.org/10.1680/mac.1992.44.160.217>.
- [15] M.A. Peter, A. Muntean, S.A. Meier, M. Böhm, Competition of several carbonation reactions in concrete: A parametric study, *Cem Concr Res* 38 (2008) 1385–1393. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2008.09.003>.
- [16] A. Silva, R. Neves, J. de Brito, Statistical modelling of carbonation in reinforced concrete, *Cem Concr Compos* 50 (2014) 73–81.
<https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2013.12.001>.
- [17] N. Venkat Rao, T. Meena, A review on carbonation study in concrete, *IOP Conf Ser Mater Sci Eng* 263 (2017) 032011. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/263/3/032011>.
- [18] V.G. Papadakis, C.G. Vayenas, M.N. Fardis, A reaction engineering approach to the problem of concrete carbonation, *AIChE Journal* 35 (1989) 1639–1650.
<https://doi.org/10.1002/aic.690351008>.
- [19] M.A. Sanjuán, C. Andrade, M. Cheyrezy, Concrete carbonation tests in natural and accelerated conditions, *Advances in Cement Research* 15 (2003) 171–180. <https://doi.org/10.1680/adcr.2003.15.4.171>.
- [20] J. Jerga, Physico-mechanical properties of carbonated concrete, *Constr Build Mater* 18 (2004) 645–652. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2004.04.029>.
- [21] R.V. Silva, R. Neves, J. de Brito, R.K. Dhir, Carbonation behaviour of recycled aggregate concrete, *Cem Concr Compos* 62 (2015) 22–32.
<https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2015.04.017>.
- [22] C.-F. Chang, J.-W. Chen, The experimental investigation of concrete carbonation depth, *Cem Concr Res* 36 (2006) 1760–1767.
<https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2004.07.025>.
- [23] H. Torres, E. Correa, J.G. Castaño, F. Echeverría, Simplified Mathematical Model for Concrete Carbonation, *Journal of Materials in Civil Engineering* 29 (2017). [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0002001](https://doi.org/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002001).

- [24] O.P. Kari, J. Puttonen, E. Skantz, Reactive transport modelling of long-term carbonation, *Cem Concr Compos* 52 (2014).
<https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2014.05.003>.
- [25] H.G. Smolczyk, Carbonation and protection against steel corrosion, in: H.G. Smolczyk (Ed.), *Fifth International Symposium on the Chemistry of Cement: Admixtures and Special Cements*, Tokyo, 1968: pp. 396–384.
- [26] E. Vesikari, *Service life prediction of concrete structures with regard to corrosion of reinforcement*, Finland, 1988.
- [27] V.G. Papadakis, C.G. Vayenas, M.N. Fardis, *Fundamental Modeling and Experimental Investigation of Concrete Carbonation*, *ACI Mater J* 88 (1991).
<https://doi.org/10.14359/1863>.
- [28] C. Bob, E. Afana, On-site assessment of concrete carbonation, in: *Proceedings of the International Conference Failure of Concrete Structures*, RILEM, Bratislava, 1993: pp. 84–87.
- [29] L. Jiang, B. Lin, Y. Cai, A model for predicting carbonation of high-volume fly ash concrete, *Cem Concr Res* 30 (2000) 699–702.
[https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(00\)00227-1](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(00)00227-1).
- [30] X.-Y. Wang, Modeling of Hydration, Compressive Strength, and Carbonation of Portland-Limestone Cement (PLC) Concrete, *Materials* 10 (2017) 115.
<https://doi.org/10.3390/ma10020115>.
- [31] A. V. Saetta, R. V. Vitaliani, Experimental investigation and numerical modeling of carbonation process in reinforced concrete structures, *Cem Concr Res* 34 (2004) 571–579. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2003.09.009>.
- [32] O.P. Kari, J. Puttonen, E. Skantz, Reactive transport modelling of long-term carbonation, *Cem Concr Compos* 52 (2014) 42–53.
<https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2014.05.003>.
- [33] W.Z. Taffese, E. Sistonen, J. Puttonen, CaPrM: Carbonation prediction model for reinforced concrete using machine learning methods, *Constr Build Mater* 100 (2015) 70–82. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2015.09.058>.
- [34] E.F. Felix, E. Possan, Modeling the Carbonation Front of Concrete Structures in the Marine Environment through ANN, *IEEE Latin America Transactions* 16 (2018) 1772–1779. <https://doi.org/10.1109/TLA.2018.8444398>.
- [35] E.F. Felix, E. Possan, R. Carrazedo, Analysis of training parameters in the ANN learning process to mapping the concrete carbonation depth, *Journal of Building Pathology and Rehabilitation* 4 (2019). <https://doi.org/10.1007/s41024-019-0054-8>.
- [36] Z. Huo, L. Wang, Y. Huang, Predicting carbonation depth of concrete using a hybrid ensemble model, *Journal of Building Engineering* 76 (2023) 107320.
<https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2023.107320>.
- [37] Hamada M, Neutralization (Carbonation) of Concrete and Corrosion of Reinforcing Steel, in: *5th International Congress on the Chemistry of Cement, Proceeding of the 1969 International Symposium on the Chemistry of Cement*, 1968.
- [38] O. Trocónis de Rincón, Durability of concrete structures: DURACON, an iberoamerican project. Preliminary results, *Build Environ* 41 (2006) 952–962.
<https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2005.04.005>.
- [39] O.T. de Rincón, J.C. Montenegro, R. Vera, A.M. Carvajal, R.M. de Gutierrez, S. Del Vasto, E. Saborio, A. Torres-Acosta, J. Pérez-Quiroz, M. Martínez-Madrid,

- W. Martinez-Molina, E. Alonso-Guzmán, P. Castro-Borges, E.I. Moreno, F. Almeraya-Calderón, C. Gaona-Tiburcio, T. Pérez-López, M. Salta, A.P. de Melo, I. Martínez, N. Rebolledo, G. Rodríguez, M. Pedrón, V. Millano, M. Sánchez, E. de Partidas, Concrete Carbonation in Ibero-American Countries DURACON Project: Six-Year Evaluation, *CORROSION* 71 (2015) 546–555. <https://doi.org/10.5006/1385>.
- [40] A. Majlesi, H. Khodadadi Koodiani, O. Troconis de Rincon, A. Montoya, V. Millano, A.A. Torres-Acosta, B.C. Rincon Troconis, Artificial neural network model to estimate the long-term carbonation depth of concrete exposed to natural environments, *Journal of Building Engineering* 74 (2023) 106545. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2023.106545>.
- [41] E.F. Félix, I. da S. Falcão, L.G. dos Santos, R. Carrazedo, E. Possan, A Monte Carlo-Based Approach to Assess the Reinforcement Depassivation Probability of RC Structures: Simulation and Analysis, *Buildings* 13 (2023) 993. <https://doi.org/10.3390/buildings13040993>.
- [42] P.G. Asteris, V.G. Mokos, Concrete compressive strength using artificial neural networks, *Neural Comput Appl* 32 (2020) 11807–11826. <https://doi.org/10.1007/s00521-019-04663-2>.
- [43] I.-C. Yeh, Exploring Concrete Slump Model Using Artificial Neural Networks, *Journal of Computing in Civil Engineering* 20 (2006) 217–221. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0887-3801\(2006\)20:3\(217\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0887-3801(2006)20:3(217)).
- [44] L. Jin, T. Dong, T. Fan, J. Duan, H. Yu, P. Jiao, W. Zhang, Prediction of the chloride diffusivity of recycled aggregate concrete using artificial neural network, *Mater Today Commun* 32 (2022) 104137. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.104137>.
- [45] Z.H. Duan, S.C. Kou, C.S. Poon, Using artificial neural networks for predicting the elastic modulus of recycled aggregate concrete, *Constr Build Mater* 44 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2013.02.064>.
- [46] M. Adil, R. Ullah, S. Noor, N. Gohar, Effect of number of neurons and layers in an artificial neural network for generalized concrete mix design, *Neural Comput Appl* 34 (2022) 8355–8363. <https://doi.org/10.1007/s00521-020-05305-8>.
- [47] V.W.Y. Tam, A. Butera, K.N. Le, L.C.F. Da Silva, A.C.J. Evangelista, A prediction model for compressive strength of CO₂ concrete using regression analysis and artificial neural networks, *Constr Build Mater* 324 (2022) 126689. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.126689>.
- [48] I.K. Kang, T.Y. Shin, J.H. Kim, Observation-informed modeling of artificial neural networks to predict flow and bleeding of cement-based materials, *Constr Build Mater* 409 (2023) 133811. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.133811>.
- [49] E.F. Felix, E. Possan, R. Carrazedo, A New Formulation to Estimate the Elastic Modulus of Recycled Concrete Based on Regression and ANN, *Sustainability* 13 (2021) 8561. <https://doi.org/10.3390/su13158561>.
- [50] C. Lu, R. Liu, Predicting Carbonation Depth of Prestressed Concrete under Different Stress States Using Artificial Neural Network, *Advances in Artificial Neural Systems* 2009 (2009) 1–8. <https://doi.org/10.1155/2009/193139>.
- [51] H. Hafez, A. Teirelbar, R. Kurda, N. Tošić, A. de la Fuente, Pre-bcc: A novel integrated machine learning framework for predicting mechanical and durability

- properties of blended cement concrete, *Constr Build Mater* 352 (2022) 129019. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129019>.
- [52] S.N. Londhe, P.S. Kulkarni, P.R. Dixit, A. Silva, R. Neves, J. de Brito, Predicting carbonation coefficient using Artificial neural networks and genetic programming, *Journal of Building Engineering* 39 (2021) 102258. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2021.102258>.
- [53] Y. Kellouche, B. Boukhatem, M. Ghrici, A. Tagnit-Hamou, Exploring the major factors affecting fly-ash concrete carbonation using artificial neural network, *Neural Comput Appl* 31 (2019) 969–988. <https://doi.org/10.1007/s00521-017-3052-2>.
- [54] N.C. Concha, A robust carbonation depth model in recycled aggregate concrete (RAC) using neural network, *Expert Syst Appl* 237 (2024) 121650. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2023.121650>.
- [55] K.Y. Ann, S.W. Pack, J.P. Hwang, H.W. Song, S.H. Kim, Service life prediction of a concrete bridge structure subjected to carbonation, *Constr Build Mater* 24 (2010) 1494–1501. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2010.01.023>.
- [56] M.-T. Liang, R. Huang, S.-A. Fang, Carbonation service life prediction of existing concrete viaduct/bridge using time-dependent analysis, *J Mar Sci Technol* 21 (2013).
- [57] B. Yu, Z. Fang, Y. Gao, W. Yang, C. Wang, S. Zhou, Carbonation of supersulfated cement concrete after 8 years of natural exposure, *Cem Concr Compos* 142 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2023.105165>.
- [58] S. Rathnarajan, B.S. Dhanya, R.G. Pillai, R. Gettu, M. Santhanam, Carbonation model for concretes with fly ash, slag, and limestone calcined clay - using accelerated and five - year natural exposure data, *Cem Concr Compos* 126 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2021.104329>.
- [59] E. Liisma, S. Sein, M. Järvpõld, The influence of carbonation process on concrete bridges and durability in Estonian practice, *IOP Conf Ser Mater Sci Eng* 251 (2017). <https://doi.org/10.1088/1757-899X/251/1/012072>.
- [60] G.N. Malysz, R.M. Bosse, G. De Miranda Saleme Gidrão, L. Silvestro, D.C. Coitinho Dal Molin, A.B. Masuero, Service-life prediction of recycled coarse aggregate concrete under natural carbonation: A time-dependent reliability analysis, *Constr Build Mater* 387 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.131632>.
- [61] A.B. Ribeiro, T. Santos, A. Gonçalves, Performance of concrete exposed to natural carbonation: Use of the k-value concept, *Constr Build Mater* 175 (2018) 360–370. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.04.206>.
- [62] Q. Huy Vu, G. Pham, A. Chonier, E. Brouard, S. Rathnarajan, R. Pillai, R. Gettu, M. Santhanam, F. Aguayo, K.J. Folliard, M.D. Thomas, T. Moffat, C. Shi, A. Sarnot, Impact of different climates on the resistance of concrete to natural carbonation, *Constr Build Mater* 216 (2019) 450–467. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.04.263>.
- [63] S.K. De Melo, CARBONATAÇÃO NATURAL DE CONCRETOS COM ADIÇÕES MINERAIS AO LONGO DE 20 ANOS: Retenção de água livre e o avanço da frente de carbonatação, Master, Universidade Federal de Goiás, 2022.

- [64] F. Lollini, E. Redaelli, Carbonation of blended cement concretes after 12 years of natural exposure, *Constr Build Mater* 276 (2021) 122122. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.122122>.
- [65] M. Collepardi, S. Collepardi, J.J.O. Olagot, F. Simonelli, The influence of slag and fly ash on the carbonation of concrete, in: Eighth CANMET/ACI Int. Conf. on Fly Ash, Silica Fume, Slag, and Natural Pozzolans in Concrete. Proceedings ACI SP-221-29. Las Vegas, Nevada, USA, Citeseer, 2004: pp. 23--29.
- [66] Dados Mundiais, Data of Temperature and Relative Humidity, <https://www.dadosmundiais.com/> (2023).
- [67] Associação Brasileira de normas Técnicas, NBR 6118: Projeto de Estruturas de Concreto - Procedimento, Rio de Janeiro, 2014.
- [68] T.A. da C. Almeida, E.F. Felix, C.M.A. de Sousa, G.O.M. Pedroso, M.F.B. Motta, L.P. Prado, Influence of the ANN Hyperparameters on the Forecast Accuracy of RAC's Compressive Strength, *Materials* 16 (2023) 7683. <https://doi.org/10.3390/ma16247683>.
- [69] H. Ling, C. Qian, W. Kang, C. Liang, H. Chen, Combination of Support Vector Machine and K-Fold cross validation to predict compressive strength of concrete in marine environment, *Constr Build Mater* 206 (2019) 355–363. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.02.071>.
- [70] Z. Lyu, Y. Yu, B. Samali, M. Rashidi, M. Mohammadi, T.N. Nguyen, A. Nguyen, Back-Propagation Neural Network Optimized by K-Fold Cross-Validation for Prediction of Torsional Strength of Reinforced Concrete Beam, *Materials* 15 (2022) 1477. <https://doi.org/10.3390/ma15041477>.
- [71] K. Sechidis, G. Tsoumakas, I. Vlahavas, On the Stratification of Multi-label Data, in: 2011: pp. 145–158. https://doi.org/10.1007/978-3-642-23808-6_10.
- [72] A. Krogh, What are artificial neural networks?, *Nat Biotechnol* 26 (2008) 195–197. <https://doi.org/10.1038/nbt1386>.
- [73] Q. Li, Z. Song, Prediction of compressive strength of rice husk ash concrete based on stacking ensemble learning model, *J Clean Prod* 382 (2023) 135279. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.135279>.
- [74] L. Milne, Feature selection using neural networks with contribution measures, in: Eighth Australian Joint Conference on Artificial Intelligence, AI'95, Canberra, Australia, 1995: pp. 1–9.
- [75] P. Liu, Y. Chen, Z. Yu, Effects of temperature, relative humidity and carbon dioxide concentration on concrete carbonation, *Magazine of Concrete Research* 72 (2020) 936–947. <https://doi.org/10.1680/jmacr.18.00496>.
- [76] E. Possan, W.A. Thomaz, G.A. Aleandri, E.F. Felix, A.C.P. dos Santos, CO₂ uptake potential due to concrete carbonation: A case study, *Case Studies in Construction Materials* 6 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2017.01.007>.
- [77] P. López-Arce, L.S. Gómez-Villalba, S. Martínez-Ramírez, M. Álvarez de Buergo, R. Fort, Influence of relative humidity on the carbonation of calcium hydroxide nanoparticles and the formation of calcium carbonate polymorphs, *Powder Technol* 205 (2011) 263–269. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.09.026>.
- [78] M. Elsalamawy, A.R. Mohamed, E.M. Kamal, The role of relative humidity and cement type on carbonation resistance of concrete, *Alexandria Engineering Journal* 58 (2019) 1257–1264. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2019.10.008>.

- [79] Z. Xu, Z. Zhang, J. Huang, K. Yu, G. Zhong, F. Chen, X. Chen, W. Yang, Y. Wang, Effects of temperature, humidity and CO₂ concentration on carbonation of cement-based materials: A review, *Constr Build Mater* 346 (2022) 128399. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.128399>.
- [80] E. Drouet, S. Poyet, P. Le Bescop, J.-M. Torrenti, X. Bourbon, Carbonation of hardened cement pastes: Influence of temperature, *Cem Concr Res* 115 (2019) 445–459. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2018.09.019>.

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A modelagem do processo de carbonatação é um processo complexo que envolve muitas variáveis. A literatura disponível apresenta uma grande variedade de dados, entretanto, grande parte dos dados tratam de experimentos de carbonatação acelerada, que em geral não representam o fenômeno da mesma forma que dados de carbonatação natural. Um grande desafio do presente trabalho reside na coleta e uso de dados exclusivamente de carbonatação de estruturas expostas a condições naturais de degradação.

A base de dados foi construída com 894 dados. As diversas fontes possibilitaram a formação de uma base de dados bastante abrangente, constando diversas condições climáticas de nove países diferentes (Brasil, Canada, China, Estônia, EUA, França, Índia, Portugal e Taiwan). Em alguns casos, fez-se necessário ajustar as informações associadas aos parâmetros de entrada do modelo, visto que as fontes dos dados não as informavam, como dados de umidade relativa do ambiente e temperatura média anual.

Com a base de dados construída e analisada, passou-se ao desenvolvimento das modelagens com as técnicas usuais de aprendizado de máquina. Neste trabalho foram consideradas as RNAs do tipo MLP e Florestas Aleatórias. Ao todo foram realizadas 120 modelagens com redes neurais artificiais, considerando redes com uma ou duas camadas de processamento, contendo no máximo 20 neurônios nas camadas ocultas. Para as florestas, foram treinadas e avaliadas 99 configurações distintas de modelos, considerando de florestas compostas de 2 a 100 árvores.

O modelo com floresta de melhor performance, gerado com 89 árvores, obteve valores de coeficiente de determinação R^2 de 0.970 no treinamento e 0.787 no teste, com raiz do erro médio quadrático (RMSE) geral de 1.14 mm. Já com as RNAs, o modelo que gerou as melhores performances foi a rede com duas camadas ocultas, com seis neurônios na primeira camada e oito na segunda, rede [10-6-8-1]. A rede [10-6-8-1] configurou R^2 de treinamento de 0.902 e R^2 de teste de 0.839. Os resultados mostram que independentemente do método de aprendizado de máquina usado, há um desbalanceamento entre as performances de treinamento e teste dos modelos, indicando que as técnicas estão sofrendo um supertreinamento. Ademais, os resultados mostram que é mediana a capacidade de generalização dos modelos individuais de machine learning gerados.

Dando continuidade aos desenvolvimentos, e considerando o objetivo principal do trabalho, foi realizado o acoplamento de modelos individuais de RNAs, considerando as predições das cinco melhores redes, mediante estratégia de fusão ensemble Stacking. A combinação desses cinco modelos resultou em uma aprimoração na generalização e na precisão preditiva. A abordagem Ensemble proporcionou um aumento de 9% no desempenho de generalização em comparação com o melhor modelo de RNA individual, demonstrando um aprimoramento de 14% na precisão em relação aos modelos individuais. Isso destaca a eficácia das técnicas de conjunto em melhorar o desempenho geral do modelo, aproveitando as vantagens dos modelos individuais enquanto mitigam suas limitações.

Os resultados da análise de importância, conduzido com o melhor modelo Ensemble, enfatizam a importância da análise de significância dos fatores na precisão da predição da profundidade de carbonatação, com destaque para o impacto substancial da temperatura. Observou-se que a temperatura média anual do ambiente de exposição do concreto exerce uma influência significativa na capacidade preditiva do modelo, contribuindo com 21,44% para o desempenho do modelo.

O modelo Ensemble demonstrou melhorias significativas em termos de acurácia nas predições, especialmente quando da avaliação de estruturas mais antigas. Ao avaliar uma estrutura com 35 anos de serviço, o modelo Ensemble superou formulações disponíveis na literatura, sendo o único capaz de manter uma diferença percentual inferior a 5% em relação às profundidades de carbonatação obtidas nas mensurações realizadas in loco.

Visando a ampla adoção e a facilidade de uso diário por engenheiros, um aplicativo WEB foi desenvolvido e está disponível no site do grupo de pesquisa DASMAE. Esta plataforma simplifica a aplicação do modelo, proporcionando avaliações práticas e acessíveis de durabilidade, permitindo que os profissionais tomem decisões bem-informadas sobre estratégias de manutenção e melhorias de projeto de forma eficiente.

4.1 LIMITAÇÕES DO TRABALHO

Um desafio significativo enfrentado neste trabalho foi a confiabilidade dos dados utilizados para treinar os modelos de aprendizado de máquina. Embora a base de dados tenha sido cautelosamente compilada, a necessidade de determinar

informações ausentes, como temperatura média anual e umidade relativa, a partir de bancos de dados climáticos, introduz incertezas. Além disso, a estimativa da resistência à compressão aos 28 dias com base em valores de resistência efetiva do concreto pode não refletir com precisão a realidade dos materiais, o que pode comprometer a exatidão das previsões.

O processo de seleção das variáveis de entrada é crítico para a modelagem, e embora tenham sido escolhidos dez parâmetros principais, é possível que outras variáveis importantes tenham sido negligenciadas. A composição do aglomerante, o projeto da mistura de concreto e as condições ambientais são fatores complexos e interdependentes que podem não ter sido completamente capturados pelos parâmetros escolhidos, limitando o alcance e a precisão do modelo.

Ao utilizar o modelo definido, é fundamental que ele seja aplicado dentro do domínio de validade dos parâmetros de entrada. A resistência à compressão deve estar entre 15 e 84 MPa, e a proporção de clínquer e gesso no cimento deve variar entre 65% e 97,5%. O modelo é adequado apenas para concretos sem adições ou com adições de até 45% do consumo de cimento, utilizando cinza volante, fíler, escória de alto forno ou outros materiais pozzolânicos. Além disso, o modelo considera ambientes com concentrações de CO₂ entre 0,01% e 0,046%, umidades relativas entre 50% e 90%, e temperaturas médias entre 5,9°C e 30,5°C. A relação água-material ligante deve estar entre 0,27 e 0,70, e as previsões são válidas para estruturas com até 60 anos de idade. Fora desses intervalos, a margem de erro de 13% (para mais ou para menos) não pode ser aplicada, e a confiabilidade do modelo não é garantida.

4.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Melhoria da Coleta de Dados: para superar as limitações da base de dados, recomenda-se a coleta de dados adicionais diretamente de estruturas de concreto em ambientes naturais, com monitoramento mais detalhado das condições ambientais ao longo do tempo. Estudos futuros poderiam focar na criação de uma base de dados mais robusta e confiável, que inclua medições reais das variáveis ambientais e mecânicas dos materiais ao longo de diferentes períodos de exposição.

Incorporação de Novas Variáveis: considerando a complexidade do processo de carbonatação, futuros estudos poderiam explorar a inclusão de variáveis

adicionais que possam influenciar o processo, como a porosidade do concreto, a qualidade da água utilizada na mistura, e as características específicas dos agregados. A inclusão dessas variáveis poderia melhorar a precisão e a aplicabilidade dos modelos desenvolvidos.

Desenvolvimento de Modelos Híbridos: dado que diferentes tipos de variáveis e condições de exposição influenciam a profundidade de carbonatação, o desenvolvimento de modelos híbridos que combinem diferentes técnicas de aprendizado de máquina, ou que integrem métodos estatísticos com abordagens de machine learning, pode oferecer uma abordagem mais robusta e adaptável para prever a carbonatação em diferentes cenários.

Aperfeiçoamento das Técnicas de Preenchimento de Dados Ausentes: futuras pesquisas poderiam se concentrar no desenvolvimento de métodos mais sofisticados para o preenchimento de dados ausentes, como o uso de redes neurais generativas ou outros métodos de imputação avançados. Esses métodos poderiam reduzir a incerteza introduzida pela estimativa de variáveis cruciais, melhorando a confiabilidade dos modelos.

REFERÊNCIAS

- AGGARWAL, C. C. *Neural Networks and Deep Learning*. Cham: Springer International Publishing, 2018.
- AİTCIN, P. C. *Concreto de alto desempenho*. 1. ed. São Paulo: Pini, 2000.
- AKPINAR, P.; UWANUAKWA, F. I. D. Intelligent prediction of concrete carbonation depth using neural networks. *Bulletin of the Transilvania University of Brasov*, v. 9, n. 58, p. 99–108, 2016.
- AL-AMEERI, A. S. et al. Impact of climate change on the carbonation in concrete due to carbon dioxide ingress: Experimental investigation and modelling. *Journal of Building Engineering*, v. 44, 1 dez. 2021.
- ANDRADE, C. *Manual para diagnóstico de obras deterioradas por corrosão de armaduras*. 1992.
- ANN, K. Y. et al. Service life prediction of a concrete bridge structure subjected to carbonation. *Construction and Building Materials*, v. 24, n. 8, p. 1494–1501, ago. 2010.
- ARANHA, P. M. *Manual para diagnóstico de obras deterioradas por corrosão de armaduras*. Dissertação (Mestrado em Engenharia)—Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1994.
- BATISTA, M. F. *Estudo da carbonatação natural de concretos com diferentes adições minerais após 10 anos de exposição*. Dissertação de Mestrado—Goiânia: Universidade Federal de Goiás, 2013.
- BISWAS, R. et al. Development of hybrid models using metaheuristic optimization techniques to predict the carbonation depth of fly ash concrete. *Construction and Building Materials*, v. 346, 5 set. 2022.
- BOB, C.; AFANA, E. Proceedings of the internacional conference failure of concrete structures. On-site assessment of concrete carbonation , p. 84–87, 1993.
- CARMONA, A.; MAREGA, A. Retrospectiva da patologia no brasil; estudo estatístico. *Jornadas en español y portugués sobre estructuras y materiales*, p. 325–348, 1988.
- CASCUDO, O.; CARASEK, H. Ação da carbonatação no concreto. *IBRACON*, p. 850–885, 2011.
- CONCHA, N. C. A robust carbonation depth model in recycled aggregate concrete (RAC) using neural network. *Expert Systems with Applications*, v. 237, 1 mar. 2024.
- DADOS MUNDIAIS. Data of Temperature and Relative Humidity.
- DAL MOLIN, D. C. C. *Fissuras em estruturas de concreto armado: análise das manifestações típicas e levantamento de casos ocorridos no Estado do Rio Grande do Sul*. Dissertação (Mestrado em Engenharia)—Porto Alegre: Universidade Federal

do Rio Grande do Sul, 1988.

DE MELO, S. K. CARBONATAÇÃO NATURAL DE CONCRETOS COM ADIÇÕES MINERAIS AO LONGO DE 20 ANOS: Retenção de água livre e o avanço da frente de carbonatação. Master—Goiânia: Universidade Federal de Goiás, 2022.

EHE, I. DE H. E. Comisión Permanente del Hormigón. Madri, EspanhaMinistério de obras públicas e urbanismo, , 2008.

EKOLU, S. O. Model for practical prediction of natural carbonation in reinforced concrete: Part 1-formulation. Cement and Concrete Composites, v. 86, p. 40–56, 1 fev. 2018.

FELIX, E. F. Modelagem da deformação do concreto armado devido à formação dos produtos de corrosão. Dissertação de Mestrado—São Carlos: Universidade de São Paulo, 2018.

FELIX, E. F.; CARRAZEDO, R.; POSSAN, E. Análise paramétrica da carbonatação em estruturas de concreto armado via Redes Neurais Artificiais. Revista ALCONPAT, v. 7, n. 3, p. 302–316, 29 set. 2017.

FELIX, E. F.; CARRAZEDO, R.; POSSAN, E. Carbonation model for fly ash concrete based on artificial neural network: Development and parametric analysis. Construction and Building Materials, v. 266, 10 jan. 2021.

FELIX, E. F.; POSSAN, E. Modeling carbonation of concrete structures in the marine environment through artificial neural networks. IEEE Latin America Transactions, v. 16, n. 6, p. 1772–1779, 1 jun. 2018.

FELIX, E. F.; POSSAN, E.; CARRAZEDO, R. Analysis of training parameters in the ANN learning process to mapping the concrete carbonation depth. Journal of Building Pathology and Rehabilitation, v. 4, n. 1, 1 dez. 2019.

FERREIRA, R. M.; JALALI, S. Software for probability-based durability analysis of concrete structures. Concrete Repair, Rehabilitation and Retrofitting, 2006.

FONSECA, G. C. DA. Adições minerais e as disposições normativas relativas à produção de concreto no Brasil: uma abordagem epistêmica. Dissertação de Mestrado—Belo Horizonte: Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.

HAMADA, M. Neutralization (carbonation) of concrete and corrosion of reinforcing steel. p. 343–369, 1968.

HAN, J. et al. Effects of crack and ITZ and aggregate on carbonation penetration based on 3D micro X-ray CT microstructure evolution. Construction and Building Materials, v. 128, p. 256–271, 15 dez. 2016.

HELENE, P. R. L. Corrosão das Armaduras em Concreto Armado. 1981.

HELENE, P. R. L. Contribuição ao estudo da corrosão em armaduras de concreto armado. 1993.

HERTZMANN, A.; FLEET, D. Machine Learning and Data Mining. Toronto Computer Science Department, University of Toronto, , 2012.

HOUST, Y. F.; WITTMANN, F. H. Depth profiles of carbonates formed during natural carbonation. p. 1923–1930, 2002.

HUO, Z.; WANG, L.; HUANG, Y. Predicting carbonation depth of concrete using a hybrid ensemble model. Journal of Building Engineering, v. 76, 1 out. 2023.

HUY VU, Q. et al. Impact of different climates on the resistance of concrete to natural carbonation. Construction and Building Materials, v. 216, p. 450–467, 20 ago. 2019.

HYVERT, N. Application de l'approche probabiliste à la durabilité des produits préfabriqués en béton. Thèse de doctorat—Toulouse: Université Paul Sabatier, 2009.

ISAIA, G. C. Carbonatação do concreto: uma revisão. São José dos Campos, 1999.

ISGOR, O. B.; RAZAQPUR, A. G. Finite element modeling of coupled heat transfer, moisture transport and carbonation processes in concrete structures. Cement and Concrete Composites, v. 26, n. 1, p. 57–73, jan. 2004.

KUMAR, M. et al. A hybrid model based on convolution neural network and long short-term memory for qualitative assessment of permeable and porous concrete. Case Studies in Construction Materials, v. 19, 1 dez. 2023.

KUNAL TONGARIA, K. T.; S.MANDAL, S. M.; DEVENDRA MOHAN, D. M. A Review on Carbonation of Concrete and Its Prediction Modelling. Journal of Environmental Nanotechnology, v. 7, n. 4, p. 75–90, 2018.

LIANG, M.-T.; HUANG, R.; FANG, S.-A. Carbonation service life prediction of existing concrete viaduct/bridge using time-dependent analysis. Journal of Marine Science and Technology, v. 21, n. 1, 2013.

LIISMA, E.; SEIN, S.; JÄRVPÖLD, M. The influence of carbonation process on concrete bridges and durability in Estonian practice. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, v. 251, out. 2017.

LIU, K. et al. Prediction of carbonation depth for recycled aggregate concrete using ANN hybridized with swarm intelligence algorithms. Construction and Building Materials, v. 301, 27 set. 2021.

LIU, P.; YU, Z.; CHEN, Y. Carbonation depth model and carbonated acceleration rate of concrete under different environment. Cement and Concrete Composites, v. 114, 1 nov. 2020.

LU, C.; LIU, R. Predicting Carbonation Depth of Prestressed Concrete under Different Stress States Using Artificial Neural Network. Advances in Artificial Neural Systems, v. 2009, p. 1–8, 22 fev. 2009.

LUO, D.; NIU, D.; DONG, Z. Application of Neural Network for Concrete Carbonation

Depth Prediction. 4th International Conference on the Durability of Concrete Structures, 2014a.

LUO, D.; NIU, D.; DONG, Z. Application of Neural Network for Concrete Carbonation Depth Prediction. 2014b.

MAJLESI, A. et al. Artificial neural network model to estimate the long-term carbonation depth of concrete exposed to natural environments. *Journal of Building Engineering*, v. 74, p. 106545, set. 2023.

MALAMI, S. I. et al. Implementation of hybrid neuro-fuzzy and self-turning predictive model for the prediction of concrete carbonation depth: A soft computing technique. *Results in Engineering*, v. 10, 1 jun. 2021.

MALYSZ, G. N. et al. Service-life prediction of recycled coarse aggregate concrete under natural carbonation: A time-dependent reliability analysis. *Construction and Building Materials*, v. 387, 17 jul. 2023.

MARTINS, C. A. C. Estimativa da profundidade de carbonatação do concreto com o uso de redes neurais. Dissertação de Mestrado—Recife: Universidade Católica de Pernambuco, 2011.

MEHTA, P. K.; MONTEIRO, P. J. M. *Concreto: microestrutura, propriedades e materiais*. 2 ed ed. São Paulo: IBRACON, 2008.

MEIRA, G. R.; PADARATZ, I. J.; BORBA JUNIOR, J. C. Carbonatação natural de concretos: resultados de cerca de quatro anos de monitoramento. XI Encontro nacional de tecnologia do ambiente construído - ENTAC, 2006.

MI, R.; PAN, G.; SHEN, Q. Carbonation modelling for cement-based materials considering influences of aggregate and interfacial transition zone. *Construction and Building Materials*, v. 229, 30 dez. 2019.

MINEU, N. L. Otimização evolucionária multimodal de redes neurais artificiais para composição de ensembles. Dissertação de Mestrado—Recife: Universidade Federal de Pernambuco, 2011.

MORINAGA, S. Prediction of Service Life of Reinforced Concrete Buildings Based on Rate of Corrosion of Reinforcing Steel. 5th International Conference: Durability of Building Materials, p. 5–16, 1990.

NUNEZ, I.; NEHDI, M. L. Machine learning prediction of carbonation depth in recycled aggregate concrete incorporating SCMs. *Construction and Building Materials*, v. 287, 14 jun. 2021.

PAPADAKIS, V. G.; VAYENAS, C. G.; FARDIS, M. N. Fundamental Modeling and Experimental Investigation of Concrete Carbonation. *ACI Materials Journal*, v. 88, n. 4, 1991.

PARROTT, L. J. A review of carbonation in reinforced concrete. 1987.

PAULETTI, C. Estimativa da carbonatação natural de materiais cimentícios a partir de ensaios acelerados e de modelos de predição. Tese de Doutorado —Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009.

PAULETTI, C.; POSSAN, E.; DAL MOLIN, D. C. C. Carbonatação acelerada: estado da arte das pesquisas no Brasil. p. 7–20, 2007.

PENG, J. et al. Numerical Simulation on Carbonation Depth of Concrete Structures considering Time- and Temperature-Dependent Carbonation Process. *Advances in Materials Science and Engineering*, v. 2018, 2018.

POSSAN, E. Modelagem da carbonatação e previsão de vida útil de estruturas de concreto em ambiente urbano. Tese de Doutorado—Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010.

RABEHI, M.; MEZGHICHE, B.; GUETTALA, S. Correlation between initial absorption of the cover concrete, the compressive strength and carbonation depth. *Construction and Building Materials*, v. 45, p. 123–129, 2013.

RATHNARAJAN, S. et al. Carbonation model for concretes with fly ash, slag, and limestone calcined clay - using accelerated and five - year natural exposure data. *Cement and Concrete Composites*, v. 126, 1 fev. 2022.

RIBEIRO, A. B.; SANTOS, T.; GONÇALVES, A. Performance of concrete exposed to natural carbonation: Use of the k-value concept. *Construction and Building Materials*, v. 175, p. 360–370, 30 jun. 2018.

SHAFEI, B.; ALIPOUR, A.; SHINOZUKA, M. Prediction of corrosion initiation in reinforced concrete members subjected to environmental stressors: A finite-element framework. *Cement and Concrete Research*, v. 42, n. 2, p. 365–376, fev. 2012.

SMOLCZYK, H. G. Written discussion on carbonation of concrete by m. hamada. *Proc. of 5th International Symposium on the Chemistry of Cement*, v. 3, p. 369–384, 1968.

SMOLCZYK, H. G. Physical and chemical phenomena of carbonation . *RILEM Colloquium on carbonation of concrete*, 1976.

SPÖRL, C.; CASTRO, E. G.; LUCHIARI, A. Aplicação de redes neurais artificiais na construção de modelos de fragilidade ambiental. 2011.

STEFFENS, A.; DINKLER, D.; AHRENS, H. Modeling carbonation for corrosion risk prediction of concrete structures. *Cement and Concrete Research*, v. 32, n. 6, p. 935–941, jun. 2002.

TAFFESE, W. Z.; SISTONEN, E.; PUTTONEN, J. CaPrM: Carbonation prediction model for reinforced concrete using machine learning methods. *Construction and Building Materials*, v. 100, p. 70–82, 15 dez. 2015a.

TAFFESE, W. Z.; SISTONEN, E.; PUTTONEN, J. CaPrM: Carbonation prediction

model for reinforced concrete using machine learning methods. *Construction and Building Materials*, v. 100, p. 70–82, 15 dez. 2015b.

TUUTTI, K. *Corrosion of Steel in Concrete*. Stockholm: Swedish Cement and Concrete Research Institute, 1982.

VERBECK, G. *Carbonation of Hydrated Portland Cement*. American Society Testing Material, 1958.

VESIKARI, E. Service life prediction of concrete structures with regard to corrosion of reinforcement. p. 53, 1988.

YOUNSI, A.; TURCRY, P.; AÏT-MOKHTAR, A. Quantification of CO₂ uptake of concretes with mineral additions after 10-year natural carbonation. *Journal of Cleaner Production*, v. 349, 15 maio 2022.

YU, B. et al. Carbonation of supersulfated cement concrete after 8 years of natural exposure. *Cement and Concrete Composites*, v. 142, 1 set. 2023.

ZHANG, K. et al. A framework for predicting the carbonation depth of concrete incorporating fly ash based on a least squares support vector machine and metaheuristic algorithms. *Journal of Building Engineering*, v. 65, 15 abr. 2023.