

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**  
**FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECATRÔNICA**

**GUSTAVO ALMEIDA SANTOS**

**A APLICAÇÃO DE DEEP LEARNING NA PREVISÃO DE PROPRIEDADES  
MECÂNICAS DE MATERIAIS — REVISÃO SISTEMÁTICA E APROFUNDADA**

**UBERLÂNDIA - MG**

**2025**

GUSTAVO ALMEIDA SANTOS

**A APLICAÇÃO DE DEEP LEARNING NA PREVISÃO DE PROPRIEDADES  
MECÂNICAS DE MATERIAIS — REVISÃO SISTEMÁTICA E APROFUNDADA**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado à Universidade Federal de  
Uberlândia, como parte das exigências da  
graduação na Faculdade de Engenharia  
Mecânica, para obtenção do título de  
graduação em Engenharia Mecatrônica.

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Rosa Ribeiro da Silva

**UBERLÂNDIA - MG**

**2025**

GUSTAVO ALMEIDA SANTOS

**A APLICAÇÃO DE DEEP LEARNING NA PREVISÃO DE PROPRIEDADES  
MECÂNICAS DE MATERIAIS — REVISÃO SISTEMÁTICA E APROFUNDADA**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado à Universidade Federal de  
Uberlândia, como parte das exigências da  
graduação na Faculdade de Engenharia  
Mecânica, para obtenção do título de  
graduação em Engenharia Mecatrônica.

Uberlândia, 24 de setembro de 2025.

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Leonardo Rosa Ribeiro da Silva - UFU - Orientador

---

Prof. Dr. Luiz Eduardo dos Santos Paes

---

Msc. Felipe Chagas Rodrigues de Souza – UFU

## RESUMO

A aplicação de deep learning na ciência dos materiais representa uma nova fronteira para acelerar a descoberta e a otimização de novas tecnologias. Este trabalho tem como objetivo realizar uma revisão sistemática da literatura para mapear o estado da arte, as metodologias, os desafios e as tendências futuras no uso de redes neurais profundas para a previsão de propriedades mecânicas. A metodologia consistiu na análise de 73 artigos científicos publicados entre 2017 e 2025. Os resultados indicam um crescimento exponencial do campo a partir de 2020, com um foco predominante na predição de propriedades como resistência à tração e fadiga. Constatou-se o domínio das Redes Neurais Convolucionais (CNNs), impulsionado pelo uso de imagens de microestrutura como dado de entrada, e a utilização de abordagens híbridas que combinam dados experimentais e sintéticos para a construção dos bancos de dados. Conclui-se que, apesar da alta acurácia preditiva dos modelos, os principais desafios residem na sua natureza de "caixa-preta", que limita a interpretabilidade, e na garantia de generalização para cenários reais. A tendência futura aponta para a consolidação de técnicas de Inteligência Artificial Explicável (XAI) e a integração desses modelos em plataformas de Projeto Inverso de Materiais, marcando a transição de uma ciência de dados puramente preditiva para uma abordagem prescritiva.

**Palavras-chave:** aprendizado profundo; ciência dos materiais; propriedades mecânicas; revisão sistemática; inteligência artificial.

## **ABSTRACT**

The application of deep learning in materials science represents a new frontier for accelerating the discovery and optimization of emerging technologies. This study aims to conduct a systematic literature review to map the state of the art, methodologies, challenges, and future trends in the use of deep neural networks for predicting mechanical properties. The methodology involved the analysis of 73 scientific articles published between 2017 and 2025. The results indicate an exponential growth of the field since 2020, with a predominant focus on predicting properties such as tensile strength and fatigue. Convolutional Neural Networks (CNNs) dominate the landscape, driven by the use of microstructure images as input data, alongside hybrid approaches that combine experimental and synthetic datasets for database construction. Despite the high predictive accuracy of the models, the main challenges lie in their "black-box" nature, which limits interpretability, and in ensuring generalization to real-world scenarios. Future trends point to the consolidation of Explainable Artificial Intelligence (XAI) techniques and the integration of such models into Inverse Materials Design platforms, marking the transition from a purely predictive data-driven science to a prescriptive approach.

**Keywords:** deep learning; materials science; mechanical properties; systematic review; artificial intelligence.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema comparativo entre uma rede neural rasa (Shallow Neural Network) e uma rede neural profunda (Deep Neural Network).....	17
Figura 2 - Arquitetura de uma Rede Neural Convolucional Profunda.....	20
Figura 3 - Arquitetura da rede MPR-Net.....	21
Figura 4 - Diagrama de uma Rede Neural Recorrente (RNN). ....	22
Figura 5 - Arquitetura de uma célula LSTM.....	24
Figura 6 - Arquitetura de uma Rede Profunda de Crenças (DBN).....	24
Figura 7 - Estrutura de uma Rede Generativa Adversarial Condicional (cGAN).....	26
Figura 8 - Curva tensão-deformação típica para um material metálico, ilustrando a definição do Limite de Escoamento (Yield Strength) e da Resistência à Tração (Tensile Strength) ....	28
Figura 9 - Imagens de microscopia óptica e de microscopia eletrônica de varredura utilizadas para calibrar as posições do indentador nos testes de dureza Vickers. ....	29
Figura 10 - Curva S-N típica para o aço AISI 1045, mostrando a relação entre a amplitude de tensão (Stress amplitude) e o número de ciclos até a falha (Number of cycles to failure). ....	31
Figura 11 - Curva Tensão vs. Deformação para um polímero auto-regenerativo, onde a área sob a curva representa a tenacidade (Toughness) do material, ou seja, a energia absorvida antes da fratura.....	32
Figura 12 - Esquema do ensaio de desgaste do tipo pino sobre disco (pin-on-disk). ....	34
Figura 13 - Imagem de MEV da superfície desgastada de um corpo de prova, mostrando as marcas de desgaste e a formação de uma camada tribológica (tribolayer) após o ensaio...	34
Figura 14 - Fluxo de trabalho para geração de banco de dados via simulação.....	40
Figura 15 - Exemplo de ensaio heterogêneo (a) e o mapa de deformação (b) de campo completo resultante. ....	41
Figura 16 - Visualização de características da MPR-Net usando Grad-CAM. ....	43
Figura 17 - Comparação entre as previsões de um modelo DBN (treinado com dados de simulação). ....	45
Figura 18 - Esquema de um framework de projeto inverso de materiais.....	46
Figura 19 - Distribuição de Artigos por Ano de Publicação.....	50
Figura 20 - Distribuição dos artigos por Propriedade Mecânica Estudada. ....	52

Figura 21 - Distribuição dos artigos por Rede Neural Utilizada. ....	56
Figura 22 - Distribuição dos artigos por Tipo de Dado de Entrada. ....	59
Figura 23 - Distribuição dos artigos por Abordagem de Interpretabilidade. ....	63
Figura 24 - Distribuição dos artigos por Técnica de Generalização.....	66
Figura 25 - Distribuição dos artigos por Estratégia de Construção do Banco de Dados.....	69

## **LISTA DE TABELAS**

Tabela 1 - Concordância dos artigos por Propriedade Mecânica Estudada.....	52
Tabela 2 - Concordância dos artigos por Metodologia de IA Empregada.....	56
Tabela 3 - Concordância dos artigos por Tipo de Dado de Entrada.....	60
Tabela 4 - Concordância dos artigos por Abordagem de Interpretabilidade. ....	63
Tabela 5 - Concordância dos artigos por Técnica de Generalização. ....	66
Tabela 6 - Concordância dos artigos por Técnica de Generalização. ....	69

## **LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS**

ANN - Artificial Neural Networks (Redes Neurais Artificiais)

BPN - Backpropagation Network (Rede de Retropropagação)

cGAN - Conditional Generative Adversarial Network (Rede Generativa Adversarial Condicional)

CNN - Convolutional Neural Networks (Redes Neurais Convolucionais)

CPFEM - Crystal Plasticity Finite Element Method (Método de Elementos Finitos de Plasticidade Cristalina)

CVN - Charpy V-Notch (Ensaio de Impacto Charpy com entalhe em V)

DBN - Deep Belief Network (Rede Profunda de Crenças)

DIC - Digital Image Correlation (Correlação de Imagem Digital)

DNN - Deep Neural Network (Rede Neural Profunda)

FCNN - Fully Connected Neural Networks (Redes Totalmente Conectadas)

FEM - Finite Element Method (Método dos Elementos Finitos)

G - Gerador (Componente de uma rede GAN)

D - Discriminador (Componente de uma rede GAN)

Grad-CAM - Gradient-weighted Class Activation Mapping (Mapeamento de Ativação de Classe Ponderado por Gradiente)

GPU - Graphics Processing Units (Unidades de Processamento Gráfico)

GRU - Gated Recurrent Unit (Unidade Recorrente Fechada)

HV - Hardness Vickers (Dureza Vickers)

IA - Inteligência Artificial

IoT - Internet of Things (Internet das Coisas)

$K_{Ic}$  - Tenacidade à Fratura (Parâmetro da mecânica da fratura)

LE - Limite de Escoamento

LPBF - Laser Powder Bed Fusion (Fusão em Leito de Pó a Laser)

LRP - Layer-wise Relevance Propagation (Propagação de Relevância por Camadas)

LRT - Limite de Resistência à Tração

LSTM - Long Short-Term Memory (Memória de Longo e Curto Prazo)

MEF - Método dos Elementos Finitos

MEV - Microscopia Eletrônica de Varredura

ML - Machine Learning (Aprendizado de Máquina)

MPR-Net - Microstructure-Property Relationship Network (Rede de Relação Metalografia-Propriedade)

RBM - Restricted Boltzmann Machines (Máquinas de Boltzmann Restritas)

RNN - Recurrent Neural Networks (Redes Neurais Recorrentes)

RT - Resistência à Tração

RUS - Remaining Useful Strength (Resistência Útil Remanescente)

S-N - Curva Tensão-Número de Ciclos (Usada em análise de fadiga)

SHAP - SHapley Additive exPlanations (Explicações Aditivas de Shapley)

SVM - Support Vector Machines (Máquinas de Vetores de Suporte)

TC - Tomografia Computadorizada

TS - Tensile Strength (Resistência à Tração)

U-Net - Arquitetura de rede neural convolucional para segmentação de imagens

UHPFRC - Ultra-High-Performance Fiber-Reinforced Concrete (Concreto de Ultra-Alto Despenho Reforçado com Fibras)

XAI - Explainable Artificial Intelligence (Inteligência Artificial Explicável)

YS - Yield Strength (Limite de Escoamento)

$R^2$  - Coeficiente de Determinação (Medida estatística que avalia a qualidade do ajuste de um modelo de regressão)

RMSE - Root Mean Square Error (Raiz do Erro Quadrático Médio)

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	14
2.1	INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL: PANORAMA HISTÓRICO E EVOLUÇÃO .....	14
2.2	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS: CONCEITOS FUNDAMENTAIS .....	15
2.3	ARQUITETURAS DE REDES NEURAIS.....	16
2.3.1	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS E FEEDFORWARD.....	16
2.3.2	REDES NEURAIS CONVOLUCIONAIS.....	18
2.3.3	REDES NEURAIS RECORRENTES E LSTM .....	21
2.3.4	REDE PROFUNDA DE CRENÇAS.....	24
2.3.5	REDE GENERATIVA ADVERSARIAL CONDICIONAL (cGAN) .....	25
2.4	PROPRIEDADES MECÂNICAS.....	26
2.4.1	RESISTÊNCIA À TRAÇÃO E AO ESCOAMENTO.....	26
2.4.2	DUREZA .....	28
2.4.3	FADIGA.....	30
2.4.4	TENACIDADE .....	31
2.4.5	RESISTÊNCIA AO DESGASTE .....	32
3	APLICAÇÕES DE CASO .....	35
4	DESAFIOS E LIMITAÇÕES .....	38
4.1	CONSTRUÇÃO E QUALIDADE DE DADOS.....	38
4.2	COMPLEXIDADE E QUALIDADE DOS DADOS.....	40
4.3	INTERPRETABILIDADE DOS MODELOS .....	42
4.4	GENERALIZAÇÃO .....	44
5	TENDÊNCIAS FUTURAS .....	45
6	METODOLOGIA .....	47
6.1	TIPO DE ESTUDO .....	47
6.2	PROCEDIMENTO DE COLETA DE DADOS.....	47
6.3	ESTRUTURA DE ANÁLISE E CLASSIFICAÇÃO .....	48

<b>7</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES.....</b>	<b>49</b>
<b>8</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS.....</b>	<b>73</b>
<b>9</b>	<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>73</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, a ciência e a engenharia dos materiais têm testemunhado uma revolução impulsionada por avanços em inteligência artificial, consolidando a ciência de dados como o "quarto paradigma" da descoberta científica, ao lado da teoria, experimentação e simulação (Agrawal & Choudhary, 2016). Dentro desse novo cenário, o deep learning (aprendizado profundo) emergiu como uma metodologia particularmente poderosa, contrastando com abordagens estatísticas tradicionais ao oferecer a capacidade de modelar relações altamente complexas e não lineares diretamente de dados brutos.

A aplicação do deep learning se mostra especialmente promissora para a predição de propriedades mecânicas de materiais, uma tarefa tradicionalmente dependente de ensaios laboratoriais caros e demorados. Modelos de aprendizado profundo são capazes de mapear a complexa relação entre as variáveis de entrada — como composição química, parâmetros de processo ou imagens de microestrutura — e as propriedades resultantes, como resistência à tração, dureza e vida em fadiga, acelerando drasticamente o ciclo de desenvolvimento de novos materiais (Liu et al., 2021).

Contudo, a implementação bem-sucedida desses modelos não é trivial e enfrenta um conjunto de desafios interconectados que definem a fronteira da pesquisa atual. O primeiro e mais fundamental deles é a construção de um banco de dados robusto, uma vez que o deep learning é inerentemente dependente de grandes volumes de dados, cuja obtenção experimental na ciência dos materiais é frequentemente inviável (Chen, 2024). Isso leva à necessidade de lidar com a complexidade dos dados, que frequentemente são heterogêneos, combinando informações numéricas, séries temporais e imagens de alta dimensionalidade.

Além do desafio dos dados, surge a barreira da interpretabilidade. A natureza de "caixa-preta" da maioria dos modelos de deep learning é um obstáculo crítico para sua adoção em aplicações de engenharia, onde a confiança e a compreensão do processo de decisão são fundamentais (Zhang et al., 2019). Por fim, garantir a generalização das predições — ou seja, a capacidade do modelo de performar bem em dados novos e não vistos, especialmente ao transpor o "hiato" entre dados de simulação e resultados experimentais — permanece como um dos maiores desafios técnicos a serem superados (Li & Zhang, 2020).

Diante deste panorama, o objetivo deste trabalho é realizar uma revisão sistemática da literatura sobre a aplicação de deep learning na previsão de propriedades mecânicas, buscando mapear o estado da arte e analisar criticamente como a comunidade científica tem abordado os desafios mencionados. O estudo visa identificar as principais arquiteturas, os métodos de construção de dados, as estratégias para garantir a generalização e as técnicas emergentes de interpretabilidade que moldam o futuro da área.

## **2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA**

### **2.1 INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL: PANORAMA HISTÓRICO E EVOLUÇÃO**

A Inteligência Artificial (IA) surgiu como campo de pesquisa formal em meados da década de 1950, tendo como marco inicial a conferência de Dartmouth, em 1956, considerada o berço teórico dessa área. Foi nesse evento, proposto por John McCarthy, que o termo "Inteligência Artificial" foi cunhado, solidificando os objetivos de pesquisa para as próximas décadas (Russell; Norvig, 2020). Os primeiros trabalhos tinham como base os paradigmas simbólicos, ou seja, sistemas especialistas que buscavam representar explicitamente o conhecimento humano por meio de regras lógicas. Nesse período, o entusiasmo foi grande, mas a limitação computacional e a rigidez dos métodos dificultaram aplicações mais amplas, levando a crises conhecidas como invernos da IA, especialmente no final dos anos 1970 e no final dos anos 1980, quando o financiamento para a área foi drasticamente reduzido (Crevier, 1993).

Nos anos 1980 e 1990, com o avanço de métodos estatísticos, a IA ingressou em uma nova fase: a do aprendizado de máquina (Machine Learning – ML). Diferentemente da lógica simbólica, o ML assume que um sistema pode aprender a partir de dados, ajustando seus parâmetros para melhorar gradualmente o desempenho preditivo. Técnicas como as Máquinas de Vetores de Suporte (SVM), árvores de decisão e redes neurais artificiais rasas ganharam grande destaque, impulsionadas pelo desenvolvimento de algoritmos como a retropropagação (Bishop, 2006). Embora mais eficazes na prática, essas metodologias ainda enfrentavam barreiras quando aplicadas a bases de dados complexas e de grande dimensão.

A virada paradigmática ocorreu a partir da década de 2010, quando o aumento do poder computacional, associado ao uso massivo de unidades de processamento

gráfico (GPUs), tornou possível o treinamento de redes neurais com múltiplas camadas ocultas — fenômeno que consagrou o termo deep learning (aprendizado profundo) (LeCun; Bengio; Hinton, 2015). O marco mais emblemático dessa transição foi o concurso de reconhecimento de imagens ImageNet em 2012, no qual o modelo AlexNet (uma rede neural profunda) superou todos os concorrentes de forma significativa, demonstrando o poder dessa nova abordagem (Krizhevsky; Sutskever; Hinton, 2012). A partir daí, o deep learning tornou-se pilar central da IA contemporânea, expandindo seus usos em visão computacional, processamento de linguagem natural, previsão de séries temporais e, mais recentemente, na ciência dos materiais.

## **2.2 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS: CONCEITOS FUNDAMENTAIS**

O conceito de neurônio artificial foi proposto por McCulloch e Pitts, em 1943, como uma tentativa de simular computacionalmente as funções lógicas do cérebro humano. Embora esse modelo fosse incapaz de aprender, ele estabeleceu a base teórica para o campo. Posteriormente, o modelo de Perceptron, desenvolvido por Rosenblatt em 1958, representou um avanço significativo ao propor a primeira arquitetura capaz de aprender e reconhecer padrões lineares. Apesar de suas limitações para lidar com problemas não lineares, detalhadas na crítica de Minsky e Papert (1969), o perceptron plantou as bases para o desenvolvimento de modelos mais robustos nas décadas seguintes (Haykin, 2009).

Uma rede neural consiste em um conjunto de neurônios artificiais interconectados, organizados em camadas: camada de entrada, camadas ocultas e camada de saída. Cada conexão possui um peso sináptico, ajustado por algoritmos de treinamento com o objetivo de reduzir o erro de previsão. A popularização do método da retropropagação (backpropagation) por Rumelhart, Hinton e Williams (1986) foi crucial para permitir o treinamento eficaz de redes com múltiplas camadas, ajustando os pesos da rede para otimizar a performance. Esses avanços estão detalhados em diversas obras de referência que consolidam o campo (Goodfellow, Bengio & Courville, 2016).

A maior contribuição do deep learning está no uso de múltiplas camadas ocultas (deep layers), que permitem a modelagem de fenômenos altamente não lineares e a construção de representações hierárquicas de dados complexos. Em vez de

dependem de características extraídas manualmente, uma rede profunda aprende a identificar e organizar essas características de forma automática. Esse processo garante que, mesmo em sistemas de elevada dimensionalidade como microestruturas de materiais, seja possível correlacionar variáveis aparentemente desconexas e extrair informações valiosas (Goodfellow, Bengio & Courville, 2016).

## **2.3 ARQUITETURAS DE REDES NEURAIS**

A evolução das redes neurais deu origem a diferentes arquiteturas, cada qual mais adequada a determinados tipos de dados e problemas.

### **2.3.1 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS E FEEDFORWARD**

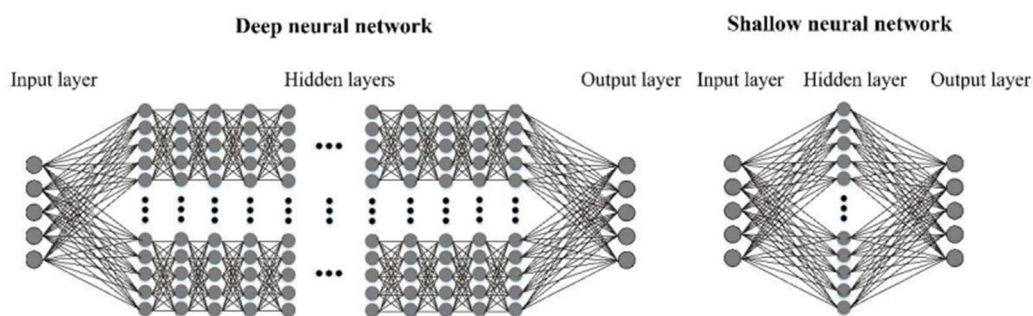
Ao longo da evolução do aprendizado de máquina, diferentes arquiteturas de redes neurais foram concebidas com o objetivo de superar limitações técnicas e ampliar a gama de aplicações possíveis. As Redes Neurais Artificiais (ANNs) são modelos computacionais inspirados no sistema nervoso biológico, projetados para processar informações e prever resultados a partir de dados de entrada (AZARAFZA et al., 2022). Estruturalmente, uma ANN consiste em um conjunto de unidades de processamento chamadas neurônios artificiais, que são organizados em camadas: uma camada de entrada (que recebe os dados brutos), uma ou mais camadas ocultas (responsáveis pelo processamento não linear) e uma camada de saída (que fornece o resultado da predição) (AZARAFZA et al., 2022). Essa estrutura permite que a rede estabeleça relações complexas e não lineares entre as variáveis de entrada e saída, oferecendo uma solução mais robusta que modelos analíticos ou empíricos tradicionais (JUNG et al., 2020).

As primeiras e mais fundamentais implementações são as redes FeedForward, nas quais a informação flui em uma única direção, da camada de entrada para a de saída, sem a presença de ciclos ou laços de realimentação (AZARAFZA et al., 2022). O treinamento dessas redes ocorre por meio de um processo de otimização, como o algoritmo de retropropagação (backpropagation), onde os pesos das conexões entre os neurônios são ajustados iterativamente para minimizar o erro entre os valores previstos pela rede e os valores reais observados (JUNG et al., 2020).

A transição para modelos mais poderosos ocorreu com o advento do deep

learning (aprendizado profundo), que se refere ao uso de redes neurais com múltiplas camadas ocultas (AZARAFZA et al., 2022). Uma rede com essa característica é denominada Rede Neural Profunda (DNN). A principal vantagem de uma DNN em relação a uma rede rasa (shallow network) reside em sua capacidade de aprender representações hierárquicas e extrair características informativas dos dados de forma automática, sem a necessidade de intervenção manual (AZARAFZA et al., 2022). Em muitos casos, essas redes profundas são compostas por camadas onde todos os neurônios de uma camada estão conectados a todos os neurônios da camada seguinte, sendo também chamadas de Redes Totalmente Conectadas (FCNNs), cuja diferença estrutural pode ser observada na Figura 1.

Figura 1 - Esquema comparativo entre uma rede neural rasa (Shallow Neural Network) e uma rede neural profunda (Deep Neural Network).



Fonte: adaptado de AZARAFZA et al., 2022

A aplicação de arquiteturas DNN e FCNN tem se mostrado extremamente eficaz na ciência dos materiais para prever propriedades mecânicas complexas. Estudos utilizam essas redes para prever o índice de resistência e parâmetros de rigidez em rochas como o margito (AZARAFZA et al., 2022), e para determinar propriedades de tração em aços de alta resistência com base em suas frações volumétricas microestruturais (JUNG et al., 2020). Da mesma forma, modelos de deep learning são empregados para estimar a resistência ao escoamento de aços laminados a quente (CUI et al., 2022) e para prever a resistência à tração de peças produzidas por manufatura aditiva (ZHANG et al., 2019).

Apesar de seu alto desempenho, a implementação de redes neurais profundas apresenta desafios significativos. Um dos principais é a necessidade de grandes volumes de dados rotulados para o treinamento, o que nem sempre é viável em

aplicações de engenharia, onde a obtenção de dados experimentais é cara e demorada (CUI et al., 2022). Além disso, devido ao elevado número de parâmetros a serem ajustados, as DNNs são suscetíveis ao Overfitting, fenômeno no qual o modelo se especializa excessivamente nos dados de treinamento e perde sua capacidade de generalizar para novos dados. (AZARAFZA et al., 2022).

Finalmente, uma das limitações mais críticas das redes neurais é sua natureza de "caixa-preta" (black box), que torna difícil interpretar como e por que o modelo chega a uma determinada previsão (ZHANG et al., 2019). Essa falta de interpretabilidade é uma barreira para a adoção em aplicações críticas, onde a confiabilidade e a compreensão do processo de decisão são fundamentais. Para contornar essa dificuldade, pesquisadores têm explorado métodos como a Propagação de Relevância por Camadas (LRP – Layer-wise Relevance Propagation), que busca decompor a predição da rede para quantificar a contribuição de cada variável de entrada no resultado (ZHANG et al., 2019).

### **2.3.2 REDES NEURAI CONVULACIONAIS**

As Redes Neurais Convolucionais (CNNs, do inglês *Convolutional Neural Networks*) são uma classe especializada de redes neurais profundas, projetadas primariamente para processar dados que possuem uma topologia de grade, como imagens (LI et al., 2019; YANG et al., 2020). Diferentemente das redes neurais totalmente conectadas, as CNNs são arquitetadas para capturar e preservar relações espaciais nos dados de entrada, o que as torna excepcionalmente eficazes para tarefas de análise de microestruturas de materiais (HERRIOTT; SPEAR, 2020). Sua principal vantagem reside na capacidade de aprender e extrair características hierárquicas de forma automática, eliminando a necessidade de pré-processamento extensivo e extração manual de descritores microestruturais (HERRIOTT; SPEAR, 2020).

A arquitetura de uma CNN é estruturada para processar informações espaciais de forma eficiente e é composta, fundamentalmente, por três tipos de camadas: convolucionais, de agrupamento (*pooling*) e totalmente conectadas (YU et al., 2023). Uma representação visual do fluxo de dados através dessas camadas em um modelo profundo é apresentada na 2.2.

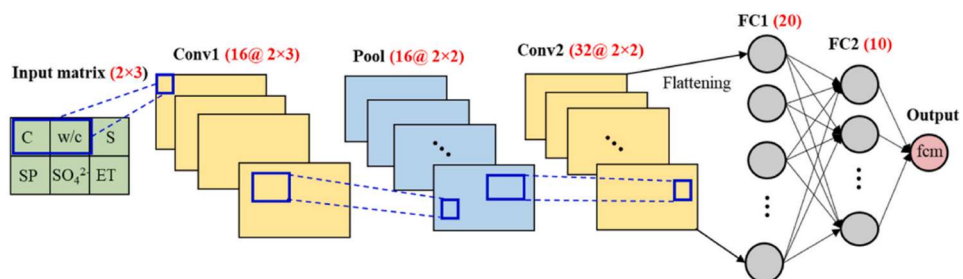
1. **Camadas Convolucionais:** São o núcleo da rede e realizam a operação de convolução (YU et al., 2023). Elas utilizam um conjunto de filtros (ou *kernels*), que são pequenas matrizes de pesos aprendidos, que deslizam sobre a imagem de entrada. Cada filtro é especializado em detectar uma característica local específica, como bordas, texturas ou formas (YU et al., 2023). A principal diferença em relação a uma rede densa é o uso de campos receptivos locais, onde cada neurônio se conecta apenas a uma pequena região da camada anterior, permitindo que a rede foque em padrões locais de forma eficiente (LI et al., 2019). O resultado da operação de convolução é um mapa de características (*feature map*), que indica a presença daquela característica específica na imagem (YU et al., 2023).
2. **Camadas de Pooling (Agrupamento):** Geralmente inseridas após as camadas convolucionais, sua função é reduzir a dimensionalidade espacial dos mapas de características, tornando a representação mais compacta e computacionalmente mais gerenciável (LI et al., 2019; YU et al., 2023). A operação mais comum é o *max pooling*, que seleciona o valor máximo de uma vizinhança, mantendo as informações mais salientes e conferindo à rede um certo grau de invariância à translação (YU et al., 2023).
3. **Camadas Totalmente Conectadas (Fully Connected):** Localizadas no final da rede, essas camadas recebem os mapas de características de alto nível, já processados e compactados, e os utilizam para realizar a tarefa final de classificação ou regressão (LI et al., 2019; YU et al., 2023). Elas funcionam de maneira análoga a uma rede neural *feedforward* tradicional, conectando cada neurônio de uma camada a todos os neurônios da camada seguinte para fazer a predição final (YU et al., 2023).

O grande poder das CNNs reside em sua capacidade de construir uma representação hierárquica dos dados. As camadas iniciais aprendem a identificar características simples e de baixo nível (e.g., bordas de grãos). Conforme os dados avançam para camadas mais profundas, esses padrões simples são combinados para formar características mais complexas e abstratas, como a morfologia de uma fase inteira ou a distribuição geral dos constituintes em uma amostra (LI et al., 2019). Essa habilidade permite que a CNN estabeleça um mapeamento implícito e altamente complexo entre a imagem da microestrutura e suas propriedades

mecânicas efetivas (LI et al., 2019).

Devido a essa característica, as CNNs têm sido amplamente aplicadas na engenharia de materiais para prever o comportamento mecânico a partir de imagens. Elas são utilizadas para prever curvas completas de tensão-deformação de compósitos, onde a natureza local da convolução se mostra ideal para aprender os efeitos espaciais da propagação de trincas (YANG et al., 2020). Na manufatura aditiva, CNNs 3D processam dados volumétricos da microestrutura (como a orientação cristalográfica de cada ponto) para prever propriedades mecânicas locais, superando modelos de aprendizado de máquina mais tradicionais que dependem de descritores microestruturais médios (HERRIOTT; SPEAR, 2020). Outras aplicações incluem a predição do módulo de elasticidade efetivo em rochas de xisto com base em imagens de sua estrutura mesoescala (LI et al., 2019) e a avaliação da resistência à compressão de materiais cimentícios, onde a rede aprende a correlação entre a composição e as condições de exposição e a resistência final (YU et al., 2023).

Figura 2 - Arquitetura de uma Rede Neural Convolutional Profunda.

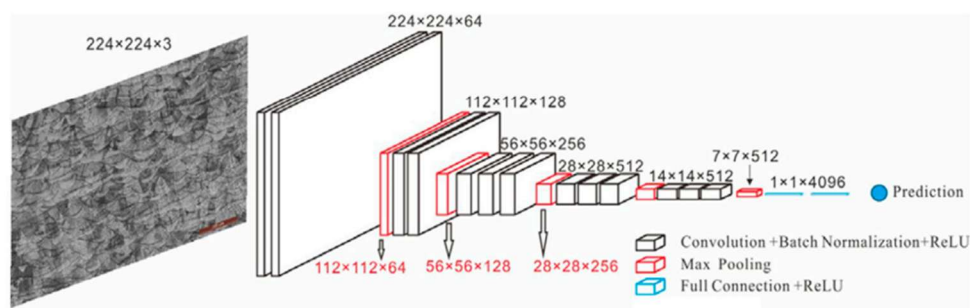


Fonte: adaptado de YU et al., 2023

Uma implementação específica e avançada dessa abordagem é a Rede de Relação Metalografia-Propriedade (MPR-Net), desenvolvida para prever a relação entre a microestrutura e as propriedades mecânicas do aço inoxidável 316L produzido por fusão em leito de pó a laser (LPBF) (ZHANG et al., 2024). A MPR-Net é uma CNN profunda, baseada na arquitetura VGGNet, composta por 13 camadas convolucionais e 3 camadas totalmente conectadas, conforme detalhado na Figura 3 (ZHANG et al., 2024). O grande diferencial desse modelo não está apenas em sua capacidade de prever com alta precisão a resistência à tração e a dureza Vickers diretamente de imagens metalográficas, mas também em sua interpretabilidade.

Utilizando técnicas de visualização de características, como o Mapeamento de Ativação de Classe Ponderado por Gradiente (Grad-CAM), a MPR-Net permite identificar quais regiões e padrões na microestrutura (como a morfologia da poça de fusão) são mais influentes para a predição de uma determinada propriedade mecânica (ZHANG et al., 2024). Essa capacidade de "abrir a caixa-preta" do modelo de *deep learning* é fundamental para conectar as predições computacionais aos mecanismos físicos de formação de grãos e, assim, otimizar os parâmetros do processo de fabricação de forma mais informada (ZHANG et al., 2024).

Figura 3 - Arquitetura da rede MPR-Net.



Fonte: adaptado de ZHANG et al., 2024.

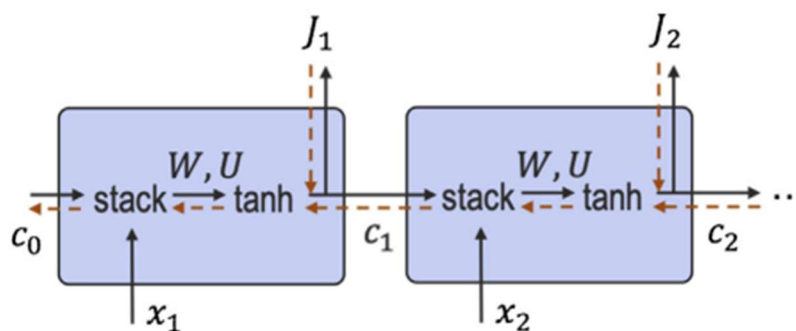
### 2.3.3 REDES NEURAIS RECORRENTES E LSTM

Enquanto as CNNs são especializadas em dados com estrutura espacial, as Redes Neurais Recorrentes (RNNs) foram desenvolvidas para lidar com dados sequenciais ou séries temporais, onde a ordem e o contexto são fundamentais (XU et al., 2023). A principal característica de uma RNN é a sua capacidade de reter informações de passos anteriores para influenciar a saída do passo atual, criando uma forma de memória (ZHANG et al., 2019). Essa arquitetura é ideal para modelar processos dinâmicos e sequenciais, como os encontrados na manufatura, onde o histórico de eventos, como os ciclos térmicos em cada camada de impressão, afeta diretamente as propriedades do produto (ZHANG et al., 2019).

A estrutura de uma RNN simples é caracterizada por um laço de realimentação, onde a saída do neurônio em um passo de tempo ( $t-1$ ) é reintroduzida como parte da entrada para o próximo passo de tempo ( $t$ ), conforme esquematizado na Figura 4 (ZHANG et al., 2019). No entanto, as RNNs tradicionais sofrem de uma limitação significativa conhecida como o problema do desaparecimento do gradiente

(vanishing gradient problem). Durante o treinamento com o algoritmo de retropropagação no tempo (backpropagation through time), o gradiente do erro pode diminuir exponencialmente à medida que se propaga para trás através de longas sequências, tornando a rede incapaz de aprender dependências de longo prazo (ZHANG et al., 2019).

Figura 4 - Diagrama de uma Rede Neural Recorrente (RNN).



Fonte: adaptado de ZHANG et al., 2019.

Para superar essa limitação, foi desenvolvida uma arquitetura de RNN mais sofisticada e poderosa: a rede de Memória de Longo Prazo (LSTM, do inglês Long Short-Term Memory) (ZHANG et al., 2019; XU et al., 2023). A LSTM introduz uma estrutura de célula mais complexa, projetada especificamente para reter e acessar informações por longos períodos, mitigando o problema do desaparecimento do gradiente (ZHANG et al., 2019; TAO et al., 2021). O núcleo da célula LSTM é o estado da célula (cell state), que atua como uma esteira transportadora de informações, permitindo que os dados fluam através da sequência com poucas alterações. A principal inovação da LSTM é a sua capacidade de adicionar ou remover informações do estado da célula por meio de estruturas reguladoras chamadas portões (gates), cuja arquitetura interna é detalhada na Figura 5 (HAN et al., 2025). Esses portões são compostos por uma função de ativação sigmoide e uma operação de multiplicação, controlando seletivamente o fluxo de informação (XU et al., 2023). Uma célula LSTM típica possui três portões principais:

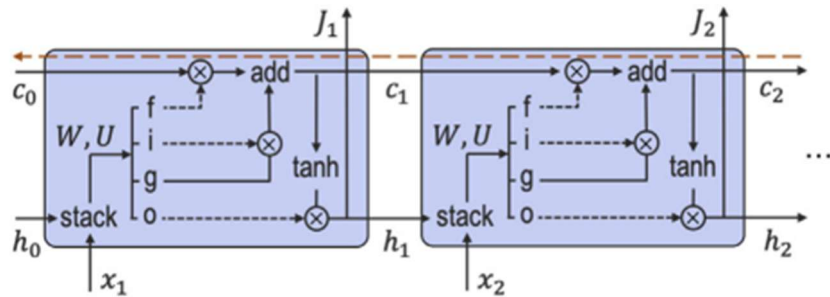
- **Portão de Esquecimento (Forget Gate):** Decide quais informações do estado da célula anterior devem ser descartadas. Ele analisa a

saída anterior ( $h_{t-1}$ ) e a entrada atual ( $x_t$ ) e gera um valor entre 0 (esquecer completamente) e 1 (manter completamente) para cada número no estado da célula (ZHANG et al., 2019; HAN et al., 2025).

- **Portão de Entrada (Input Gate):** Determina quais novas informações serão armazenadas no estado da célula. Este processo tem duas etapas: primeiro, uma camada sigmoide decide quais valores serão atualizados; em seguida, uma camada tanh cria um vetor de novos valores candidatos que podem ser adicionados ao estado (ZHANG et al., 2019; HAN et al., 2025).
- **Portão de Saída (Output Gate):** Define qual será a saída da célula. A saída é baseada no estado da célula, mas é uma versão filtrada. Uma camada sigmoide decide qual parte do estado da célula será liberada, e essa decisão é então multiplicada pelo estado da célula passado por uma função tanh para produzir a saída final ( $h_t$ ) (ZHANG et al., 2019; HAN et al., 2025).

Essa arquitetura de portões permite que a LSTM aprenda de forma independente as interações entre as camadas e capture dependências de longo prazo, tornando-a ideal para modelar processos complexos como a fabricação de compósitos (TAO et al., 2021) e a manufatura aditiva (ZHANG et al., 2019). Em aplicações na ciência dos materiais, as LSTMs são utilizadas para processar sinais de sensores camada por camada em processos de impressão 3D para prever a resistência à tração da peça final (ZHANG et al., 2019), para reconhecer condições de carregamento em ensaios de fadiga a partir de dados sequenciais de ultrassom (TAO et al., 2021), e para prever propriedades mecânicas de aços com base na sequência de parâmetros de processo (XU et al., 2023; HAN et al., 2025). Outra variante popular, a Unidade Recorrente Fechada (GRU), simplifica a arquitetura da LSTM fundindo os portões de esquecimento e entrada em um único "portão de atualização", oferecendo desempenho semelhante com maior eficiência computacional (XU et al., 2023).

Figura 5 - Arquitetura de uma célula LSTM.

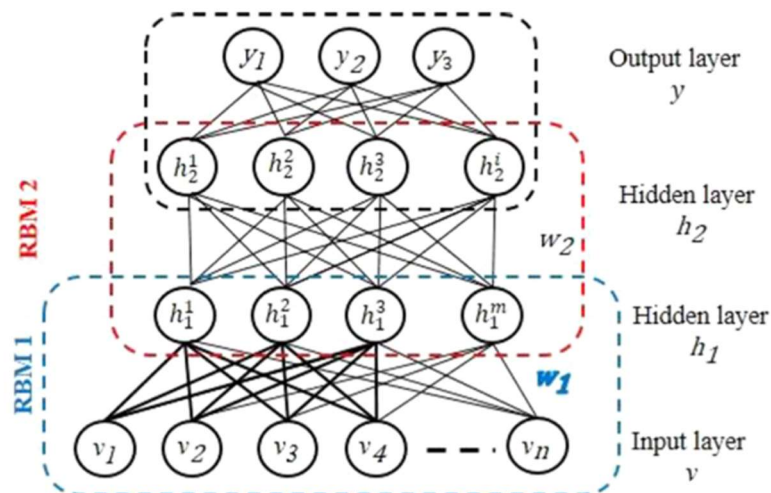


Fonte: adaptado de XU et al., 2023.

### 2.3.4 REDE PROFUNDA DE CRENÇAS

A Uma Rede Profunda de Crenças (DBN) é um modelo de aprendizado profundo composto por múltiplas camadas de Máquinas de Boltzmann Restritas (RBMs, do inglês Restricted Boltzmann Machines) empilhadas, com uma camada final de rede neural feedforward (como uma BPN) para realizar a tarefa de regressão ou classificação (FANG et al., 2021). As RBMs são redes neurais não supervisionadas que aprendem a extrair uma representação hierárquica e de alto nível dos dados de entrada (AKRICHI et al., 2019). A estrutura hierárquica de uma DBN, formada pelo empilhamento de RBMs, é esquematizada na Figura 6.

Figura 6- Arquitetura de uma Rede Profunda de Crenças (DBN).



Fonte: adaptado de AKRICHI et al., 2019

O processo de treinamento de uma DBN ocorre em duas fases distintas:

1. **Pré-treinamento não supervisionado (*Unsupervised Pre-training*):** As camadas de RBMs são treinadas sequencialmente, uma de cada vez, de baixo para cima. A camada oculta de uma RBM serve como a camada visível (entrada) para a RBM seguinte. Este pré-treinamento generativo otimiza os pesos iniciais da rede, o que reduz o risco de a rede convergir para um ótimo local e se mostra eficaz mesmo com conjuntos de dados limitados (FANG et al., 2021; AKRICH et al., 2019).
2. **Ajuste Fino Supervisionado (*Supervised Fine-tuning*):** Após o pré-treinamento, os pesos da rede são ajustados finamente usando um algoritmo supervisionado, como a retropropagação (*backpropagation*), para otimizar o desempenho do modelo na tarefa específica de predição (FANG et al., 2021; AKRICH et al., 2019).

Essa arquitetura se mostrou eficaz na previsão da capacidade axial de perfis de aço formados a frio (FANG et al., 2021) e na predição da precisão geométrica em processos de conformação incremental de ponto único (AKRICH et al., 2019), demonstrando um desempenho superior em comparação com redes neurais rasas.

### 2.3.5 REDE GENERATIVA ADVERSIAL CONDICIONAL (cGAN)

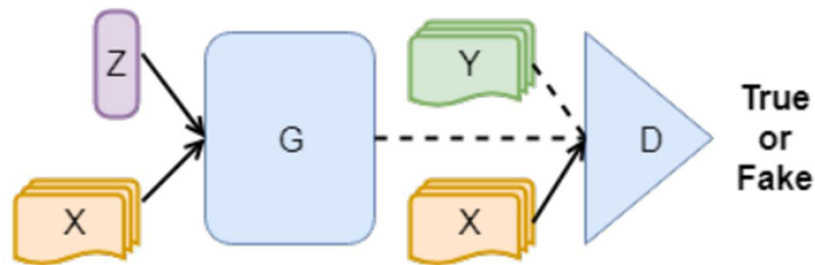
A Rede Generativa Adversarial Condicional (cGAN) é um modelo de aprendizado profundo pertencente à família das redes generativas, projetado para tarefas de tradução de imagem para imagem (OH; KI, 2019). Uma cGAN é composta por duas redes neurais que competem entre si em um "jogo de minimax de dois jogadores": o Gerador (G) e o Discriminador (D), cuja estrutura e interação são esquematizadas na Figura 7 (JIANG et al., 2020).

- **O Gerador (G):** Tem como objetivo aprender a mapear uma imagem de entrada (a "condição") para uma imagem de saída. Por exemplo, ele pode receber uma distribuição de temperatura e tentar gerar a distribuição de dureza correspondente (OH; KI, 2019). Frequentemente, sua arquitetura é baseada em uma rede do tipo codificador-decodificador (*encoder-decoder*), como a U-Net, que utiliza camadas convolucionais para extrair características e camadas desconvolucionais (ou convolucionais transpostas) para

reconstruir a imagem de saída (OH; KI, 2019).

- **O Discriminador (D):** É treinado para distinguir entre as imagens "reais" (do conjunto de dados de treinamento) e as imagens "falsas" (geradas pelo Gerador). Ele recebe um par de imagens (a entrada condicional e uma imagem de saída, que pode ser real ou falsa) e deve determinar a autenticidade da saída (JIANG et al., 2020).

Figura 7- Estrutura de uma Rede Generativa Adversarial Condicional (cGAN).



Fonte: adaptado de JIANG et al., 2020

Durante o treinamento, o Gerador tenta produzir imagens cada vez mais realistas para "enganar" o Discriminador, enquanto o Discriminador se aprimora em identificar as falsificações (OH; KI, 2019). Esse processo adversarial força o Gerador a aprender a distribuição de dados real e a gerar saídas de alta fidelidade. As cGANs são particularmente poderosas para prever campos de dados complexos, como a distribuição de tensões de von Mises em estruturas sob diferentes geometrias e condições de contorno (JIANG et al., 2020) ou a tradução de mapas de temperatura em mapas de dureza em tratamentos térmicos a laser (OH; KI, 2019).

## 2.4 PROPRIEDADES MECÂNICAS

### 2.4.1 RESISTÊNCIA À TRAÇÃO E AO ESCOAMENTO

A resposta de um material a uma força externa aplicada é descrita por suas propriedades mecânicas, que são fundamentais para o projeto e a análise de qualquer componente estrutural. Dentre as mais importantes estão a Resistência à Tração (ou Limite de Resistência à Tração, LRT) e a Resistência ao escoamento (ou

Limite de Escoamento, LE), ambas obtidas a partir do ensaio de tração uniaxial (JUNG et al., 2020; ZHANG et al., 2019). Este ensaio consiste em submeter um corpo de prova com geometria padronizada a uma força de tração crescente até a sua fratura, registrando continuamente a relação entre a tensão (força por unidade de área) e a deformação (alteração percentual no comprimento). O resultado é um gráfico conhecido como curva tensão-deformação, que serve como uma "impressão digital" do comportamento mecânico do material, conforme ilustrado na Figura 8 (ZHANG et al., 2019).

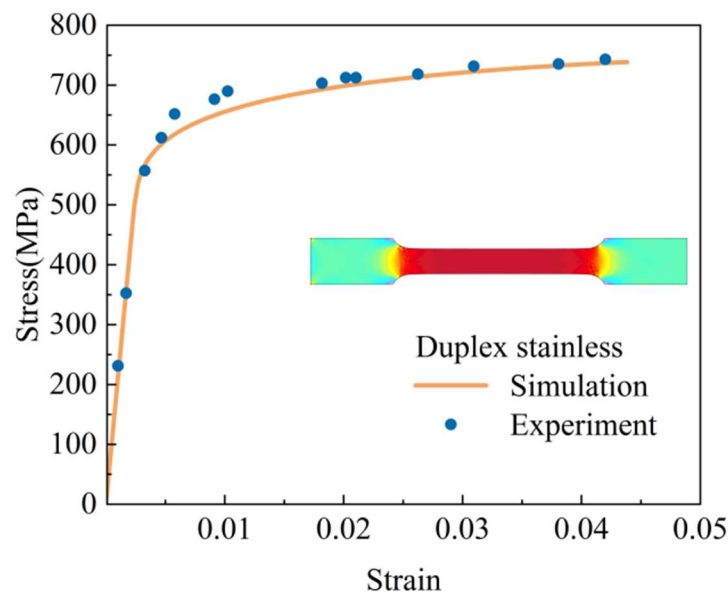
O Limite de Escoamento (LE), ou Yield Strength (YS), representa a tensão na qual o material começa a sofrer deformação plástica, ou seja, uma deformação permanente que não é recuperada após a remoção da carga (JUNG et al., 2020). Antes de atingir o YS, o material se deforma elasticamente, retornando à sua forma original se a força for removida. O US é um parâmetro crítico no projeto de engenharia, pois geralmente define o limite superior de tensão que um componente pode suportar em serviço sem sofrer deformações permanentes.

À medida que a força de tração continua a aumentar após o escoamento, o material passa por um processo de encruamento, no qual ele se torna mais resistente à deformação. A tensão continua a subir até atingir um ponto máximo, que é definido como a Resistência à Tração (RT), ou Tensile Strength (TS) (JUNG et al., 2020). Este valor representa a máxima tensão que o material pode suportar antes de iniciar o processo de estricção (redução localizada da área da seção transversal) que culmina na fratura (ZHANG et al., 2019). Em materiais frágeis, a fratura pode ocorrer com pouca ou nenhuma deformação plástica, e a resistência à tração é simplesmente a tensão máxima registrada no momento da ruptura (ZHANG et al., 2019).

Essas duas propriedades são profundamente influenciadas pela microestrutura do material, que, por sua vez, é determinada pela composição química e pelas condições do processo de fabricação, como laminação e tratamento térmico (CUI et al., 2022; JUNG et al., 2020). A combinação complexa desses fatores determina a presença e a fração volumétrica de diferentes fases microestruturais (como ferrita, bainita e martensita), que governam o comportamento mecânico final do aço (JUNG et al., 2020). Prever com precisão o YS e a RT a partir desses parâmetros de entrada é um dos principais objetivos da ciência dos materiais

moderna, impulsionando o desenvolvimento de modelos computacionais avançados baseados em inteligência artificial (CUI et al., 2022; JUNG et al., 2020).

Figura 8 - Curva tensão-deformação típica para um material metálico, ilustrando a definição do Limite de Escoamento (Yield Strength) e da Resistência à Tração (Tensile Strength)



Fonte: adaptado de ZHANG et al., 2019

## 2.4.2 DUREZA

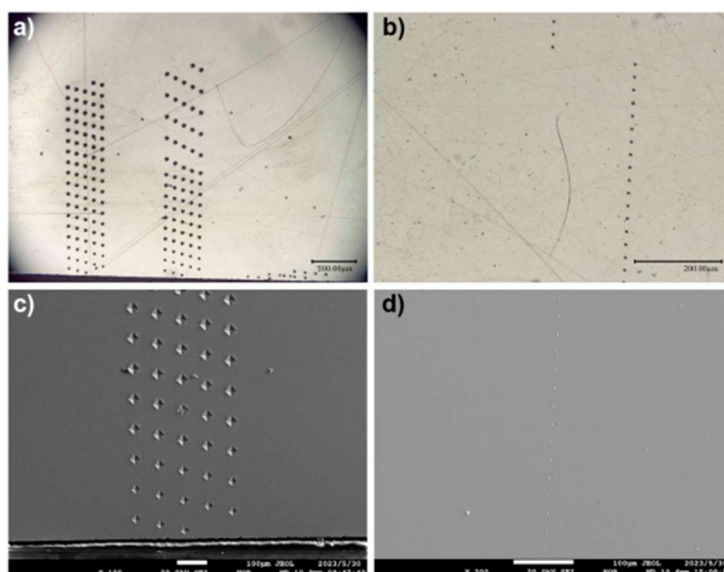
Dureza é uma propriedade mecânica fundamental que quantifica a resistência de um material à deformação plástica localizada, como a penetração, o risco ou a indentação (JAYAKUMAR; LAKSHMIPATHY, 2022). Em aplicações de engenharia, a dureza é um indicador crucial da qualidade e do desempenho de um material, pois está diretamente correlacionada com sua resistência ao desgaste e, em muitos casos, com sua resistência mecânica (OH; KI, 2019; JAYAKUMAR; LAKSHMIPATHY, 2022). No contexto de aços e outras ligas metálicas, a dureza é profundamente influenciada pela microestrutura, sendo uma das principais propriedades a serem otimizadas durante processos de tratamento térmico, como a têmpera a laser (OH; KI, 2019).

A medição da dureza é tipicamente realizada por meio de ensaios de indentação, nos quais um penetrador com geometria padronizada é pressionado contra a superfície do material sob uma carga controlada por um tempo específico

(NIU et al., 2024; JAYAKUMAR; LAKSHMIPATHY, 2022). Após a remoção da carga, a dimensão da marca de indentação deixada na superfície é medida, sendo crucial a utilização de técnicas de microscopia para a correta calibração e análise dessas marcas, como ilustrado na Figura 9. Diferentes métodos de ensaio são classificados com base no tipo de penetrador utilizado, como os ensaios Brinell (esfera de aço), Rockwell (cone de diamante ou esfera) e Vickers (pirâmide de diamante) (JAYAKUMAR; LAKSHMIPATHY, 2022).

O ensaio de dureza Vickers (HV), por exemplo, utiliza um penetrador piramidal de diamante com um ângulo específico entre as faces (OH; KI, 2019). A dureza Vickers é calculada a partir da carga aplicada dividida pela área superficial da indentação. Esse método é amplamente utilizado por sua precisão e por cobrir uma vasta gama de durezas. A obtenção de um mapa de dureza em uma seção transversal de uma peça, por exemplo, permite visualizar o efeito de um tratamento térmico, identificando a profundidade e a extensão da zona afetada pelo calor (OH; KI, 2019). A capacidade de prever a distribuição de dureza com base nos parâmetros de processo é um objetivo central na ciência dos materiais, pois permite a otimização de tratamentos para alcançar o desempenho desejado sem a necessidade de extensos ensaios experimentais (OH; KI, 2019; NIU et al., 2024).

Figura 9 - Imagens de microscopia óptica e de microscopia eletrônica de varredura utilizadas para calibrar as posições do indentador nos testes de dureza Vickers.



Fonte: adaptado de NIU et al., 2024

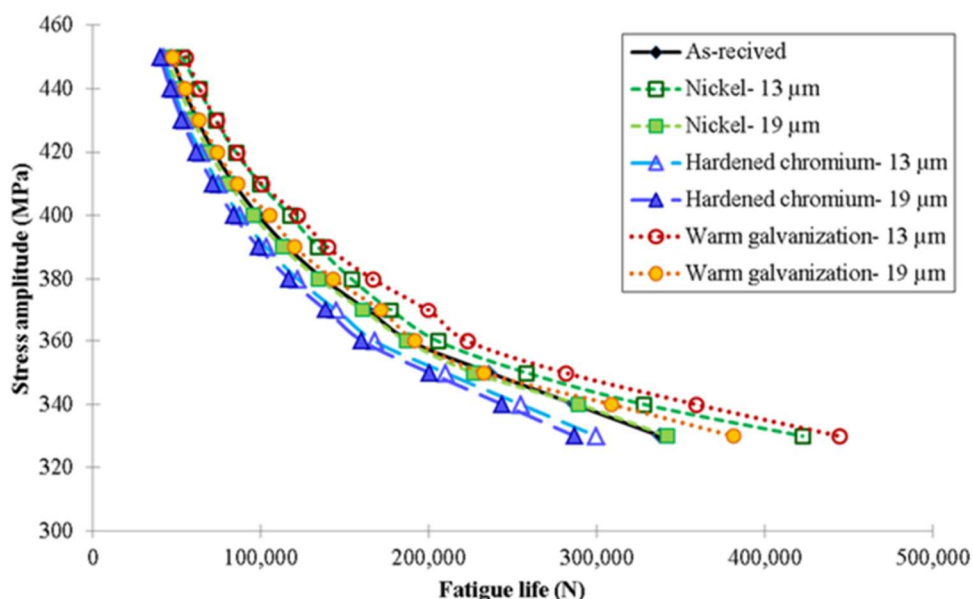
### 2.4.3 FADIGA

A fadiga é um fenômeno complexo de acúmulo de dano que se manifesta em materiais submetidos a carregamentos cíclicos, sendo um dos principais mecanismos de falha em componentes estruturais (ZHANG et al., 2021; MALEKI et al., 2022). Sua principal característica é a capacidade de levar uma estrutura à fratura mesmo quando os níveis de tensão aplicados são significativamente inferiores à resistência ao escoamento do material (ZHANG et al., 2021). O processo de falha por fadiga é tipicamente dividido em três estágios: iniciação da trinca, onde pequenas fissuras se formam em pontos de alta concentração de tensão; propagação da trinca, onde a fissura cresce a cada ciclo de carregamento; e, finalmente, a fratura final, que ocorre de forma súbita quando a seção transversal remanescente do material não é mais capaz de suportar a carga aplicada.

A vida em fadiga de um componente, ou seja, o número de ciclos que ele pode suportar antes de falhar sob um determinado nível de tensão, é uma propriedade crítica para garantir a segurança e a confiabilidade de estruturas de engenharia (MALEKI et al., 2022). Tradicionalmente, o comportamento de um material sob fadiga é caracterizado pela curva S-N (também conhecida como curva de Wöhler), que plota a amplitude da tensão (S) em função do número de ciclos até a falha (N), como ilustrado na Figura 10 (MALEKI et al., 2022).

A natureza estatística do fenômeno da fadiga, influenciada por múltiplos fatores como geometria, condições de carregamento e, crucialmente, a microestrutura, torna sua previsão um desafio significativo (ZHANG et al., 2021). Abordagens tradicionais para prever a vida em fadiga dependem de modelos empíricos e ensaios experimentais extensivos, que são caros e demorados. Em resposta a essas limitações, métodos baseados em dados, especialmente modelos de aprendizado profundo, têm emergido como ferramentas poderosas para prever a vida em fadiga, aprendendo as complexas relações não lineares diretamente dos dados de processo e material (ZHANG et al., 2021; MALEKI et al., 2022).

Figura 10 - Curva S-N típica para o aço AISI 1045, mostrando a relação entre a amplitude de tensão (Stress amplitude) e o número de ciclos até a falha (Number of cycles to failure).



Fonte: adaptado de MALEKI et al., 2022

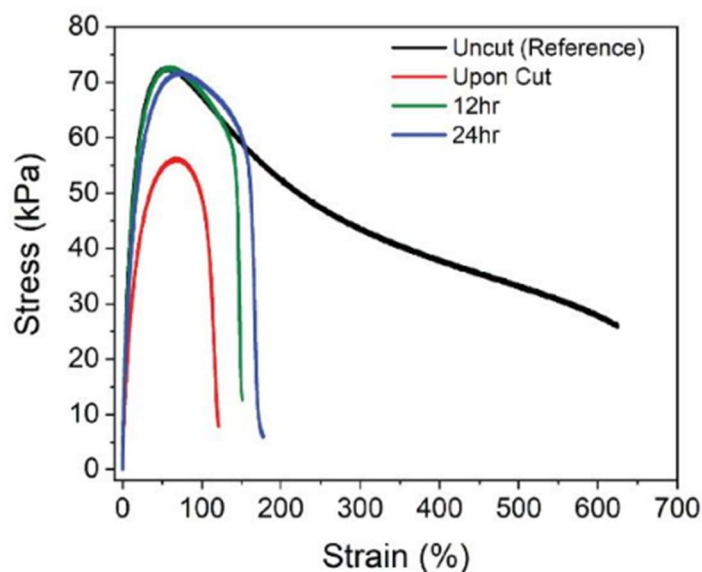
#### 2.4.4 TENACIDADE

Já a tenacidade é uma propriedade mecânica que descreve a capacidade de um material de absorver energia e sofrer deformação plástica antes de fraturar (ANWAR et al., 2021). Diferente da resistência, que mede a força que um material pode suportar, a tenacidade representa a energia total que ele pode absorver até a sua ruptura. Uma das maneiras mais diretas de visualizar e quantificar a tenacidade é através da área sob a curva tensão-deformação, obtida em um ensaio de tração, como ilustrado na Figura 11 (ANWAR et al., 2021). Um material pode possuir alta resistência, mas ser frágil (baixa tenacidade), enquanto outro pode ter menor resistência, mas ser muito mais tenaz, sendo capaz de suportar grandes deformações antes de falhar.

Um conceito mais específico e de grande importância na engenharia é a tenacidade à fratura ( $K_{Ic}$ ), que mede a resistência de um material à propagação de uma trinca pré-existente (MOTOTAKE et al., 2022). Este é um parâmetro crítico para o projeto de componentes estruturais, pois governa a tolerância a defeitos. A análise da superfície de fratura, conhecida como fratógrafia, é uma ferramenta poderosa para entender os mecanismos de falha e pode, inclusive, ser utilizada para prever quantitativamente a tenacidade à fratura de um material (MOTOTAKE et al., 2022).

Na prática industrial, uma das formas mais comuns de avaliar a tenacidade é através de ensaios de impacto, como o ensaio Charpy com entalhe em V (CVN) (WU et al., 2021). Neste teste, um corpo de prova padronizado com um entalhe é submetido ao impacto de um pêndulo com energia conhecida. A energia absorvida pelo material durante a fratura, conhecida como energia de impacto, é uma medida direta de sua tenacidade sob altas taxas de deformação (WU et al., 2021). Esta propriedade é crucial para materiais utilizados em aplicações que exigem alta confiabilidade, como em aços para a indústria automotiva e de construção, pois indica a capacidade do material de resistir a cargas de choque sem sofrer uma fratura frágil (WU et al., 2021).

Figura 11 - Curva Tensão vs. Deformação para um polímero auto-regenerativo, onde a área sob a curva representa a tenacidade (Toughness) do material, ou seja, a energia absorvida antes da fratura



Fonte: adaptado de ANWAR et al., 2021.

#### 2.4.5 RESISTÊNCIA AO DESGASTE

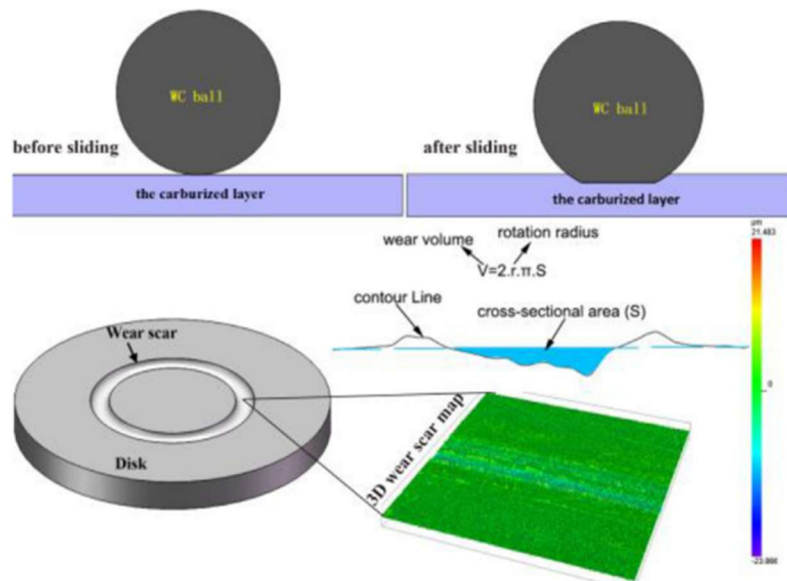
A resistência ao desgaste é a propriedade que descreve a capacidade de um material de resistir à perda progressiva de material de sua superfície devido ao movimento relativo contra uma superfície adjacente (SHEN et al., 2022). Em aplicações de engenharia, especialmente em componentes submetidos a atrito e contato deslizante, como engrenagens, rolamentos e ferramentas de usinagem, a

resistência ao desgaste é um fator crítico que determina a vida útil, a confiabilidade e a eficiência do componente (WANG et al., 2020). A falha por desgaste pode levar à perda de precisão dimensional, aumento do consumo de energia e, em casos extremos, à falha catastrófica do sistema mecânico (WANG et al., 2020).

O comportamento de um material sob desgaste é influenciado por uma complexa interação de fatores, incluindo as propriedades do próprio material (como dureza e microestrutura), as condições de operação (carga, velocidade, temperatura) e a natureza das superfícies em contato (SHEN et al., 2022). Em aços, por exemplo, a estabilidade da microestrutura na camada superficial, como a austenita retida em aços carburizados, desempenha um papel decisivo na resistência ao desgaste, pois governa fenômenos como o encruamento a frio e a transformação martensítica induzida por deformação durante o atrito (SHEN et al., 2022).

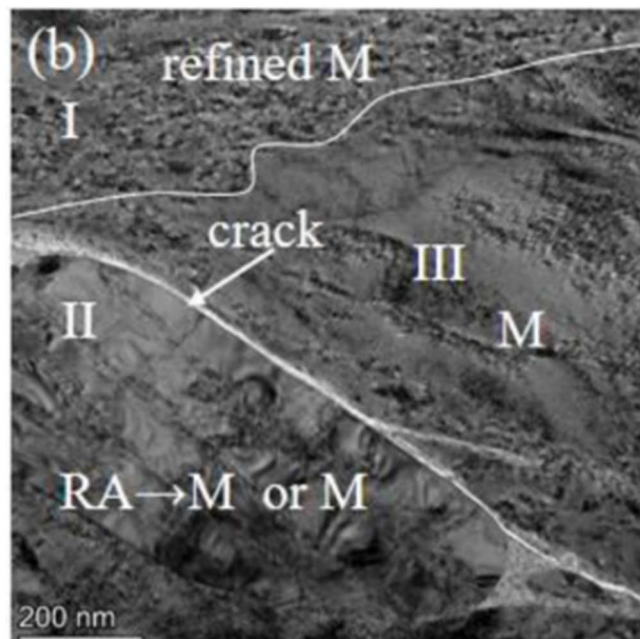
Para avaliar a resistência ao desgaste, um dos métodos experimentais mais comuns é o ensaio de pino sobre disco (pin-on-disk), esquematizado na Figura 12. Neste ensaio, um pino feito do material a ser testado é pressionado com uma carga constante contra um disco giratório. A taxa de desgaste é então quantificada medindo-se a perda de massa do pino ou o volume de material removido ao longo de uma determinada distância de deslizamento (SHEN et al., 2022). A análise da superfície desgastada, geralmente realizada por meio de Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), como mostrado na Figura 13, revela os mecanismos de desgaste dominantes, como abrasão (riscamento), adesão (transferência de material) e a formação de camadas tribológicas (ou tribolayers), que são camadas superficiais modificadas formadas durante o processo de deslizamento (SHEN et al., 2022).

Figura 12 - Esquema do ensaio de desgaste do tipo pino sobre disco (pin-on-disk).



Fonte: adaptado de SHEN et al., 2022.

Figura 13 - Imagem de MEV da superfície desgastada de um corpo de prova, mostrando as marcas de desgaste e a formação de uma camada tribológica (tribolayer) após o ensaio.



Fonte: adaptado de SHEN et al., 2022)

### 3 APLICAÇÕES DE CASO

Após a fundamentação das principais arquiteturas de deep learning e das propriedades mecânicas de interesse, esta seção tem como objetivo ilustrar a aplicação prática desses conceitos por meio de uma análise de casos de uso extraídos da literatura científica recente. O propósito é demonstrar como diferentes modelos de inteligência artificial estão sendo empregados para resolver problemas concretos na ciência e engenharia dos materiais. Cada estudo selecionado será resumido, destacando a metodologia utilizada, o desafio abordado e os principais resultados quantitativos e qualitativos alcançados, oferecendo um panorama do estado da arte em ação.

Sang Ye(YE et al., 2019) propôs o uso Rede Neural Convolucional (CNN), para prever as propriedades elásticas de compósitos, como o módulo de Young e o coeficiente de Poisson, diretamente a partir de imagens de microestruturas. A CNN foi treinada com um banco de dados gerado por simulações de elementos finitos e demonstrou alta precisão, alcançando um erro médio (RMSE) de apenas 0,38 GPa para o módulo de Young e 0,0010 para o coeficiente de Poisson. O estudo destaca a eficácia do modelo mesmo para microestruturas complexas e não vistas durante o treinamento, superando abordagens analíticas tradicionais.

Lu Lu (LU et al., 2020) em seu trabalho, utilizou deep learning para mapear diretamente as curvas de carga-deslocamento da indentação para propriedades elastoplásticas, como o limite de escoamento e o expoente de encruamento. O modelo alcançou uma precisão notável, com um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) superior a 0,99 para todas as propriedades previstas, validando a abordagem como uma alternativa rápida e confiável aos complexos métodos de análise inversa.

No estudo de Yuichiro Murakami (MURAKAMI et al., 2024), o foco foi a previsão de propriedades mecânicas de ligas de alumínio a partir de suas microestruturas. Utilizando uma Rede Neural Convolucional, o modelo foi treinado para analisar imagens metalográficas e prever o limite de resistência à tração, o alongamento na fratura, o módulo de Young e o limite de escoamento. Os resultados foram excelentes, com o modelo alcançando um  $R^2$  de 0,978 na previsão do módulo de Young, demonstrando a capacidade do deep learning de capturar as complexas relações entre a morfologia das fases e o comportamento mecânico.

Explorando a capacidade da IA generativa, o trabalho de Zhenze Yang (YANG

et al., 2021) utilizou uma Rede Generativa Adversarial Condicional (cGAN) para prever campos completos de tensão e deformação em compósitos hierárquicos. O modelo aprendeu a traduzir a geometria da microestrutura diretamente em mapas de tensão, alcançando uma precisão impressionante não apenas nos campos de dados, mas também nas propriedades derivadas, como a rigidez e a tenacidade. Qualitativamente, a cGAN foi capaz de capturar com fidelidade os locais de alta concentração de tensão, provando seu potencial para acelerar drasticamente as análises de elementos finitos.

Visando aprimorar a técnica de Correlação de Imagem Digital (DIC), Ru Yang (YANG et al., 2022) desenvolveu uma abordagem baseada em deep learning com duas CNNs para medição de deslocamento e deformação. O modelo alcançou um erro de medição de deformação extremamente baixo, na ordem de  $10^{-5}$ , e demonstrou ser até 100 vezes mais rápido que os softwares comerciais, representando um avanço significativo para a caracterização de materiais em tempo real.

No campo da tomografia computadorizada (TC), o trabalho de Hao Gong (GONG et al., 2020) apresentou uma CNN para realizar a decomposição de materiais diretamente a partir de imagens de TC de dupla energia. O modelo foi capaz de estimar a distribuição de densidade de diferentes materiais (como iodo e gordura) com alta precisão, alcançando um erro relativo médio de apenas 1,3% para o iodo em doses de radiação clinicamente relevantes. Este caso de uso demonstra o potencial do deep learning para substituir processos de inversão complexos em técnicas de imagem avançadas.

Explorando o comportamento de materiais granulares, Tongming Qu (QU et al., 2021) utilizou uma Rede Neural Recorrente (RNN) para prever as relações de tensão-deformação a partir de dados de ensaios triaxiais simulados. O modelo aprendeu a prever a evolução da tensão com base no histórico de deformação, alcançando um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) de 0,98. Qualitativamente, o estudo validou a capacidade das RNNs de modelar a histerese e a dependência do caminho, características complexas do comportamento constitutivo dos materiais.

Focando na previsão da resistência à tração de concretos de ultra-alto desempenho reforçados com fibras (UHPFRC), Xin Luo (LUO; MATSUMOTO, 2025) desenvolveu uma abordagem inovadora utilizando uma CNN. O modelo foi treinado

para, a partir de imagens da superfície do material, primeiro prever a localização da futura trinca de fratura e, em seguida, usar essa informação para estimar a resistência à tração. A metodologia alcançou uma alta correlação com os dados experimentais, com um  $R^2$  de 0,89, demonstrando o potencial da IA para prever a falha em materiais complexos e heterogêneos.

Para lidar com o desafio de bancos de dados pequenos, Chunyuan Cui (CUI et al., 2022) desenvolveu um modelo de deep learning guiado por metalurgia física para prever o limite de escoamento de aços laminados a quente. A abordagem utilizou princípios metalúrgicos para criar um grande banco de dados "virtualmente rotulado" para pré-treinar a rede, que foi então refinada com um pequeno conjunto de dados experimentais. O modelo final alcançou uma precisão impressionante, com um erro médio absoluto de apenas 15.8 MPa, superando modelos que não utilizaram o pré-treinamento.

No estudo de Zhikun Huang (HUANG et al., 2024), uma abordagem de deep learning foi aplicada para prever a resistência à fadiga de ligas ferrosas. O modelo foi treinado com uma base de dados que incluía composição química, parâmetros de tratamento térmico e propriedades mecânicas. A rede neural alcançou uma alta capacidade de generalização, com um coeficiente de correlação de 0,95 entre os valores previstos e os experimentais, demonstrando ser uma ferramenta eficaz para acelerar o projeto de materiais resistentes à fadiga.

Para corrigir distorções de imagem em ensaios mecânicos de alta temperatura, Yuhan Gao (GAO et al., 2024) desenvolveu um modelo de deep learning baseado em Transformers para a técnica de Correlação de Imagem Digital (DIC). O modelo foi treinado para corrigir as distorções causadas pelo fluxo de ar térmico, um problema que afeta a precisão das medições. A abordagem se mostrou altamente eficaz, reduzindo o erro médio de medição de deformação em mais de 80% em comparação com imagens não corrigidas.

No campo da análise de falhas em compósitos, Daniel Vuong (VUONG, 2023) desenvolveu um modelo de deep learning 3D para a segmentação automática de quebras de fibra em imagens de tomografia de polímeros reforçados com fibra de carbono. Utilizando uma arquitetura baseada na U-Net 3D, o modelo alcançou um Coeficiente de Similaridade de Dice (Dice Score) de 0,81, indicando uma alta sobreposição entre as quebras de fibra segmentadas pela IA e as anotações

manuals de especialistas. Este trabalho destaca a capacidade da IA em automatizar a análise microestrutural 3D, uma tarefa tradicionalmente manual e demorada.

Para a classificação da resistência à tração em juntas soldadas, o trabalho de Somphop Chiaranai (CHIARANAI et al., 2023) empregou um modelo de ensemble de Redes Neurais Convolucionais (CNNs). A abordagem utilizou imagens da superfície do cordão de solda para classificar a resistência da junta em três categorias (baixa, média, alta). O modelo final alcançou uma acurácia de classificação impressionante de 98,33%, demonstrando o potencial do deep learning como uma ferramenta de controle de qualidade não destrutivo e automatizado para processos de soldagem por fricção e mistura.

## **4 DESAFIOS E LIMITAÇÕES**

Embora as seções anteriores tenham destacado o potencial transformador do deep learning na previsão de propriedades mecânicas, evidenciando sua acurácia e versatilidade em diversos estudos de caso, a adoção e aprimoramento dessas metodologias não estão isentos de obstáculos. Os modelos, por mais precisos que sejam, operam em um campo complexo e multifacetado, onde fatores como a natureza dos dados, a necessidade de interpretabilidade e a capacidade de generalização representam desafios críticos.

Esta seção se propõe a analisar, de forma aprofundada, as principais barreiras enfrentadas pela literatura revisada. A discussão se concentrará em quatro pontos-chave: a construção e a qualidade dos dados de treinamento, a natureza de "caixa preta" dos modelos e a busca por interpretabilidade, as dificuldades em garantir a generalização e a robustez das predições, e, por fim, os desafios mais amplos que a pesquisa futura busca superar. Ao abordar criticamente estas limitações, o presente trabalho contribui com uma visão mais completa e realista da aplicação do deep learning na ciência e engenharia de materiais, fornecendo um guia essencial para o desenvolvimento de soluções mais confiáveis e aplicáveis em um ambiente real.

### **4.1 CONSTRUÇÃO E QUALIDADE DE DADOS**

Um dos desafios mais significativos e fundamentais para a aplicação bem-sucedida de deep learning na ciência dos materiais é a construção de um banco de dados grande, confiável e de alta qualidade (ZHANG et al., 2021). Diferentemente

de outras áreas onde os dados digitais são abundantes, na engenharia de materiais cada ponto de dado frequentemente corresponde a um ensaio experimental caro e demorado ou a uma simulação computacional intensiva (LI et al., 2020; SHEN et al., 2022). A obtenção de dados puramente experimentais em grande volume é, na maioria dos casos, inviável devido ao alto custo de equipamentos, tempo de ensaio e necessidade de mão de obra especializada (LONG et al., 2023).

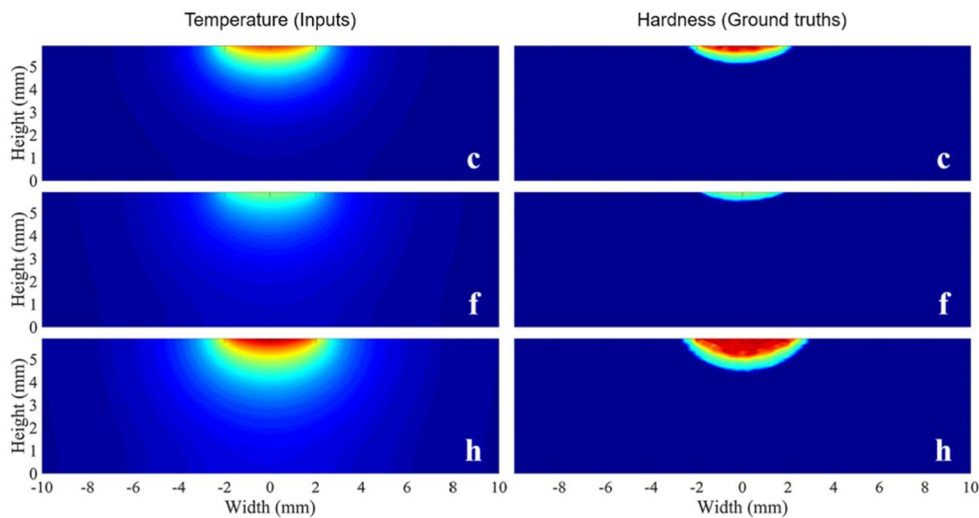
Para contornar essa limitação, a literatura aponta o uso de dados sintéticos como uma estratégia fundamental. Muitos estudos geram vastos bancos de dados por meio de simulações computacionais, como o Método dos Elementos Finitos (MEF). Gholami et al. (2023), por exemplo, geraram 9000 imagens 2D sintéticas de microestruturas de hidrogéis para treinar modelos e prever suas propriedades mecânicas. De forma semelhante, Shang et al. (2023) criaram um banco de dados com 10.240 microestruturas 3D de Ti-6Al-4V usando o método de elementos finitos de plasticidade cristalina (CPFEM). Outros trabalhos focam na geração de curvas de dados, como o de Long et al. (2023), que produziu 10.000 conjuntos de dados de curvas de indentação carga-deslocamento. A Figura 14 ilustra um fluxo de trabalho exemplar, onde simulações térmicas 3D são usadas para gerar distribuições de temperatura que servem como entrada para um modelo de deep learning (CGAN) que prevê a distribuição de dureza (OH; KI, 2019).

Contudo, a dependência de dados sintéticos introduz um novo desafio: o "hiato de realidade" (reality gap) entre os domínios simulado e experimental (PYLE et al.). Os resultados de ensaios físicos são inerentemente sujeitos a variabilidade e ruído, decorrentes de flutuações no processo de fabricação, imprecisões nos equipamentos ou condições ambientais. Modelos treinados exclusivamente com dados de simulação "perfeitos" podem falhar ao serem aplicados a dados experimentais "ruidosos". O trabalho de Pyle et al. demonstra essa questão ao tentar caracterizar trincas, onde o modelo foi treinado em um grande volume de dados simulados, mas precisou de técnicas de adaptação de domínio para funcionar com um conjunto limitado de apenas 15 amostras experimentais.

Finalmente, para que o aprendizado supervisionado seja eficaz, os dados precisam ser não apenas abundantes, mas também limpos e bem rotulados. A rotulagem — o processo de associar cada entrada (e.g., uma imagem de microestrutura) a uma saída correta (e.g., sua resistência à tração) — deve ser

precisa. Quando os dados são compilados de diversas fontes da literatura, como no estudo de Zhang et al. (2021) sobre fadiga e fluência do aço 316, um esforço significativo de curadoria é necessário para garantir a consistência, tratar valores ausentes e normalizar os dados, assegurando que o modelo aprenda correlações físicas verdadeiras em vez de ruído experimental.

Figura 14 - Fluxo de trabalho para geração de banco de dados via simulação.



Fonte: adaptado de OH; KI, 2019.

## 4.2 COMPLEXIDADE E QUALIDADE DOS DADOS

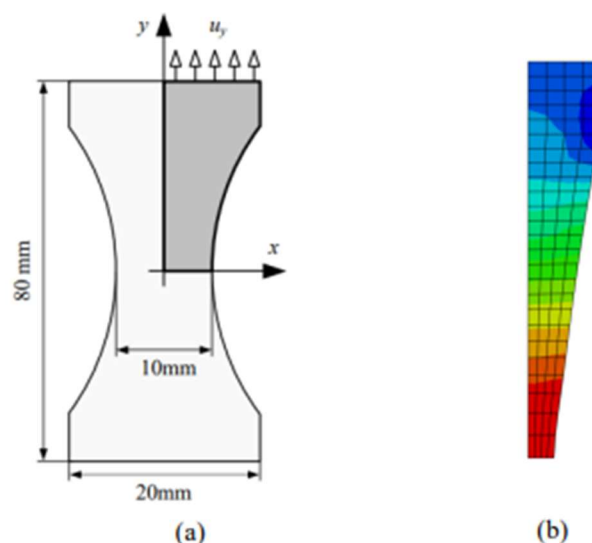
Além do desafio de obter um grande volume de dados, a própria natureza das informações na ciência dos materiais impõe barreiras significativas. Os modelos de deep learning precisam lidar com uma alta complexidade, decorrente da heterogeneidade e da dimensionalidade dos dados, e garantir a qualidade destes para que as previsões sejam fisicamente coerentes e confiáveis.

A complexidade se manifesta na variedade de tipos de dados que precisam ser integrados. Os bancos de dados de materiais raramente são compostos apenas por valores numéricos escalares. Eles frequentemente incluem dados heterogêneos como: imagens 2D e 3D de microestruturas, dados sequenciais de séries temporais e dados de campo (CHEN, 2024). A previsão da plasticidade dependente do caminho, por exemplo, é um fenômeno altamente não linear que exige que o modelo processe toda a história da deformação. Para treinar uma rede recorrente (RNN) capaz de prever esse comportamento, Mozaffar et al. (2019) geraram um banco de

dados com 10.000 caminhos de deformação aleatórios. Em outro exemplo inovador, para estimar a dureza de um material pelo toque, Yuan et al. (2017) alimentaram um modelo de deep learning com mais de 12.000 leituras táteis, que consistiam em imagens de alta resolução (320x240 pixels) geradas por um sensor especializado.

A integração desses dados multimodais é um desafio, mas a qualidade e a representatividade de cada tipo de dado são igualmente cruciais. A calibração de modelos constitutivos elastoplásticos, por exemplo, depende fundamentalmente da qualidade dos dados experimentais. Para capturar comportamentos complexos, é necessário ir além de ensaios uniaxiais simples e utilizar ensaios heterogêneos — como o ensaio em chapas com furos, que geram campos de deformação completos e não uniformes, conforme ilustrado na Figura 15. Para treinar modelos de aprendizado de máquina com essa finalidade, Bastos et al. (2022) utilizaram um banco de dados de 2500 ensaios virtuais, onde cada ensaio fornecia 200 frames de dados de campo completo (full-field data). A obtenção e o processamento desses dados são mais complexos, mas fornecem informações muito mais ricas e de maior qualidade para a identificação precisa dos parâmetros do material (BASTOS et al., 2022). O sucesso do modelo de deep learning depende, portanto, não apenas da quantidade de dados, mas de sua capacidade de representar fielmente a física do problema, garantindo que os dados de entrada sejam de alta fidelidade (FANG et al., 2021).

Figura 15 - Exemplo de ensaio heterogêneo (a) e o mapa de deformação (b) de campo completo resultante.



### 4.3 INTERPRETABILIDADE DOS MODELOS

Apesar do alto desempenho preditivo, uma das limitações mais críticas dos modelos de *deep learning*, como as Redes Neurais Profundas (DNNs), é sua natureza de "caixa-preta" (*black box*) (TAO et al., 2021; ZHANG et al., 2019). Essa característica refere-se à dificuldade em compreender o processo de raciocínio interno do modelo, ou seja, como e por que ele chega a uma determinada previsão a partir dos dados de entrada (ZHANG et al., 2024). Em aplicações de engenharia e ciência dos materiais, onde a segurança, a confiabilidade e a validação física são primordiais, a falta de interpretabilidade é uma barreira significativa para a adoção e a confiança nesses modelos (LIU et al., 2021). A necessidade de transparência é tão relevante que normativas globais, como as diretrizes da União Europeia para uma "IA de Confiança", destacam a explicabilidade como um pilar para sistemas de inteligência artificial robustos e éticos.

Para contornar esse desafio, a comunidade de pesquisa tem desenvolvido diversas técnicas de Inteligência Artificial Explicável (XAI), que buscam "abrir a caixa-preta" e fornecer insights sobre o processo de decisão do modelo. Entre os métodos mais proeminentes aplicados na ciência dos materiais estão:

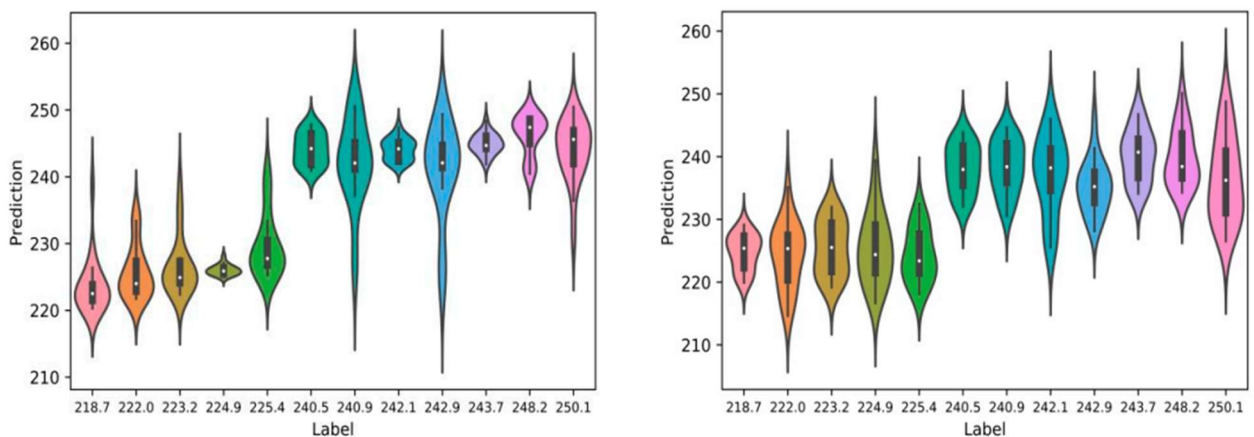
- **Propagação de Relevância por Camadas (LRP – *Layer-wise Relevance Propagation*):** Esta técnica decompõe a predição final de uma rede neural e propaga sua "relevância" para trás, camada por camada, até a entrada. O resultado é uma quantificação da contribuição de cada variável de entrada para a saída final. Por exemplo, em um estudo para prever a resistência à tração na manufatura aditiva, a LRP foi utilizada para analisar um modelo de *deep learning*, revelando que a altura da camada (*layer height*) era o parâmetro de processo com maior relevância, contribuindo com **40%** para a predição (ZHANG et al., 2019).
- **SHAP (*SHapley Additive exPlanations*):** Baseado na teoria dos jogos, o SHAP calcula a contribuição marginal de cada característica para a predição, considerando todas as combinações possíveis de características. Em um estudo sobre a previsão da resistência útil remanescente (RUS) em compósitos, a análise SHAP demonstrou que a característica "energia" dos

sinais de ultrassom era, de longe, o preditor mais influente, com um valor SHAP médio de aproximadamente **0.4**, superando significativamente outras características (TAO et al., 2021). De forma similar, o SHAP foi usado para identificar que os elementos de liga Cr, Mo e W são os mais importantes para a estabilidade da austenita retida em aços, fornecendo uma validação física para as previsões do modelo (SHEN et al., 2022).

- **Grad-CAM (*Gradient-weighted Class Activation Mapping*)**: Específico para modelos baseados em convolução (CNNs), o Grad-CAM utiliza os gradientes da última camada convolucional para produzir um mapa de calor que destaca as regiões mais importantes da imagem de entrada para uma determinada decisão. Conforme ilustrado na Figura 16, em um estudo com a rede MPR-Net para prever propriedades do aço 316L, o Grad-CAM revelou que o modelo focava na morfologia e nos limites da poça de fusão para prever a resistência à tração, conectando a predição da IA a um mecanismo microestrutural conhecido (ZHANG et al., 2024).

Essas técnicas são fundamentais não apenas para validar se o modelo está aprendendo correlações fisicamente coerentes, mas também para extrair novo conhecimento científico, otimizar processos e guiar o desenvolvimento de novos materiais de forma mais informada.

Figura 16 - Visualização de características da MPR-Net usando Grad-CAM.



Fonte: adaptado de ZHANG et al., 2024.

## 4.4 GENERALIZAÇÃO

A Um dos desafios mais persistentes no desenvolvimento de modelos de *deep learning* é garantir sua capacidade de generalização, ou seja, sua habilidade de fazer previsões precisas para dados novos e nunca antes vistos. O principal obstáculo à generalização é o fenômeno do sobreajuste (*overfitting*), que ocorre quando um modelo se ajusta excessivamente aos dados de treinamento, memorizando seus ruídos e particularidades em vez de aprender as relações subjacentes (CHEN, 2024). Um modelo sobreajustado pode apresentar um desempenho excelente no conjunto de treinamento, mas falhar drasticamente quando exposto a novos dados, tornando-o inútil para aplicações práticas.

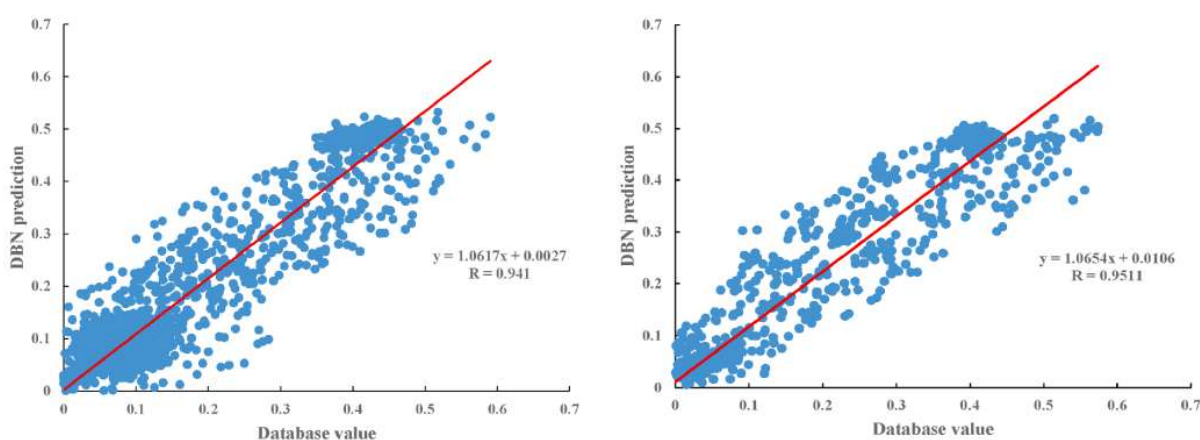
Na ciência dos materiais, onde os dados são caros e muitas vezes limitados, o risco de *overfitting* é particularmente alto. Para mitigar esse problema, uma prática padrão e indispensável é a divisão do banco de dados em conjuntos distintos: treinamento, validação e teste. O conjunto de treinamento é usado para ajustar os pesos do modelo; o conjunto de validação é usado para otimizar os hiperparâmetros (como a arquitetura da rede ou a taxa de aprendizado) e monitorar o *overfitting* durante o treinamento; e o conjunto de teste, mantido "oculto" durante todo o processo, serve para a avaliação final e imparcial da capacidade de generalização do modelo (BASTOS et al., 2022; NIKOLIĆ; ČANAĐIJA, 2023). Por exemplo, Bastos et al. (2022), ao desenvolverem um modelo para identificação de parâmetros de materiais, dividiram seu banco de dados de 2500 ensaios virtuais em 70% para treinamento, 15% para validação e 15% para teste.

A técnica de validação cruzada (*cross-validation*) é uma abordagem ainda mais robusta, especialmente para bancos de dados menores. Nela, os dados são divididos em  $k$  subconjuntos (ou *folds*), e o modelo é treinado  $k$  vezes, utilizando, a cada vez, um subconjunto diferente para teste e o restante para treinamento. Isso garante que todos os dados sejam utilizados tanto para treinar quanto para testar o modelo, fornecendo uma estimativa mais estável e confiável de seu desempenho em dados novos.

O desafio final da generalização é a capacidade de um modelo, muitas vezes treinado com dados de simulação, de prever corretamente o comportamento de materiais em cenários do mundo real. Fang et al. (2021) abordaram exatamente este ponto ao treinar uma Rede de Crenças Profundas (DBN) com um vasto banco de dados de

10.500 pontos gerados por análise de elementos finitos. A verdadeira prova de generalização do modelo foi sua aplicação para prever a capacidade axial de perfis de aço a partir de resultados experimentais encontrados na literatura. Como demonstrado na Figura 17, embora com um certo grau de conservadorismo, as previsões do modelo seguiram a tendência dos dados experimentais, validando sua capacidade de transpor o "hiato de realidade" entre a simulação e o experimento.

Figura 17 - Comparação entre as previsões de um modelo DBN (treinado com dados de simulação).



Fonte: adaptado de FANG et al., 2021.

## 5 TENDÊNCIAS FUTURAS

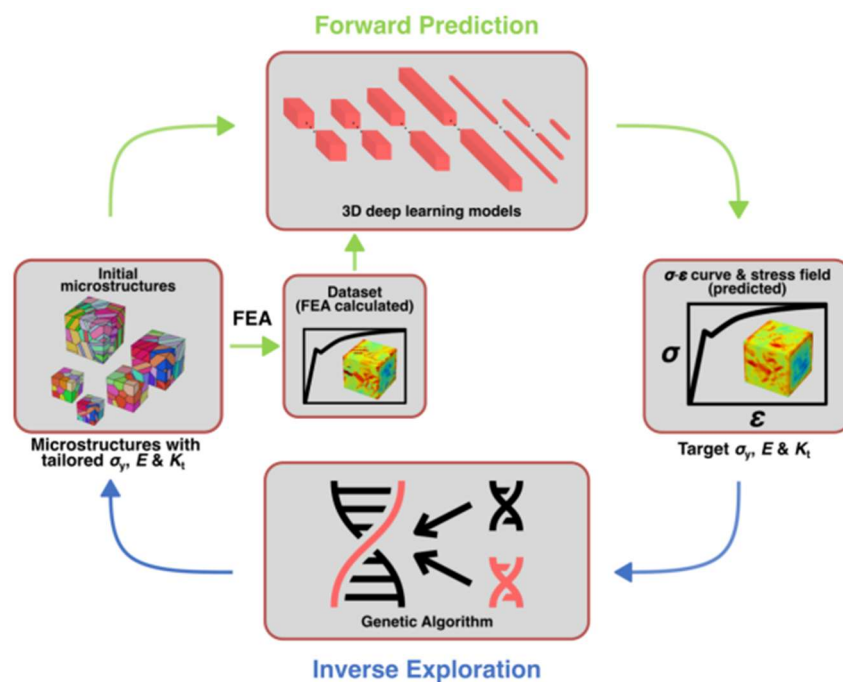
À medida que a aplicação do *deep learning* na ciência dos materiais amadurece, o foco da pesquisa transcende a simples busca por precisão preditiva, avançando em direção a sistemas de inteligência artificial mais integrados, confiáveis e autônomos. As tendências futuras apontam para a superação dos desafios de dados e interpretabilidade por meio de inovações em metodologias de treinamento, arquiteturas de modelos e a fusão com outras tecnologias da Indústria 4.0.

Para contornar o desafio da escassez de dados experimentais, o campo está se movendo em direção a estratégias mais eficientes, como o Aprendizado por Transferência (*Transfer Learning*) e a Adaptação de Domínio (*Domain Adaptation*). Essas abordagens permitem que um modelo treinado em um domínio com dados abundantes (como simulações) seja ajustado para operar em um domínio com dados limitados (como ensaios experimentais ou dados de diferentes sensores), mitigando o "hiato de realidade" entre o virtual e o físico (SIAHPOUR et al., 2020; LI; ZHANG,

2020). A IA Generativa, por meio de modelos como as Redes Generativas Adversariais (GANs), também surge como uma solução poderosa, capaz de criar dados sintéticos de alta fidelidade — como imagens de microestruturas — para aumentar os bancos de dados de treinamento e tornar os modelos preditivos mais robustos (CHEN, 2024; MALASHIN et al., 2025).

Paralelamente, para solucionar o problema da "caixa-preta", a Inteligência Artificial Explicável (XAI) continuará a ser uma área de intensa pesquisa, buscando tornar os modelos mais transparentes e confiáveis para aplicações críticas de engenharia (CHEN, 2024). Olhando para o futuro, a tendência mais impactante é a integração do *deep learning* em plataformas de Projeto Inverso de Materiais (*Inverse Materials Design*). Em vez de apenas prever a propriedade de uma microestrutura existente (o problema direto), esses sistemas são capazes de, a partir de um conjunto de propriedades-alvo, explorar o vasto espaço de design para propor novas microestruturas e os parâmetros de processo ideais para fabricá-las, como ilustrado na Figura 18 (SHANG et al., 2023).

Figura 18 - Esquema de um framework de projeto inverso de materiais.



Fonte: adaptado de SHANG et al., 2023.

A integração dessas técnicas com tecnologias da Indústria 4.0, como a

Internet das Coisas (IoT), permitirá a criação de "gêmeos digitais" (*digital twins*), onde sensores em tempo real alimentam modelos de IA que monitoram a saúde e o desempenho de componentes durante toda a sua vida útil (MONDAL; GOSWAMI, 2024). No entanto, à medida que esses sistemas se tornam mais autônomos e capazes de gerar conteúdo e tomar decisões, as questões éticas sobre o uso responsável da tecnologia, a validação de dados sintéticos e a confiabilidade das previsões em cenários de alto risco se tornarão cada vez mais prementes, exigindo diretrizes claras para garantir a segurança na engenharia do futuro.

## **6 METODOLOGIA**

### **6.1 TIPO DE ESTUDO**

O presente trabalho caracteriza-se como uma revisão sistemática da literatura, conduzida com base em protocolo replicável e transparente de busca, seleção e análise de artigos acadêmicos. De acordo com Kitchenham (2004), esse tipo de estudo difere de revisões narrativas ou meramente bibliográficas por seguir critérios metodológicos explícitos que permitem a reprodutibilidade dos resultados obtidos. A adoção dessa abordagem confere maior rigor científico e possibilita não apenas sintetizar o estado da arte, mas também identificar lacunas de pesquisa e tendências futuras na interseção entre ciência dos materiais e deep learning.

### **6.2 PROCEDIMENTO DE COLETA DE DADOS**

A coleta dos dados foi conduzida a partir de perguntas norteadoras, formuladas com o objetivo de direcionar a pesquisa e garantir foco na área de interesse. Entre as principais questões formuladas, destacam-se:

- Quais metodologias de deep learning têm sido mais utilizadas na previsão de propriedades mecânicas?
- Quais são os principais desafios e tendências relatados na literatura recente?

Para responder a essas questões, foram consultadas bases acadêmicas de ampla cobertura internacional, através do Google Scholar. Essas bases foram selecionadas por contemplarem tanto periódicos de alto impacto em ciência dos materiais quanto revistas especializadas em inteligência artificial.

A estratégia de busca foi elaborada por meio da combinação de descritores

relacionados a técnicas de inteligência artificial e propriedades mecânicas. As principais expressões utilizadas foram:

("deep learning" OR "neural network") AND ("mechanical properties" OR "tensile strength" OR "hardness" OR "fracture toughness" OR "fatigue").

O recorte temporal adotado compreendeu o período de 2017 até 2025, com o intuito de privilegiar estudos recentes, refletindo a rápida evolução do campo e a incorporação de deep learning às áreas tradicionais de ciência e engenharia dos materiais.

Inicialmente, a busca retornou aproximadamente 73 artigos elegíveis, que foram posteriormente filtrados conforme os critérios de inclusão e exclusão descritos na seção 6.3. Após essa triagem, consolidou-se um conjunto final de estudos selecionados que serviu de base para a análise desenvolvida neste trabalho.

### 6.3 ESTRUTURA DE ANÁLISE E CLASSIFICAÇÃO

Após a seleção final dos artigos, o material foi sistematicamente classificado e analisado com base em categorias pré-definidas. Essa taxonomia foi criada para refletir tanto os aspectos técnicos da ciência dos materiais quanto as dimensões computacionais do deep learning. A análise permitiu não só a síntese do conhecimento, mas também a identificação de lacunas e tendências na área.

As categorias de classificação, que guiaram a análise nos capítulos subsequentes, foram:

- **Propriedades Mecânicas:** Os estudos foram categorizados pelo parâmetro central investigado. As propriedades incluídas foram resistência à tração, dureza, tenacidade, resistência à compressão, fadiga, resistência ao desgaste, resistência ao escoamento, fratura e resistência a decomposição. Além disso, foram consideradas abordagens mistas, que integraram múltiplas propriedades em paralelo.
- **Metodologias de Deep Learning:** Esta categoria focou nas arquiteturas de redes neurais utilizadas. As classificações incluíram redes neurais convolucionais (CNNs), redes neurais recorrentes (RNNs), redes neurais artificiais e feedforward. Também foram observadas outras arquiteturas e abordagens mistas.

- **Complexidade dos Dados:** Os artigos foram organizados com base na natureza dos dados de entrada. As classificações abrangeram dados numéricos tabulares, textuais, imagens (microestruturais), séries temporais, e dados gerados por simulações como Molecular Dynamics e Finite Element Method (FEM). Também foram identificados estudos que usaram dados sintéticos ou abordagens mistas, combinando diferentes tipos de dados.
- **Interpretabilidade dos Modelos:** Esta categoria explicitou a abordagem analítica dos estudos em relação à transparência de seus modelos. As classificações distinguiram modelos tratados como "caixa-preta", daqueles que usaram métodos de Aprendizado de Máquina Explicável (XAI) para maior clareza nos resultados.
- **Generalização:** Este eixo classificou os estudos com base em sua abordagem para garantir a robustez e a aplicabilidade das previsões a novos dados. Foram consideradas técnicas de mitigação de overfitting, desempenho por material, uso de validação cruzada, validação simples, abordagens mistas entre outras abordagens.
- **Construção de Banco de Dados:** Por fim, foi criada uma categoria dedicada à construção e organização dos dados, reconhecendo o papel crucial dessa etapa no sucesso das aplicações de deep learning. Os artigos foram analisados com base em bancos criados a partir de coletas via experimento, no tamanho e diversidade das amostras, na padronização dos registros e no uso de estratégias como data augmentation, geração artificial de dados e abordagens mistas.

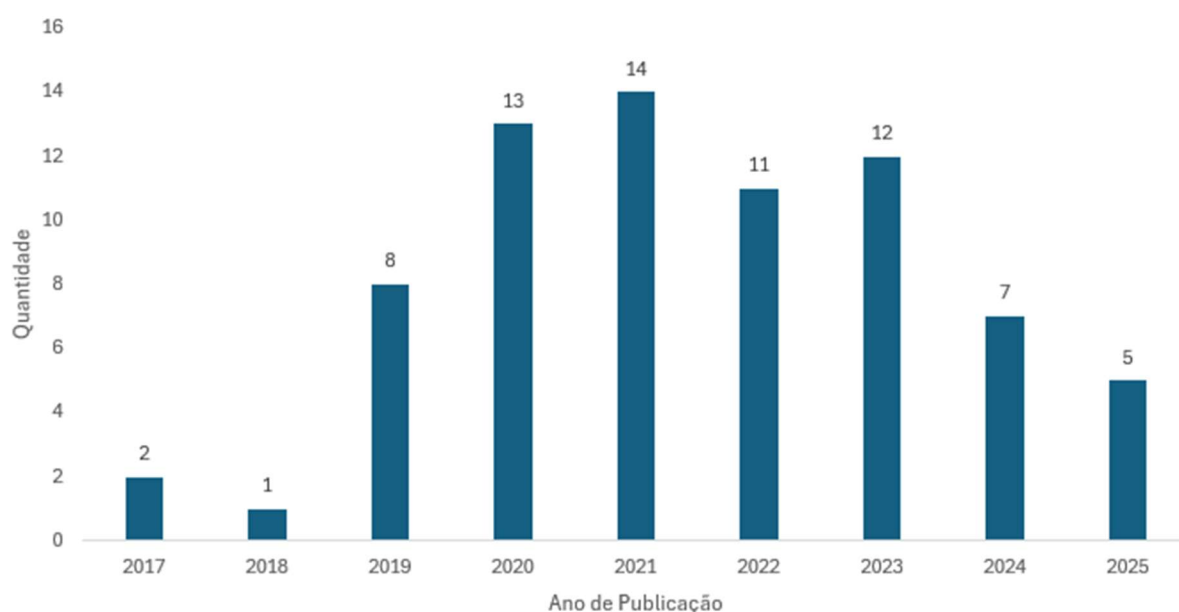
## 7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A presente seção apresenta uma análise detalhada do corpus de 73 artigos selecionados, publicados no período de 2017 a 2025. O objetivo é mapear o estado da arte na aplicação de deep learning na ciência dos materiais, identificando tendências, lacunas e os principais focos da comunidade científica. A discussão será organizada em eixos temáticos, seguindo a estrutura de classificação definida na metodologia, conectando os resultados quantitativos com os fundamentos teóricos e

os desafios práticos já discutidos neste trabalho.

A aplicação de deep learning para a previsão de propriedades mecânicas de materiais é um campo de pesquisa notavelmente recente e em franca expansão. A Figura 19 ilustra a distribuição dos artigos selecionados por ano de publicação, revelando uma tendência de crescimento acentuado e consistente, o que indica um aumento no interesse da comunidade científica pelo tema.

Figura 19 - Distribuição de Artigos por Ano de Publicação.



Observa-se que o período inicial (2017-2019) representa uma fase exploratória, com um número ainda incipiente de publicações. Este período foi marcado pela aplicação de arquiteturas já consolidadas em outras áreas, como as Redes Neurais Convolucionais (CNNs) e Redes de Crenças Profundas (DBNs), para validar a viabilidade do deep learning em problemas de materiais. A partir de 2020, o campo entra em uma fase de crescimento acelerado, atingindo um pico de produção em 2021, com 14 artigos. Posteriormente, a estabilização no número de artigos pode indicar uma fase de consolidação da área, após a natural diminuição do pico de novidade associado à introdução de uma tecnologia disruptiva. É notável que cerca de 85% de toda a produção científica analisada (62 dos 73 artigos) foi

publicada a partir desse ano.

Essa expansão pode ser diretamente associada à superação de alguns dos desafios que discutimos no Tópico 4. O aumento expressivo de publicações coincide com a consolidação de técnicas para a construção de bancos de dados via simulação computacional, uma solução direta para a escassez de dados experimentais. Além disso, a análise temporal revela o surgimento de temas mais sofisticados. Por exemplo, os primeiros artigos focados em Interpretabilidade (XAI) começam a aparecer de forma mais consistente a partir de 2020, e a Aprendizagem por Transferência (Transfer Learning), uma solução para o desafio da Generalização, também surge nesse período mais maduro da pesquisa. Isso indica que, após uma fase inicial de validação da precisão dos modelos, a comunidade científica passou a se dedicar a tornar os modelos de deep learning mais robustos, transparentes e aplicáveis a cenários do mundo real.

O estudo das propriedades mecânicas investigadas revela um foco concentrado da comunidade científica em áreas específicas, refletindo tanto a relevância industrial quanto a maturidade da aplicação de deep learning para cada tipo de problema. A Figura 20, que apresenta a distribuição dos artigos por propriedade, evidencia uma clara predominância de estudos voltados para a previsão de propriedades fundamentais, como Resistência à Tração e Resistência ao Escoamento.

Figura 20 - Distribuição dos artigos por Propriedade Mecânica Estudada.

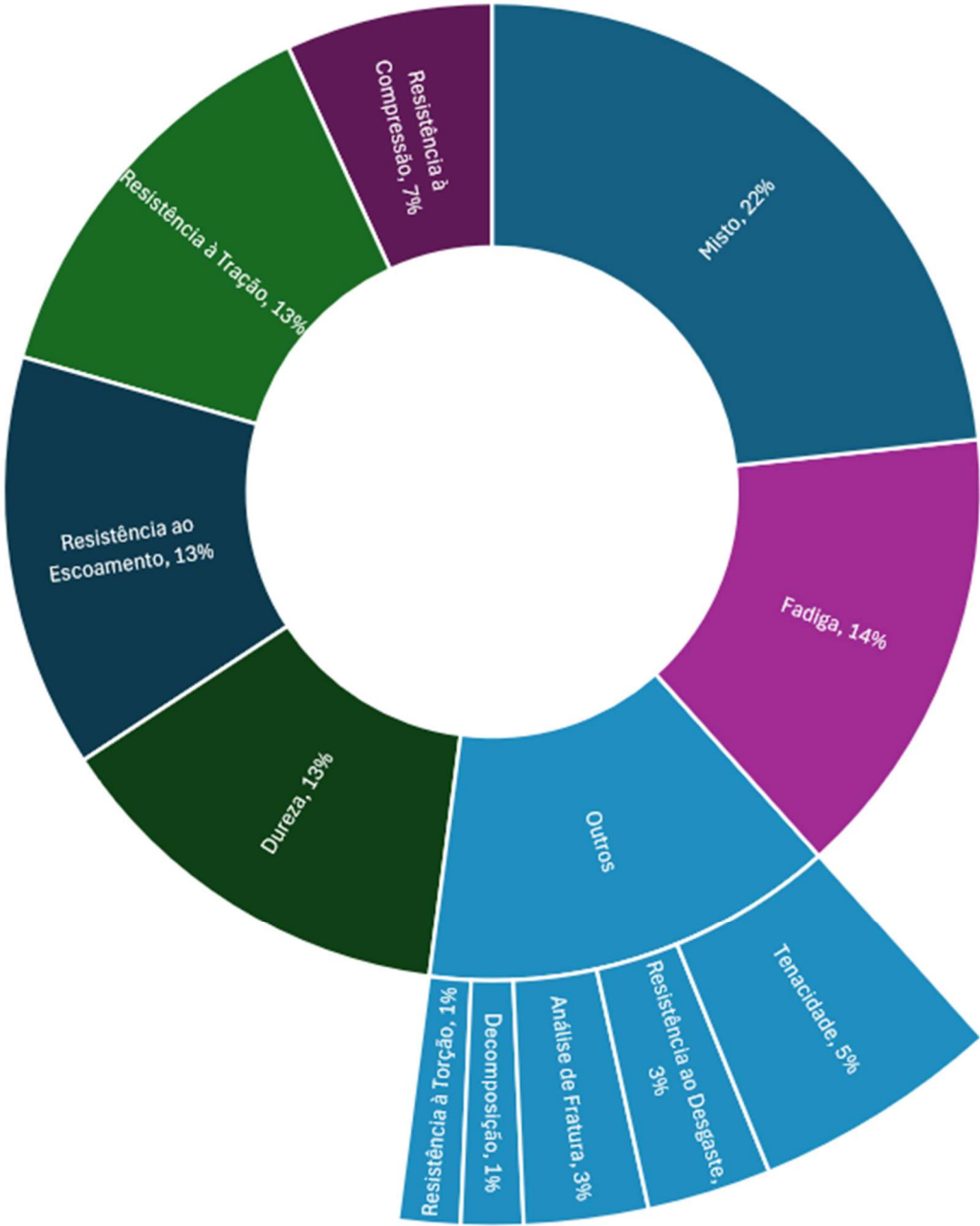


Tabela 1 - Concordância dos artigos por Propriedade Mecânica Estudada.

Propriedades Mecânicas	Autores Relacionados
Resistência à Tração	(Carl Herriott, 2020); (Wei-gang Li, 2019); (Haoliang Jiang, 2020); (Somphop Chiaranai, 2023); (Xin Luo, 2025); (Jianjing Zhang, 2019);

	(Zhizhou Zhang, 2024); (Fasikaw Kibrete, 2023); (Lei Han, 2025); (Jesús de-Prado-Gil, 2022); (Daniel Vuong, 2023)
Resistência à Compressão	(Mohammad Azarafza, 2022); (Xiang Li, 2019); (Brian Gallagher, 2018); (Yang Yu, 2023); (Zhiyuan Fang, 2021)
Fadiga	(Si-Yu Shao, 2017); (Jingye Yang, 2021); (Xiao-Cheng Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2021); (Xin Zhang, 2021); (Chongcong Tao, 2021); (Steph-Yves M. Louis, 2020); (Zhikun Huang, 2024); (Xiang Li, 2020); (Shahin Siahpour, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024)
Resistência ao Escoamento	(Mojtaba Mozaffar, 2019); (Yasin Shokrollahi, 2023); (Ivan P. Malashin, 2025); (Im Doo Jung, 2020); (Chunyuan Cui, 2022); (Xiao Shang, 2023); (Lei Han, 2025); (Yuhan Gao, 2024); (Chia-Wei Hsu, 2021); (Zhizhou Zhang, 2020)
Dureza	(Fu-Zhi Dai, 2019); (Soo Young Lee, 2020); (Junbo Niu, 2023); (Vijay Kakani, 2021); (Wenzhen Yuan, 2017); (Sehyeok Oh, 2019); (Xu Long, 2023); (Selvarasu Saminathan Jayakumar Lakshmipathy, 2021); (Samgeeth Sen, 2023); (Filip Nikolić, 2023)
Tenacidade	(Jing-Ang Zhu, 2021); (Hashina Parveen Anwar Al, 2022); (Sofien

	Akrichi, 2019); (Si-wei Wu, 2020)
Análise de Fratura	(Y. Mototake, 2022); (Muhammad Muzammil Azad, 2024)
Resistência ao Desgaste	(Mingming Shen, 2022); (Mingwei Wang, 2020)
Resistência à Torção	(Kimia Gholami, 2023)
Decomposição	(Hao Gong, 2020)
Misto	(Sang Ye, 2019); (Gang Xu, 2022); (Hamed Bolandi, 2022); (Lu Lu, 2020); (Yuichiro Murakami, 2024); (Zhenze Yang, 2021); (Erfan Maleki, 2023); (Kamal Choudhary, 2022); (Zhenze Yang, 2021); (Ru Yang, 2022); (Tongming Qu, 2021); (Charles Yang, 2020); (Ravi Kiran Bollinenia, 2025); (Zhenru Chen, 2024); (Varun Raaghav, 2025); (Shiming Liu, 2021); (Richard J. Pyle, 2022)

Essas duas propriedades, somadas à categoria "Misto" (que frequentemente engloba a predição simultânea de múltiplos parâmetros da curva tensão-deformação), correspondem a 48% de todos os artigos analisados. Essa concentração é esperada, pois, como discutido no Tópico 3, a curva tensão-deformação é a "impressão digital" do comportamento mecânico de um material, e a previsão precisa desses limites é um passo fundamental para validar a eficácia de qualquer modelo de IA. A relativa facilidade em obter grandes volumes de dados de tração, seja por ensaios padronizados ou por simulações, reforça essa tendência, alinhando-se diretamente ao desafio da Construção do Banco de Dados que abordamos no Tópico 4.

Em segundo lugar, a Fadiga desponta como uma das áreas de maior interesse, representando 14% dos estudos. Este foco se justifica pela complexidade e pelo alto valor agregado da previsão da vida em fadiga, um problema onde os

métodos tradicionais são notoriamente caros e demorados. A capacidade dos modelos de deep learning, especialmente as Redes Neurais Recorrentes (RNNs) de lidar com o acúmulo de dano ao longo do tempo, faz desta uma área de aplicação natural e de grande impacto industrial.

Propriedades como Dureza (13%) e Resistência à Compressão (7%) também recebem atenção considerável. Em contraste, áreas mais complexas ou de nicho, como Tenacidade (5%), Resistência ao Desgaste (3%) e Análise de Fratura (3%), aparecem com menor frequência. Esta distribuição sugere uma lacuna na literatura e uma oportunidade para futuras pesquisas, possivelmente indicando que a modelagem desses fenômenos exige dados mais complexos (como campos de deformação ou imagens de superfícies desgastadas), o que nos conecta diretamente ao desafio da Complexidade e Qualidade dos Dados.

O exame das metodologias de deep learning adotadas na literatura mostra preferência por certas arquiteturas, o que está diretamente ligado à natureza dos dados e aos problemas específicos da ciência dos materiais. A Figura 21 que detalha a distribuição dos artigos por tipo de rede neural, mostra um domínio expressivo das Redes Neurais Convolucionais (CNNs), que foram utilizadas em 43% dos estudos analisados.

Figura 21 - Distribuição dos artigos por Rede Neural Utilizada.

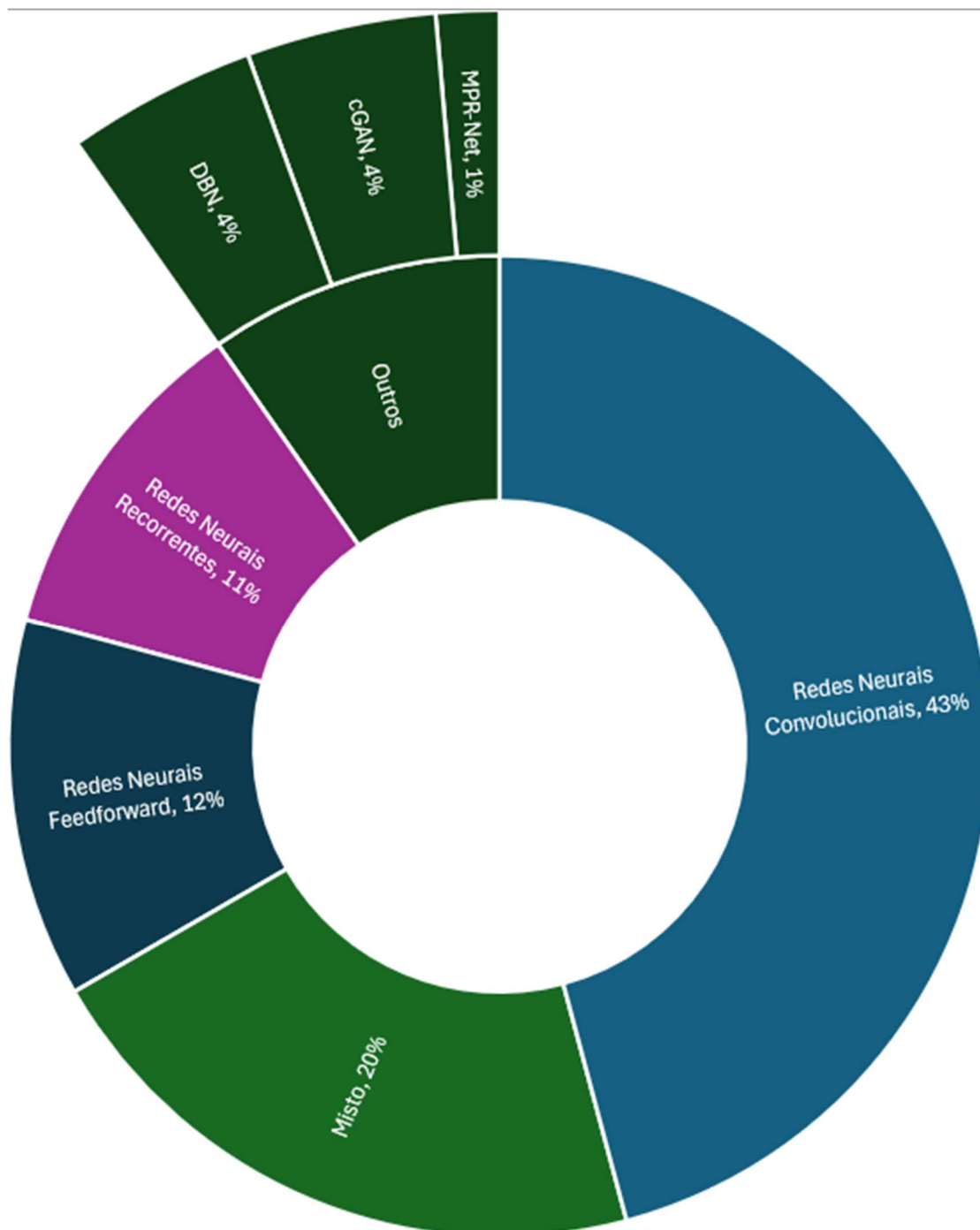


Tabela 2 - Concordância dos artigos por Metodologia de IA Empregada.

Rede Neural utilizada	Autores relacionados
Redes Neurais Convolucionais	(Sang Ye, 2019); (Xiang Li, 2019); (Carl Herriott, 2020); (Kimia Gholami, 2023); (Wei-gang Li, 2019); (Hamed

	<p>Bolandi, 2022); (Brian Gallagher, 2018); (Yuichiro Murakami, 2024); (Xin Zhang, 2021); (Y. Mototake, 2022); (Hashina Parveen Anwar Al, 2022); (Zhenze Yang, 2021); (Yang Yu, 2023); (Ru Yang, 2022); (Hao Gong, 2020); (Charles Yang, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024); (Somphop Chiaranai, 2023); (Xin Luo, 2025); (Yasin Shokrollahi, 2023); (Mingming Shen, 2022); (Xiao Shang, 2023); (Steph-Yves M. Louis, 2020); (Filip Nikolić, 2023); (Yuhan Gao, 2024); (Daniel Vuong, 2023); (Zhenru Chen, 2024); (Varun Raaghav, 2025); (Zhizhou Zhang, 2020); (Shiming Liu, 2021); (Xiang Li, 2020); (Richard J. Pyle, 2022); (Shahin Siahpour, 2020)</p>
Redes Neurais Recorrentes	<p>(Gang Xu, 2022); (Chongcong Tao, 2021); (Mojtaba Mozaffar, 2019); (Tongming Qu, 2021); (Jianjing Zhang, 2019); (Xu Long, 2023); (Lei Han, 2025); (Mingwei Wang, 2020)</p>
Redes Neurais Feedforward	<p>(Mohammad Azarafza, 2022); (Lu Lu, 2020); (Jingye Yang, 2021); (Erfan Maleki, 2021); (Im Doo Jung, 2020); (Chunyuan Cui, 2022); (Selvarasu Saminathan Jayakumar Lakshmipathy, 2021); (Samgeeth Sen, 2023); (Jesús de-Prado-Gil, 2022)</p>
cGAN	<p>(Zhenze Yang, 2021); (Haoliang Jiang, 2020); (Sehyeok Oh, 2019)</p>

DBN	(Si-Yu Shao, 2017); (Sofien Akricchi, 2019); (Zhiyuan Fang, 2021)
MPR-Net	(Zhizhou Zhang, 2024)
Deep Learning Potential	(Fu-Zhi Dai, 2019)
Misto	(Jing-Ang Zhu, 2021); (Soo Young Lee, 2020); (Xiao-Cheng Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2023); (Junbo Niu, 2023); (Vijay Kakani, 2021); (Kamal Choudhary, 2022); (Wenzhen Yuan, 2017); (Si-wei Wu, 2020); (Fasikaw Kibrete, 2023); (Ravi Kiran Bollinenia, 2025); (Zhikun Huang, 2024); (Lei Han, 2025); (Chia-Wei Hsu, 2021); (Muhammad Muzammil Azad, 2024); (Ivan P. Malashin, 2025)

Essa predominância das CNNs é uma consequência direta do desafio da Complexidade dos Dados, discutido no Tópico 4.2. Uma parcela significativa da pesquisa na área utiliza imagens de microestrutura como principal fonte de dados para prever propriedades mecânicas. Como apresentado no Tópico 2, as CNNs são arquiteturas especializadas na extração de características espaciais, o que as torna a ferramenta ideal para aprender as complexas relações entre a morfologia da microestrutura e o desempenho do material.

As Redes Neurais Feedforward (agrupando aqui as arquiteturas ANN, DNN, FCNN e Feedforward tradicionais) e as Redes Neurais Recorrentes (RNNs) (incluindo LSTMs) também figuram com relevância, correspondendo a 12% e 11% dos trabalhos, respectivamente. O uso de RNNs está associado a problemas que envolvem dados sequenciais, como a previsão de curvas de tensão-deformação ou a análise de processos de fabricação que evoluem no tempo, como a manufatura aditiva.

Arquiteturas especializadas, como as Redes de Crenças Profundas (DBNs) e as Redes Generativas Adversariais (cGANs), embora menos frequentes (ambas

com 4%), representam a fronteira da pesquisa. O uso de DBNs, por exemplo, é uma resposta ao desafio da escassez de dados, enquanto as cGANs são uma tendência futura para a geração de dados sintéticos e o projeto inverso de materiais. Por fim, a categoria "Misto", com 20%, indica uma crescente para o uso de arquiteturas híbridas ou de múltiplos modelos (ensemble), buscando combinar as forças de diferentes redes para resolver problemas ainda mais complexos.

A figura 7.4 mostra a natureza dos dados de entrada evidenciando a crescente sofisticação dos modelos de deep learning e a sua capacidade de lidar com informações heterogêneas. Embora os dados numéricos tabulares ainda representem uma parcela significativa (28%), refletindo a abordagem tradicional de alimentar redes neurais com parâmetros de processo e composição química, a tendência aponta para o uso de dados mais complexos e multimodais.

Figura 22 - Distribuição dos artigos por Tipo de Dado de Entrada.

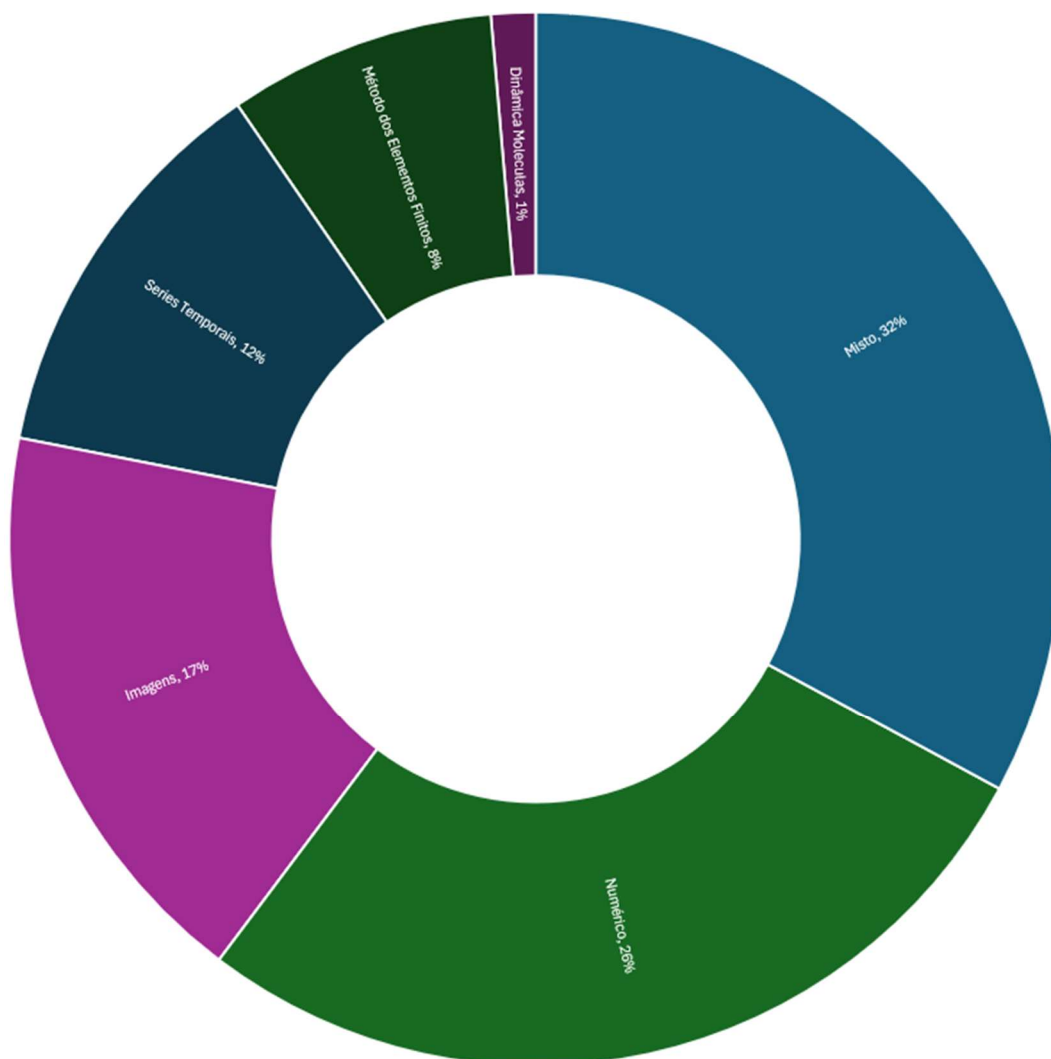


Tabela 3 - Concordância dos artigos por Tipo de Dado de Entrada.

Tipo de Dado de Entrada	Autores relacionados
Númerico	(Mohammad Azarafza, 2022); (Lu Lu, 2020); (Soo Young Lee, 2020); (Erfan Maleki, 2021); (Junbo Niu, 2023); (Sofien Akrichi, 2019); (Yang Yu, 2023); (Zhiyuan Fang, 2021); (Tongming Qu, 2021); (Ivan P. Malashin, 2025); (Im Doo Jung, 2020); (Chunyuan Cui, 2022); (Xu Long, 2023); (Lei Han, 2025); (Si-wei Wu, 2020); (Selvarasu Saminathan Jayakumar Lakshmipathy, 2021); (Samgeeth Sen, 2023); (Jesús de-Prado-Gil, 2022); (Filip Nikolić, 2023); (Zhenru Chen, 2024)
Imagens	(Brian Gallagher, 2018); (Y. Mototake, 2022); (Hashina Parveen Anwar Al, 2022); (Wenzhen Yuan, 2017); (Ru Yang, 2022); (Hao Gong, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024); (Xin Luo, 2025); (Mingming Shen, 2022); (Xiao Shang, 2023); (Fasikaw Kibrete, 2023); (Somphop Chiaranai, 2023); (Daniel Vuong, 2023)
Séries Temporais	(Si-Yu Shao, 2017); (Gang Xu, 2022); (Jingye Yang, 2021); (Xin Zhang, 2021); (Chongcong Tao, 2021); (Mojtaba Mozaffar, 2019); (Xiang Li, 2020); (Shahin Siahpour, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024)

Método dos Elementos Finitos	(Hamed Bolandi, 2022); (Yasin Shokrollahi, 2023); (Yuhan Gao, 2024); (Chia-Wei Hsu, 2021); (Shiming Liu, 2021); (Richard J. Pyle, 2022)
Misto	(Sang Ye, 2019); (Xiang Li, 2019); (Carl Herriott, 2020); (Jing-Ang Zhu, 2021); (Kimia Gholami, 2023); (Wei-gang Li, 2019); (Yuichiro Murakami, 2024); (Zhenze Yang, 2021); (Xiao-Cheng Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2023); (Vijay Kakani, 2021); (Kamal Choudhary, 2022); (Zhenze Yang, 2021); (Charles Yang, 2020); (Haoliang Jiang, 2020); (Jianjing Zhang, 2019); (Sehyeok Oh, 2019); (Zhizhou Zhang, 2024); (Steph-Yves M. Louis, 2020); (Ravi Kiran Bollinenia, 2025); (Zhikun Huang, 2024); (Mingwei Wang, 2020); (Varun Raaghav, 2025); (Zhizhou Zhang, 2020)
Dinâmica Moleculas	(Fu-Zhi Dai, 2019)

A categoria Misto, que representa a combinação de diferentes tipos de dados (como imagens e parâmetros numéricos), é a mais prevalente, com 32% dos artigos. Isso indica que a comunidade científica reconhece a necessidade de fornecer aos modelos um contexto mais rico, combinando, por exemplo, a microestrutura visual com as condições de processamento. Essa abordagem está alinhada com o desafio da Complexidade e Qualidade dos Dados discutido no Tópico 4, onde a integração de fontes de informação heterogêneas é fundamental para capturar a física completa do problema.

O uso direto de imagens (17%) e séries temporais (12%) também é notável e

se correlaciona diretamente com a popularidade das arquiteturas de IA que analisaremos a seguir. O crescimento no uso de imagens de microestrutura justifica o domínio das CNNs, enquanto os dados de séries temporais, como curvas de tensão-deformação ou sinais de sensores, são o domínio das RNNs e LSTMs.

Cerca de 8% dos estudos utilizam dados provenientes diretamente do Método dos Elementos Finitos (FEM). Este dado reforça nossa discussão sobre a Construção do Banco de Dados, mostrando que a simulação computacional não é apenas uma ferramenta para gerar grandes volumes de dados, mas também uma fonte de dados de alta complexidade, como campos de tensão e deformação, que são essenciais para treinar modelos capazes de prever respostas mecânicas complexas.

O levantamento da abordagem de interpretabilidade dos modelos, cujos dados estão compilados na Figura 23, revela um dos maiores desafios e, ao mesmo tempo, uma das mais significativas áreas de crescimento para a aplicação de deep learning na ciência dos materiais. Os resultados são contundentes: uma esmagadora maioria de 76% dos artigos (60 dos 73 analisados) trata os modelos de IA como uma "Caixa-Preta" (Black Box).

Este dado quantitativo corrobora diretamente a discussão do Tópico 4.3, evidenciando que o foco principal da pesquisa até o momento tem sido a validação da capacidade preditiva dos modelos, muitas vezes em detrimento da compreensão de seus mecanismos internos de decisão. Os pesquisadores, em grande parte, demonstram que os modelos funcionam, mas não exploram o "porquê" de funcionarem. Essa abordagem, embora eficaz para muitas tarefas, representa uma barreira para a adoção da IA em aplicações de alta responsabilidade na engenharia, onde a confiança e a validação física são indispensáveis.

No entanto, a análise também aponta para uma tendência futura promissora. Um total de 17% dos estudos (14 artigos) já emprega ativamente técnicas de Inteligência Artificial Explicável (XAI). A presença desses métodos, embora ainda minoritária, indica uma crescente conscientização da comunidade científica sobre a necessidade de transparência. Como vimos no Tópico 5, o uso de técnicas como SHAP e Grad-CAM está se tornando mais comum para validar se as previsões dos modelos estão alinhadas com o conhecimento metalúrgico e físico, transformando a IA de uma simples ferramenta de predição em um potencial instrumento para a

descoberta de novo conhecimento científico. A pequena fração de artigos classificados como "Misto" (2,6%) representa, provavelmente, trabalhos que, embora não apliquem uma técnica de XAI formal, realizam análises de sensibilidade paramétrica para entender a influência das variáveis de entrada.

Figura 23 - Distribuição dos artigos por Abordagem de Interpretabilidade.

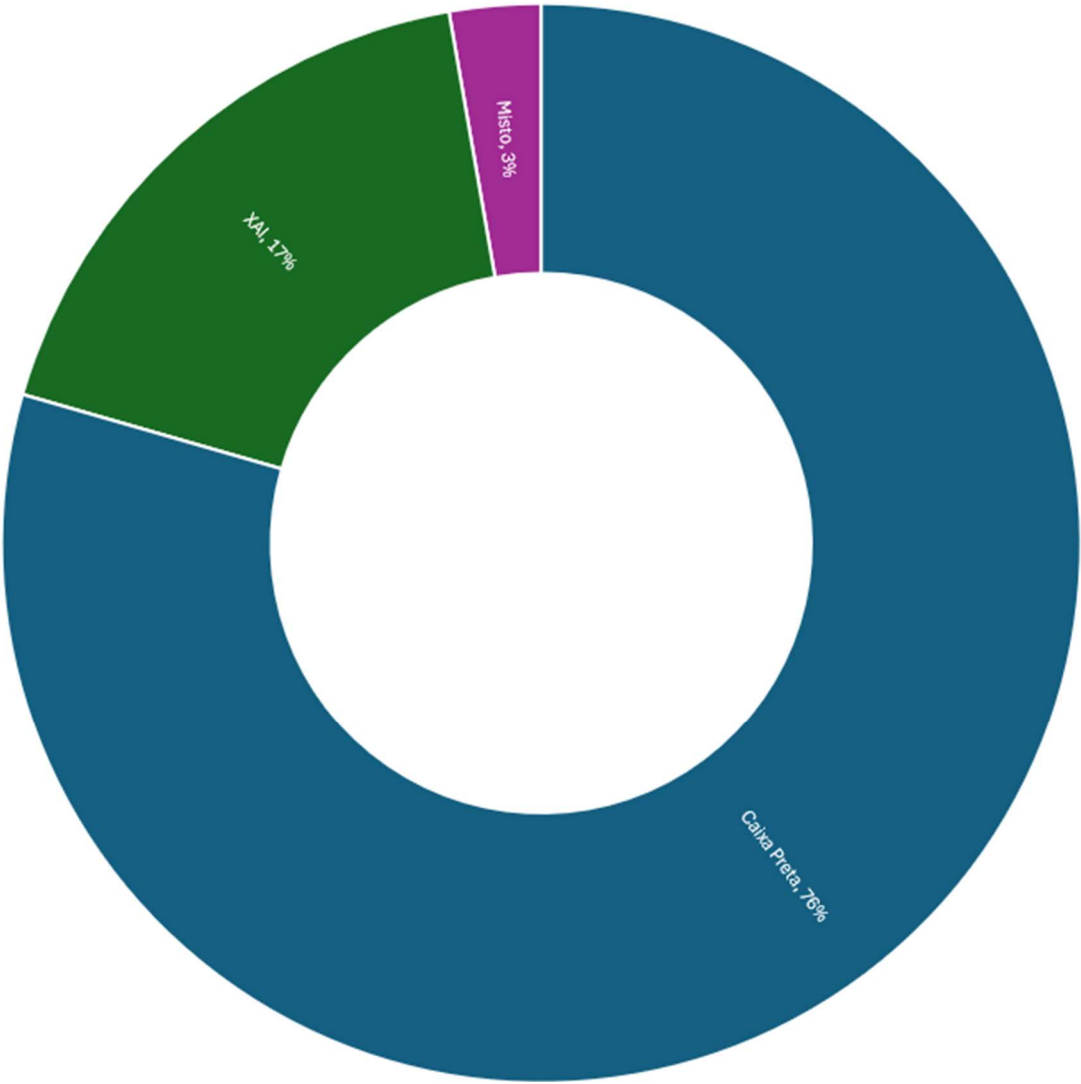


Tabela 4 - Concordância dos artigos por Abordagem de Interpretabilidade.

Abordagem de Interpretabilidade	Autores relacionados
Caixa-Preta	(Sang Ye, 2019); (Si-Yu Shao, 2017); (Mohammad Azarafza, 2022); (Xiang

Li, 2019); (Carl Herriott, 2020); (Fu-Zhi Dai, 2019); (Jing-Ang Zhu, 2021); (Kimia Gholami, 2023); (Gang Xu, 2022); (Wei-gang Li, 2019); (Hamed Bolandi, 2022); (Lu Lu, 2020); (Brian Gallagher, 2018); (Yuichiro Murakami, 2024); (Zhenze Yang, 2021); (Jingye Yang, 2021); (Xiao-Cheng Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2021); (Xin Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2023); (Junbo Niu, 2023); (Vijay Kakani, 2021); (Y. Mototake, 2022); (Hashina Parveen Anwar Al, 2022); (Kamal Choudhary, 2022); (Sofien Akrichi, 2019); (Zhenze Yang, 2021); (Mojtaba Mozaffar, 2019); (Wenzhen Yuan, 2017); (Zhiyuan Fang, 2021); (Ru Yang, 2022); (Hao Gong, 2020); (Tongming Qu, 2021); (Charles Yang, 2020); (Haoliang Jiang, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024); (Xin Luo, 2025); (Yasin Shokrollahi, 2023); (Im Doo Jung, 2020); (Sehyeok Oh, 2019); (Xiao Shang, 2023); (Xu Long, 2023); (Lei Han, 2025); (Steph-Yves M. Louis, 2020); (Si-wei Wu, 2020); (Selvarasu Saminathan Jayakumar Lakshmipathy, 2021); (Ravi Kiran Bollinenia, 2025); (Zhikun Huang, 2024); (Mingwei Wang, 2020); (Jesús de-Prado-Gil, 2022); (Filip Nikolić, 2023); (Yuhan Gao, 2024); (Daniel Vuong, 2023); (Shiming Liu,

	2021); (Xiang Li, 2020); (Richard J. Pyle, 2022); (Shahin Siahpour, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024)
XAI	(Soo Young Lee, 2020); (Chongcong Tao, 2021); (Yang Yu, 2023); (Jianjing Zhang, 2019); (Ivan P. Malashin, 2025); (Chunyuan Cui, 2022); (Zhizhou Zhang, 2024); (Fasikaw Kibrete, 2023); (Somphop Chiaranai, 2023); (Zhenru Chen, 2024); (Chia-Wei Hsu, 2021); (Varun Raaghav, 2025); (Zhizhou Zhang, 2020)
Misto	(Mingming Shen, 2022); (Samgeeth Sen, 2023)

O mape das estratégias de generalização empregadas nos artigos, detalhada na Figura 24, é crucial para avaliar a maturidade e a robustez das pesquisas na área. Garantir que um modelo de deep learning seja capaz de generalizar, ou seja, de fazer previsões precisas para dados novos, é o objetivo final de qualquer aplicação prática. Os dados revelam uma forte consciência da comunidade científica sobre esse desafio.

Figura 24 - Distribuição dos artigos por Técnica de Generalização.

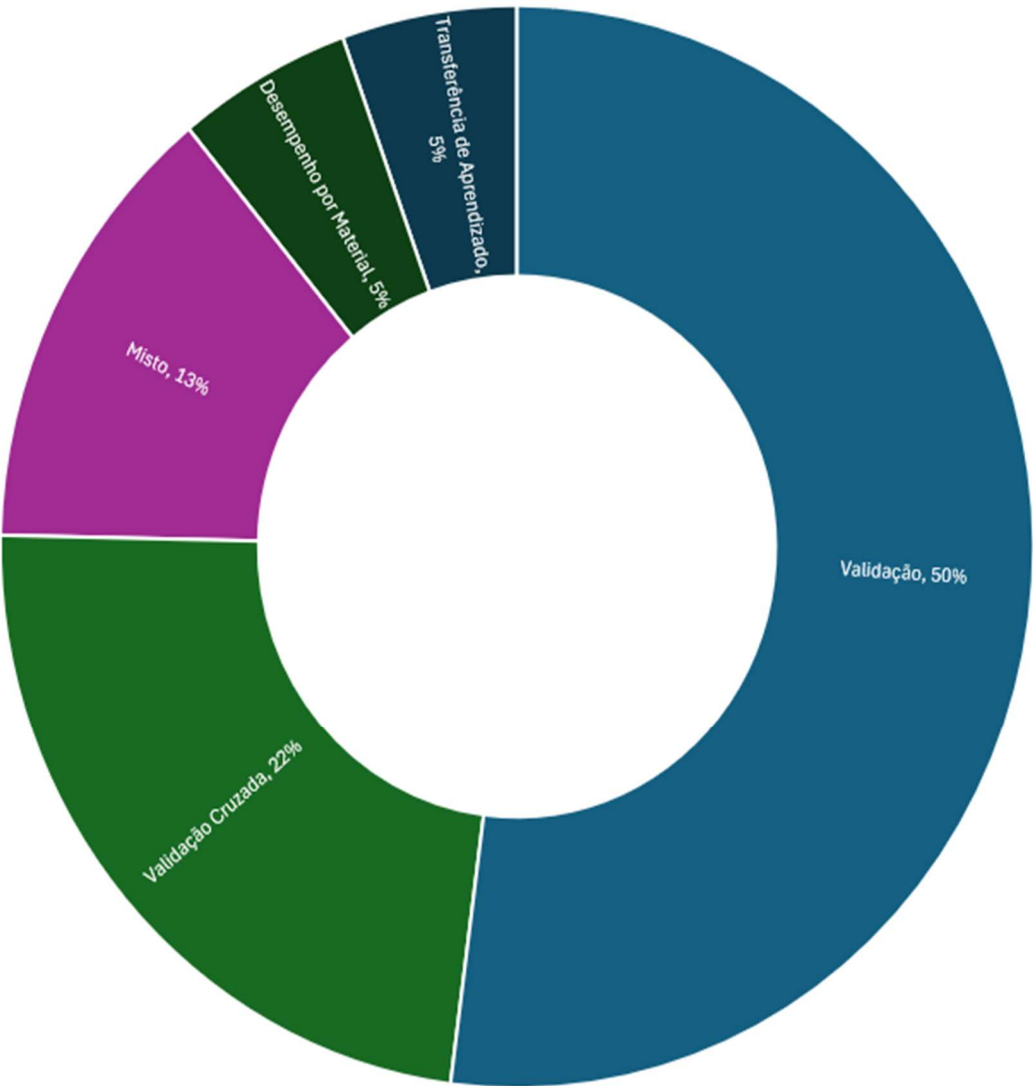


Tabela 5 - Concordância dos artigos por Técnica de Generalização.

Técnica de Generalização	Autores relacionados
Validação	(Sang Ye, 2019); (Si-Yu Shao, 2017); (Mohammad Azarafza, 2022); (Kimia Gholami, 2023); (Wei-gang Li, 2019); (Yuichiro Murakami, 2024); (Soo Young Lee, 2020); (Xiao-Cheng Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2021); (Erfan Maleki, 2023); (Junbo Niu, 2023); (Kamal Choudhary, 2022);

	(Sofien Akrichi, 2019); (Zhenze Yang, 2021); (Mojtaba Mozaffar, 2019); (Zhiyuan Fang, 2021); (Ru Yang, 2022); (Hao Gong, 2020); (Tongming Qu, 2021); (Charles Yang, 2020); (Haoliang Jiang, 2020); (Xin Luo, 2025); (Jianjing Zhang, 2019); (Yasin Shokrollahi, 2023); (Mingming Shen, 2022); (Xiao Shang, 2023); (Xu Long, 2023); (Lei Han, 2025); (Si-wei Wu, 2020); (Selvarasu Saminathan Jayakumar Lakshmipathy, 2021); (Zhikun Huang, 2024); (Samgeeth Sen, 2023); (Yuhan Gao, 2024); (Daniel Vuong, 2023); (Zhenru Chen, 2024); (Chia-Wei Hsu, 2021); (Zhizhou Zhang, 2020); (Shiming Liu, 2021)
Misto	(Jing-Ang Zhu, 2021); (Gang Xu, 2022); (Lu Lu, 2020); (Chongcong Tao, 2021); (Yang Yu, 2023); (Wenzhen Yuan, 2017); (Muhammad Muzammil Azad, 2024); (Fasikaw Kibrete, 2023); (Ravi Kiran Bollinenia, 2025); (Jesús de-Prado-Gil, 2022)
Transferência de Aprendizado	(Chunyuan Cui, 2022); (Xiang Li, 2020); (Richard J. Pyle, 2022); (Shahin Siahpour, 2020)
Desempenho por Material	(Fu-Zhi Dai, 2019); (Zhenze Yang, 2021); (Vijay Kakani, 2021); (Hashina Parveen Anwar Al, 2022)
Validação Cruzada	(Xiang Li, 2019); (Carl Herriott, 2020); (Hamed Bolandi, 2022); (Brian

	Gallagher, 2018); (Jingye Yang, 2021); (Xin Zhang, 2021); (Y. Mototake, 2022); (Ivan P. Malashin, 2025); (Im Doo Jung, 2020); (Sehyeok Oh, 2019); (Zhizhou Zhang, 2024); (Steph-Yves M. Louis, 2020); (Mingwei Wang, 2020); (Filip Nikolić, 2023); (Somphop Chiaranai, 2023); (Varun Raaghav, 2025); (Muhammad Muzammil Azad, 2024)
--	---

A abordagem mais comum é a validação simples (hold-out validation), utilizada em 50,0% dos estudos. Nessa técnica, o banco de dados é dividido em conjuntos de treinamento e teste, sendo uma prática fundamental para uma primeira avaliação do desempenho do modelo. Em segundo lugar, a validação cruzada (cross-validation), uma técnica mais robusta e computacionalmente mais intensiva, foi adotada em 22,0% dos trabalhos. Como discutido no Tópico 4.4, a validação cruzada é especialmente valiosa em cenários com dados limitados — uma realidade comum na ciência dos materiais —, pois garante que todos os dados sejam utilizados tanto para treinamento quanto para teste, oferecendo uma estimativa mais confiável da performance de generalização do modelo.

É interessante notar que 5% dos artigos utilizam explicitamente a Aprendizagem por Transferência (Transfer Learning) como estratégia de generalização. Esta abordagem, que também foi apontada como uma tendência futura no Tópico 5, é uma solução direta para o desafio de adaptar modelos treinados, muitas vezes com dados de simulação, para domínios com dados experimentais escassos, mitigando o "hiato de realidade".

A categoria "Misto" (13%) agrupa estudos que combinam múltiplas técnicas, como validação simples com regularização (e.g., dropout) ou outras formas de controle de overfitting. A avaliação de desempenho por material (5%) mostra a diversidade de métodos empregados para assegurar que os modelos não estejam apenas "memorizando" os dados de treinamento, mas sim aprendendo as relações

físicas subjacentes que governam as propriedades dos materiais.

A análise das estratégias para a construção de bancos de dados, apresentada na Figura 25 vai ao cerne do principal desafio prático da aplicação de deep learning na ciência dos materiais. Os dados revelam um campo dividido, buscando equilibrar a fidelidade dos dados experimentais com a escalabilidade dos dados sintéticos.

Figura 25 - Distribuição dos artigos por Estratégia de Construção do Banco de Dados.

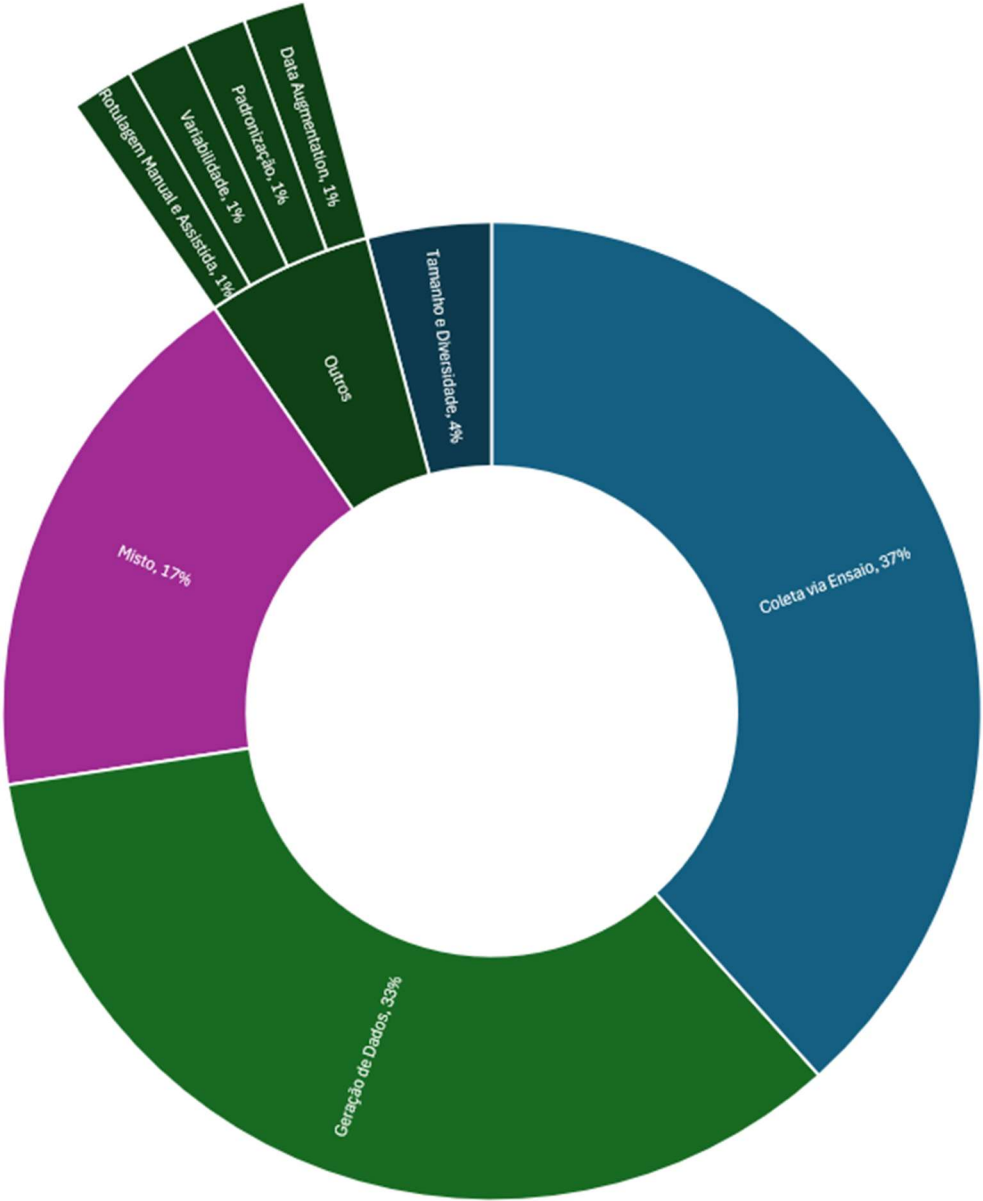


Tabela 6 - Concordância dos artigos por Técnica de Generalização.

Estratégia de Construção do Banco	Artigos relacionados
-----------------------------------	----------------------

de Dados	
Coleta via Ensaio	(Si-Yu Shao, 2017); (Brian Gallagher, 2018); (Yuichiro Murakami, 2024); (Jingye Yang, 2021); (Xiao-Cheng Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2021); (Xin Zhang, 2021); (Erfan Maleki, 2023); (Sofien Akricchi, 2019); (Chongcong Tao, 2021); (Yang Yu, 2023); (Wenzhen Yuan, 2017); (Xin Luo, 2025); (Jianjing Zhang, 2019); (Ivan P. Malashin, 2025); (Mingming Shen, 2022); (Zhizhou Zhang, 2024); (Steph-Yves M. Louis, 2020); (Si-wei Wu, 2020); (Selvarasu Saminathan Jayakumar Lakshmipathy, 2021); (Zhikun Huang, 2024); (Samgeeth Sen, 2023); (Mingwei Wang, 2020); (Jesús de-Prado-Gil, 2022); (Somphop Chiaranai, 2023); (Xiang Li, 2020); (Richard J. Pyle, 2022); (Shahin Siahpour, 2020)
Data Augmentation	(Muhammad Muzammil Azad, 2024)
Geração de Dados	(Sang Ye, 2019); (Xiang Li, 2019); (Carl Herriott, 2020); (Fu-Zhi Dai, 2019); (Jing-Ang Zhu, 2021); (Kimia Gholami, 2023); (Hamed Bolandi, 2022); (Lu Lu, 2020); (Zhenze Yang, 2021); (Soo Young Lee, 2020); (Y. Mototake, 2022); (Mojtaba Mozaffar, 2019); (Zhiyuan Fang, 2021); (Ru Yang, 2022); (Tongming Qu, 2021); (Charles Yang, 2020); (Haoliang Jiang,

	2020); (Yasin Shokrollahi, 2023); (Xiao Shang, 2023); (Xu Long, 2023); (Lei Han, 2025); (Ravi Kiran Bollinenia, 2025); (Yuhan Gao, 2024); (Chia-Wei Hsu, 2021); (Shiming Liu, 2021)
Misto	(Junbo Niu, 2023); (Vijay Kakani, 2021); (Kamal Choudhary, 2022); (Zhenze Yang, 2021); (Hao Gong, 2020); (Muhammad Muzammil Azad, 2024); (Im Doo Jung, 2020); (Chunyuan Cui, 2022); (Sehyeok Oh, 2019); (Fasikaw Kibrete, 2023); (Zhenru Chen, 2024); (Varun Raaghav, 2025); (Zhizhou Zhang, 2020)
Padronização	(Gang Xu, 2022)
Rotulagem Manual e Assistida	(Daniel Voun, 2023)
Tamanho e Diversidade	(Mohammad Azarafza, 2022); (Wei-gang Li, 2019); (Filip Nikolić, 2023)
Variabilidade	(Hashina Parveen Anwar Al, 2022)

Observa-se uma distribuição quase equitativa entre a Coleta via ensaio (37%) e a Geração de Dados por simulação (33%). Este balanço reflete diretamente a discussão do Tópico 4.1. Por um lado, a coleta experimental continua sendo o pilar para garantir que os modelos sejam treinados com dados que representam a realidade física. Por outro, a expressiva quantidade de estudos que recorrem à geração de dados sintéticos (via FEM, Dinâmica Molecular, etc.) confirma que esta é a principal estratégia da comunidade científica para superar a limitação de custo e tempo dos ensaios físicos, permitindo a criação dos grandes volumes de dados que os modelos de deep learning demandam.

A categoria "Misto", com 17%, é particularmente reveladora. Ela representa uma tendência sofisticada e crescente, onde os pesquisadores combinam o melhor dos dois mundos: utilizam um conjunto menor de dados experimentais de alta fidelidade para validar, calibrar ou refinar modelos que foram pré-treinados em grandes volumes de dados sintéticos. Essa abordagem híbrida é uma das soluções mais eficazes para o problema do "hiato de realidade" entre simulação e experimento, que discutimos no Tópico 4.4 sobre Generalização.

As demais categorias, embora menos frequentes, apontam para técnicas emergentes e focos específicos. O "Data Augmentation" (1%) e a preocupação com "Tamanho e Diversidade" (4%) mostram uma crescente maturidade na curadoria dos dados. A menção a "Rotulagem Manual e Assistida" (1%) destaca a importância da qualidade dos rótulos, um ponto crucial para o sucesso do aprendizado supervisionado. Em suma, os dados mostram que a construção de um banco de dados robusto é um campo de pesquisa ativo, com uma clara evolução de uma dependência exclusiva de ensaios para uma sinergia inteligente entre dados experimentais e sintéticos.

Para concluir, os resultados desta revisão sistemática pintam o retrato de um campo de pesquisa em rápida maturação, que, após validar a viabilidade do deep learning para prever propriedades fundamentais como a resistência à tração e a fadiga, agora se volta para desafios mais complexos. A análise quantitativa expõe um claro movimento da comunidade científica em direção ao uso de dados de imagem e simulação para alimentar arquiteturas especializadas, como as CNNs, que já dominam o cenário com 43% das aplicações. No entanto, a investigação também revela os principais gargalos que definirão as tendências futuras: a esmagadora predominância de modelos "Caixa-Preta" (76% dos estudos), que evidencia a necessidade urgente de avanços em interpretabilidade (XAI), e a busca contínua por estratégias robustas para a construção de bancos de dados e a generalização dos modelos, onde a sinergia entre dados experimentais e sintéticos surge como a solução mais promissora.

## 8 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este estudo, por meio de uma revisão sistemática da literatura, concluiu que a aplicação de deep learning para a previsão de propriedades mecânicas de materiais é um campo de pesquisa recente e em crescimento acelerado. A análise revelou um foco predominante em arquiteturas de Redes Neurais Convolucionais (CNNs), impulsionado pela crescente utilização de imagens de microestrutura como dado de entrada. Verificou-se também que os estudos se concentram na predição de propriedades fundamentais, como resistência à tração e fadiga, e que a superação da escassez de dados experimentais tem sido contornada por uma sinergia entre ensaios físicos e a geração de grandes volumes de dados sintéticos via simulação computacional.

Apesar do sucesso preditivo dos modelos, a pesquisa demonstrou que desafios críticos persistem e definem a fronteira atual do conhecimento. A principal limitação identificada é a natureza de "Caixa-Preta" da maioria dos modelos, que, embora precisos, carecem de interpretabilidade, dificultando a validação física de suas decisões. Adicionalmente, a construção de bancos de dados robustos e a capacidade de generalização dos modelos para dados do mundo real, transpondo o "hiato" entre simulação e realidade, continuam a ser barreiras significativas.

Portanto, constatou-se que o campo está em um ponto de transição: de uma fase inicial focada em validar a acurácia dos modelos, para uma etapa de amadurecimento que busca criar ferramentas de IA mais robustas, transparentes e confiáveis. A tendência futura aponta para a integração desses modelos em sistemas de Projeto Inverso de Materiais, onde a inteligência artificial poderá não apenas prever, mas também guiar a descoberta e o desenvolvimento de novos materiais com propriedades otimizadas.

## 9 REFERÊNCIAS

ADAPA, Venkata Surya Karthik; KALIDINDI, Surya R.; SALDANA, Christopher J. Rapid Development of Metal Additive Manufacturing Using Artificial Intelligence/Machine Learning and High-Throughput Material Testing. **Annual Review of Materials Research**, v. 55, 2025.

AKRICHI, Sofien, et al. Roundness and positioning deviation prediction in single point incremental forming using deep learning approaches. **Advances in Mechanical Engineering**, v. 11, n. 7, p. 1687814019864465, 2019.

ANWAR ALI, Hashina Parveen, et al. Dynamic modeling of intrinsic self-healing polymers using deep learning. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 14, n. 46, p. 52486-52498, 2022.

AZAD, Muhammad Muzammil, et al. Damage Localization and Severity Assessment in Composite Structures Using Deep Learning Based on Lamb Waves. **Sensors**, v. 24, n. 24, p. 8057, 2024.

AZARAFZA, Mohammad; BONAB, Masoud Hajjalilue; DERAKHSHANI, Reza. A deep learning method for the prediction of the index mechanical properties and strength parameters of marlstone. **Materials**, v. 15, n. 19, p. 6899, 2022.

BASTOS, Nelson; PRATES, Pedro André; ANDRADE-CAMPOS, António. Material parameter identification of elastoplastic constitutive models using machine learning approaches. **Key Engineering Materials**, v. 926, p. 2193-2200, 2022.

BOLANDI, Hamed, et al. Bridging finite element and deep learning: High-resolution stress distribution prediction in structural components. **Frontiers of Structural and Civil Engineering**, v. 16, n. 11, p. 1365-1377, 2022.

BOLLINENI, Ravi Kiran, et al. **Inverse Design of Hypoeutectoid Pearlite Steel Microstructures Using a Deep Learning and Genetic Algorithm Optimization Framework**. SSRN, 2023. Disponível em: SSRN 5383372.

CHEN, Zhenru. **Deep Learning Enabled Materials Design and Characterization**. 2024. Tese (Doutorado) – University of Missouri-Columbia, Columbia, 2024.

CHOUDHARY, Kamal, et al. Recent advances and applications of deep learning methods in materials science. **npj Computational Materials**, v. 8, n. 1, p. 59, 2022.

CUI, Chunyuan, et al. Physical metallurgy guided deep learning for yield strength of hot-rolled steel based on the small labeled dataset. **Materials & Design**, v. 223, p. 111269, 2022.

DAI, Fu-Zhi, et al. Theoretical prediction on thermal and mechanical properties of high entropy ( $Zr_{0.2}Hf_{0.2}Ti_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2}$ ) C by deep learning potential. **Journal of Materials Science & Technology**, v. 43, p. 168-174, 2020.

FANG, Zhiyuan, et al. Deep learning-based axial capacity prediction for cold-formed steel channel sections using Deep Belief Network. **Structures**, v. 33, 2021.

GAO, Yuhan, et al. Correction of thermal airflow distortion in warpage measurements of microelectronic packaging structures via deep learning-based digital image correlation. **Microsystems & Nanoengineering**, v. 10, n. 1, p. 118, 2024.

GHOLAMI, Kimia; EGE, Faraz; BARZEGAR, Ramin. Prediction of composite mechanical properties: Integration of deep neural network methods and finite element analysis. **Journal of Composites Science**, v. 7, n. 2, p. 54, 2023.

GONG, Hao, et al. Deep-learning-based direct inversion for material decomposition. **Medical Physics**, v. 47, n. 12, p. 6294-6309, 2020.

HAN, Lei; DUAN, Chunmei; ZHANG, Taochuan. Predicting stress–strain constitutive relationships: a deep learning approach based on multi-head attention mechanism and long short-term memory networks. **Comptes Rendus. Mécanique**, v. 353, G1, p. 953-988, 2025.

HERRIOTT, Carl; SPEAR, Ashley D. Predicting microstructure-dependent mechanical properties in additively manufactured metals with machine-and deep-learning methods. **Computational Materials Science**, v. 175, p. 109599, 2020.

HSU, Chia-Wei, et al. Engineer design process assisted by explainable deep learning network. **Scientific Reports**, v. 11, n. 1, p. 22525, 2021.

HUANG, Zhikun, et al. Deep Learning-Based Fatigue Strength Prediction for Ferrous Alloy. **Processes**, v. 12, n. 10, p. 2214, 2024.

JIANG, Haoliang, et al. Stressgan: A generative deep learning model for two-dimensional stress distribution prediction. **Journal of Applied Mechanics**, v. 88, n. 5, p. 051005, 2021.

KAKANI, Vijay, et al. Vision-based tactile sensor mechanism for the estimation of contact position and force distribution using deep learning. **Sensors**, v. 21, n. 5, p. 1920, 2021.

KIBRETE, Fasikaw, et al. Artificial intelligence in predicting mechanical properties of composite materials. **Journal of Composites Science**, v. 7, n. 9, p. 364, 2023.

KIM, Doohee, et al. Artificial intelligence for the prediction of tensile properties by using microstructural parameters in high strength steels. **Materialia**, v. 11, p. 100699, 2020.

KOLLU, Geethika S.; KITTUR, Javeed. Integrating Deep Learning Into Mechanical Engineering: A Systematic Review of Applications and Educational Implications. **Computer Applications in Engineering Education**, v. 33, n. 3, e70048, 2025.

LEE, Soo Young, et al. Deep learning-based phase prediction of high-entropy alloys: Optimization, generation, and explanation. **Materials & Design**, v. 197, p. 109260, 2021.

LI, Wei-gang, et al. Prediction model for mechanical properties of hot-rolled strips by deep learning. **Journal of Iron and Steel Research International**, v. 27, p. 1045-1053, 2020.

LI, Xiang; ZHANG, Wei. Deep learning-based partial domain adaptation method on intelligent machinery fault diagnostics. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 68, n. 5, p. 4351-4361, 2020.

LI, Xiang, et al. Predicting the effective mechanical property of heterogeneous materials by image based modeling and deep learning. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 347, p. 735-753, 2019.

LIU, Shiming, et al. Deep learning in sheet metal bending with a novel theory-guided deep neural network. **IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica**, v. 8, n. 3, p. 565-581, 2021.

LONG, Xu, et al. Indentation reverse algorithm of mechanical response for elastoplastic coatings based on LSTM deep learning. **Materials**, v. 16, n. 7, p. 2617, 2023.

LU, Lu, et al. Extraction of mechanical properties of materials through deep learning from instrumented indentation. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 117, n. 13, p. 7052-7062, 2020.

LUO, Xin; MATSUMOTO, Takashi. Tensile Strength Estimation of UHPFRC Based on Predicted Cracking Location Using Deep Learning. **Materials**, v. 18, n. 10, p. 2237, 2025.

MALASHIN, Ivan P., et al. Deep learning for property prediction of natural fiber polymer composites. **Scientific Reports**, v. 15, n. 1, p. 27837, 2025.

MALEKI, Erfan, et al. Analysing the fatigue behaviour and residual stress relaxation of gradient nano-structured 316L steel subjected to the shot peening via deep learning approach. **Metals and Materials International**, v. 28, p. 112-131, 2022.

MALEKI, Erfan, et al. Application of deep neural network to predict the high-cycle fatigue life of AISI 1045 steel coated by industrial coatings. **Journal of Marine Science and Engineering**, v. 10, n. 2, p. 128, 2022.

MOEIN, Mohammad Mohtasham, et al. Predictive models for concrete properties using machine learning and deep learning approaches: A review. **Journal of Building Engineering**, v. 63, p. 105444, 2023.

MOTOTAKE, Yoh-ichi; ITO, Kaita; DEMURA, Masahiko. Quantitative prediction of fracture toughness ( $K_{Ic}$ ) of polymer by fractography using deep neural networks. **Science and Technology of Advanced Materials: Methods**, v. 2, n. 1, p. 310-321, 2022.

AGRAWAL, Ankit; CHOUDHARY, Alok. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. **APL Materials**, v. 4, n. 5, 2016.

MOZAFFAR, Mojtaba, et al. Deep learning predicts path-dependent plasticity. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 116, n. 52, p. 26414-26420, 2019.

MURAKAMI, Yuichiro, et al. Mechanical property prediction of aluminium alloys with varied silicon content using deep learning. **Acta Materialia**, v. 286, p. 120683, 2025.

NIKOLIĆ, Filip; ČANAĐIJA, Marko. Deep learning of temperature–dependent stress–strain hardening curves. **Comptes Rendus. Mécanique**, v. 351, G1, p. 151-170, 2023.

NIU, Junbo, et al. Leveraging deep neural networks for estimating Vickers hardness from nanoindentation hardness. **Materials**, v. 17, n. 1, p. 148, 2023.

OH, Sehyeok; KI, Hyungson. Deep learning model for predicting hardness distribution in laser heat treatment of AISI H13 tool steel. **Applied Thermal Engineering**, v. 153, p. 583-595, 2019.

BISHOP, Christopher M. **Pattern recognition and machine learning**. New York: Springer, 2006.

CREVIER, Daniel. **AI: The tumultuous history of the search for artificial intelligence**. New York: Basic Books, 1993.

GOODFELLOW, Ian; BENGIO, Yoshua; COURVILLE, Aaron. **Deep learning**. Cambridge: MIT Press, 2016.

HAYKIN, Simon O. **Neural networks and learning machines**. 3. ed. New York: Prentice Hall, 2009.

KRIZHEVSKY, Alex; SUTSKEVER, Ilya; HINTON, Geoffrey E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. **Advances in neural information processing systems**, v. 25, 2012.

LECUN, Yann; BENGIO, Yoshua; HINTON, Geoffrey. Deep learning. **Nature**, v. 521, n. 7553, p. 436-444, 2015.

RUSSELL, Stuart J.; NORVIG, Peter. **Artificial intelligence: a modern approach**. 4. ed. Hoboken: Pearson, 2020.

PYLE, Richard J., et al. Domain adapted deep-learning for improved ultrasonic crack characterization using limited experimental data. **IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control**, v. 69, n. 4, p. 1485-1496, 2022.

QU, Tongming, et al. Deep learning predicts stress–strain relations of granular materials based on triaxial testing data. **Computer Modeling in Engineering & Sciences**, v. 128, n. 1, p. 129-144, 2021.

RAAGHAV, Varun, et al. Explainable Prediction of the Mechanical Properties of Composites with CNNs. **arXiv preprint arXiv:2505.14745**, 2025.

SAMINATHAN, Selvarasu; LAKSHMIPATHY, Jayakumar. Experimental investigation and prediction analysis on granite/SiC reinforced Al7050 and Al7075 using hybrid deep neural network based salp swarm optimization. **Silicon**, v. 14, n. 11, p. 5887-5903, 2022.

SENGODAN, Ganapathi Ammasai. Prediction of two-phase composite microstructure properties through deep learning of reduced dimensional structure-response data. **Composites Part B: Engineering**, v. 225, p. 109282, 2021.

SEN, Samgeeth, et al. **Neural Networks and Deep learning approach to predict the Tool life during turning of Nimonic C-263 Alloy**. 2023.

SHANG, Xiao, et al. Tailoring the mechanical properties of 3D microstructures: A deep learning and genetic algorithm inverse optimization framework. **Materials Today**, v. 70, p. 71-81, 2023.

SHAO, Si-Yu, et al. A deep learning approach for fault diagnosis of induction motors in manufacturing. **Chinese Journal of Mechanical Engineering**, v. 30, n. 6, p. 1347-1356, 2017.

SHEN, Mingming, et al. Deep learning assisted prediction of retained austenite in the carburized layer for evaluating the wear resistance of mild steel. **Journal of Materials Research and Technology**, v. 21, p. 353-362, 2022.

SHOKROLLAHI, Yasin, et al. Deep learning techniques for predicting stress fields in composite materials: A superior alternative to finite element analysis. **Journal of Composites Science**, v. 7, n. 8, p. 311, 2023.

SIAHPOUR, Shahin; LI, Xiang; LEE, Jay. Deep learning-based cross-sensor domain adaptation for fault diagnosis of electro-mechanical actuators. **International Journal of Dynamics and Control**, v. 8, n. 4, p. 1054-1062, 2020.

TAO, Chongcong, et al. Fatigue damage characterization for composite laminates using deep learning and laser ultrasonic. **Composites Part B: Engineering**, v. 216, p. 108816, 2021.

VUONG, Daniel. **3D Deep Learning Segmentation for Fiber Break Analysis of Carbon Fiber Reinforced Polymer Tomograms**. 2023. Tese (Doutorado) – Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, 2023.

WANG, Mingwei, et al. Milling tool wear prediction method based on deep learning under variable working conditions. **IEEE Access**, v. 8, p. 140726-140735, 2020.

WU, Si-wei; YANG, Jian; CAO, Guang-ming. Prediction of the Charpy V-notch impact energy of low carbon steel using a shallow neural network and deep learning. **International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials**, v. 28, n. 8, p. 1309-1320, 2021.

XU, Gang, et al. Prediction of mechanical properties for deep drawing steel by deep learning. **International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials**, v. 30, n. 1, p. 156-165, 2023.

YANG, Charles, et al. Prediction of composite microstructure stress-strain curves using convolutional neural networks. **Materials & Design**, v. 189, p. 108509, 2020.

YANG, Jingye, et al. A novel method of multiaxial fatigue life prediction based on deep learning. **International Journal of Fatigue**, v. 151, p. 106356, 2021.

YANG, Ru, et al. Deep DIC: Deep learning-based digital image correlation for end-to-end displacement and strain measurement. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 302, p. 117474, 2022.

YANG, Zhenze; YU, Chi-Hua; BUEHLER, Markus J. Deep learning model to predict complex stress and strain fields in hierarchical composites. **Science Advances**, v. 7, n. 15, p. eabd7416, 2021.

YANG, Zhenze, et al. End-to-end deep learning method to predict complete strain and stress tensors for complex hierarchical composite microstructures. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 154, p. 104506, 2021.

YE, Sang, et al. Deep neural network method for predicting the mechanical properties of composites. **Applied Physics Letters**, v. 115, n. 16, 2019.

ZHANG, Jianjing; WANG, Peng; GAO, Robert X. Deep learning-based tensile strength prediction in fused deposition modeling. **Computers in industry**, v. 107, p. 11-21, 2019.

ZHANG, Xiao-Cheng; GONG, Jian-Guo; XUAN, Fu-Zhen. A deep learning based life prediction method for components under creep, fatigue and creep-fatigue conditions. **International Journal of Fatigue**, v. 148, p. 106236, 2021.

ZHANG, Xin, et al. Multi-model ensemble deep learning method for intelligent fault diagnosis with high-dimensional samples. **Frontiers of Mechanical Engineering**, v. 16, n. 2, p. 340-352, 2021.

ZHANG, Zhizhou; GU, Grace X. Finite-Element-Based Deep-Learning Model for Deformation Behavior of Digital Materials. **Advanced Theory and Simulations**, v. 3, n. 7, p. 2000031, 2020.

ZHANG, Zhizhou, et al. Deep Learning-Driven Prediction of Mechanical Properties of 316L Stainless Steel Metallographic by Laser Powder Bed Fusion. **Micromachines**, v. 15, n. 9, p. 1167, 2024.

ZHU, Jing-Ang, et al. Deep learning approach to mechanical property prediction of single-network hydrogel. **Mathematics**, v. 9, n. 21, p. 2804, 2021.

Yuan, Wenzhen, et al. "Shape-independent hardness estimation using deep learning and a gelsight tactile sensor." **2017 IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA)**. IEEE, 2017.

Chen, Shuonan, et al. "A deep learning dataset for metal multiaxial fatigue life prediction." **Scientific Data** 11.1 (2024): 1027.

Azad, Muhammad Muzammil, et al. "Deep learning-based fracture mode determination in composite laminates." **Journal of the Computational Structural Engineering Institute of Korea** 37.4 (2024): 225-232.

Chiaranai, Somphop, et al. "Ensemble deep learning ultimate tensile strength classification model for weld seam of asymmetric friction stir welding." **Processes** 11.2 (2023): 434.

Gallagher, Brian, et al. "Predicting compressive strength of consolidated molecular solids using computer vision and deep learning." ***Materials & Design* 190** (2020): 108541.

Yu, Y., et al. "Compressive strength evaluation of cement-based materials in sulphate environment using optimized deep learning technology. **Develop Built Environ** 16: 100298." 2023.