

Aplicação de Redes Neurais Artificiais na Predição da Eficiência de Degradação de Fármacos via Processos Oxidativos Avançados

Vitor Davis Melo¹, Fábio Machado Cavalcanti¹, Daniella Carla Napoleão¹, Marta Maria Menezes Bezerra Duarte¹

¹Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Tecnologia e Geociências, Departamento de Engenharia Química

*vitor.davis@ufpe.br

RESUMO

Este estudo apresenta a modelagem preditiva da degradação de uma mistura de fármacos via Processos Oxidativos Avançados utilizando Redes Neurais Artificiais. Foram utilizados 746 ensaios experimentais para o treinamento da rede com 15 variáveis de entrada, abrangendo diferentes tipos de radiação, tempo, pH e concentrações de reagentes. A rede, otimizada com 64 neurônios em uma única camada oculta e aplicação de *Dropout* (0,2), foi treinada utilizando o algoritmo Adam e a validação cruzada *k-fold* ($k=5$). Os resultados demonstraram uma capacidade de generalização em que se atingiu um coeficiente de determinação (R^2) de 0,893 para o conjunto de treinamento e 0,820 para o conjunto de teste. Os erros médios absolutos (MAE) foram de 0,0729 e 0,0864, respectivamente. A análise das curvas de performance confirmou uma aceitável capacidade do modelo em capturar as tendências não lineares do sistema, indicando que a rede neural obtida pode atuar como um ponto de partida para o desenvolvimento futuro de um simulador virtual confiável para a otimização e controle de processos de tratamento de efluentes.

Palavras-chave: Redes Neurais Artificiais; Modelagem; Degradação; Fármacos; Efluentes.

1. Introdução

É possível afirmar que o desenvolvimento industrial se configura como o principal indicador de crescimento econômico, sustentado por um sistema que incentiva a produção e o consumo crescentes (Sathya et al., 2022; Hickel; Kallis, 2020). No entanto, esse processo, aliado à urbanização acelerada, negligenciou os impactos ambientais decorrentes do descarte desregulado de poluentes químicos e biológicos em corpos hídricos (Chen et al., 2024).

Diante da urgência em assegurar a disponibilidade de água, conforme preconizado pelos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da Organização das Nações Unidas (ONU) (UNDP, 2020), o aprimoramento de tecnologias de tratamento de águas residuais torna-se fundamental, exigindo o desenvolvimento contínuo de novas metodologias para superar os desafios da sustentabilidade hídrica (Boulkhessaim et al., 2022). Dentro desse cenário, os processos de oxidação avançada (POAs) têm se mostrado altamente eficazes na degradação de contaminantes orgânicos recalcitrantes em águas residuais (Garrido et al., 2024). Esses processos baseiam-se na geração de radicais altamente reativos, como os radicais hidroxila e superóxidos, que desempenham um papel fundamental na oxidação de contaminantes (Palma et al., 2025). Tais radicais exibem diferentes potenciais de oxidação e atuam através de mecanismos de reação que os tornam eficazes na degradação de uma ampla gama de poluentes orgânicos persistentes (Garrido et al., 2024).

A otimização de POA, como por exemplo no processo foto-Fenton, exige a consideração simultânea de vários parâmetros, tais como a concentração inicial do contaminante, a dosagem de peróxido de hidrogênio, a concentração de ferro, o pH e a intensidade da radiação (Moraes et al., 2020). Além disso, apesar de sua eficácia na degradação de contaminantes orgânicos, os POA também podem gerar subprodutos tóxicos. Diversos estudos identificaram a formação de subprodutos de oxidação, como ácidos carboxílicos e compostos halogenados, que representam riscos ambientais, como os de Wang; Wang, (2021), Dhamorikar et al. (2024) e Sathya et al. (2022). Portanto, avaliar a formação e a toxicidade desses subprodutos de degradação é importante para avaliar a real eficácia do processo foto-Fenton. Adicionalmente, identificar as espécies reativas envolvidas na degradação dos

contaminantes e compreender os fatores que influenciam sua geração são essenciais para otimizar esses processos e garantir suas aplicações de forma segura e eficaz (Wang; Wang, 2021).

Nos últimos anos, o desenvolvimento de modelos de predição baseados em redes neurais artificiais (RNA) e aprendizado de máquina (AM) tem sido fundamental para aprimorar o monitoramento dos POA (Moraes et al., 2020; Santana et al., 2021; Palma et al., 2025). Dhamorikar et al. (2024) destacaram o potencial das RNA para otimizar os POA com alta precisão, reduzindo assim os impactos econômicos e ambientais dessas reações.

Esses modelos de predição aproveitam a capacidade das RNA de aprender e reconhecer padrões complexos nos dados, capturando as relações não lineares entre as variáveis e as respostas de eficiência. Essa capacidade permite que eles superem as limitações dos modelos tradicionais baseados em equações matemáticas derivadas de princípios de conservação com resolução numérica de alto custo computacional (Huang et al., 2023). O AM facilita a integração de múltiplas variáveis de entrada em modelos de predição unificados para o processo foto-Fenton, o que faz uma seleção adequada das variáveis de entrada ser crucial para o desenvolvimento de modelos de predição confiáveis e robustos. Portanto, uma análise cuidadosa das variáveis de entrada é necessária ao desenvolver modelos de predição para o processo foto-Fenton (De Moraes et al., 2020; Santana et al., 2021). Esses modelos podem prever a eficiência de remoção de contaminantes orgânicos e otimizar as condições operacionais, aumentando, consequentemente, a eficiência e a rentabilidade do processo foto-Fenton (Palma et al., 2025).

Tendo o exposto em vista, o objetivo do seguinte trabalho visou estudar a aplicação de redes neurais artificiais para gerar um modelo preditivo de POA, utilizando dados experimentais para degradação de fármacos em água, visando obter um modelo preditivo para este tipo de tratamento, contribuindo para o avanço da transformação digital na respectiva área.

2. Metodologia

2.1. Coleta de dados

O banco de dados utilizado no presente estudo foi estruturado a partir da prospecção de resultados experimentais oriundos de investigações predecessoras vinculadas à linha de pesquisa do Laboratório de Engenharia Ambiental e da Qualidade (LEAQ) do Departamento de Engenharia Química (DEQ) da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE). A amostragem focou na degradação da mistura binária de fármacos utilizados no tratamento de HIV, utilizando como base ensaios que exploraram a eficácia de variados POA. A obtenção do conjunto de dados permitiu a análise de 746, contendo um volume expressivo de informações acerca da influência de parâmetros operacionais, como o pH do meio, a natureza da radiação incidente e a carga de catalisadores, fatores essenciais para a construção do modelo.

A fim de assegurar a integridade dos dados e mitigar ambiguidades, foi realizada uma catalogação sistemática das fontes consultadas. Conforme apresentado no Quadro 1, os trabalhos foram classificados segundo sua autoria e tipos de POA empregado, garantindo a rastreabilidade dos resultados e a fundamentação empírica necessária para o desenvolvimento desta pesquisa.

Quadro 1. Trabalhos de referência e seus respectivos processos metodológicos.

Tipo de POA utilizado	Referência
Fotólise Foto-Fenton Fotoperoxidação	Lucena (2018)
Foto-Fenton Fotoperoxidação Fotocatálise Heterogênea	Lucena2022)
Foto-Fenton heterogêneo Fotoperoxidação	Silva (2023)

Fonte: elaborado pelo autor.

2.1.1. Tabulação dos dados

Após a etapa de levantamento e triagem de dados, procedeu-se à organização das informações em planilhas eletrônicas, visando a construção de uma matriz de entrada adequada à arquitetura de redes neurais. O conjunto de dados foi tabulado em vetores multidimensionais, em que cada ponto experimental foi definido por um conjunto

de variáveis do processo. Tal sistematização é fundamental para o pré-processamento dos dados, etapa necessária para a identificação de tendências e para a compatibilização das escalas de magnitude das variáveis.

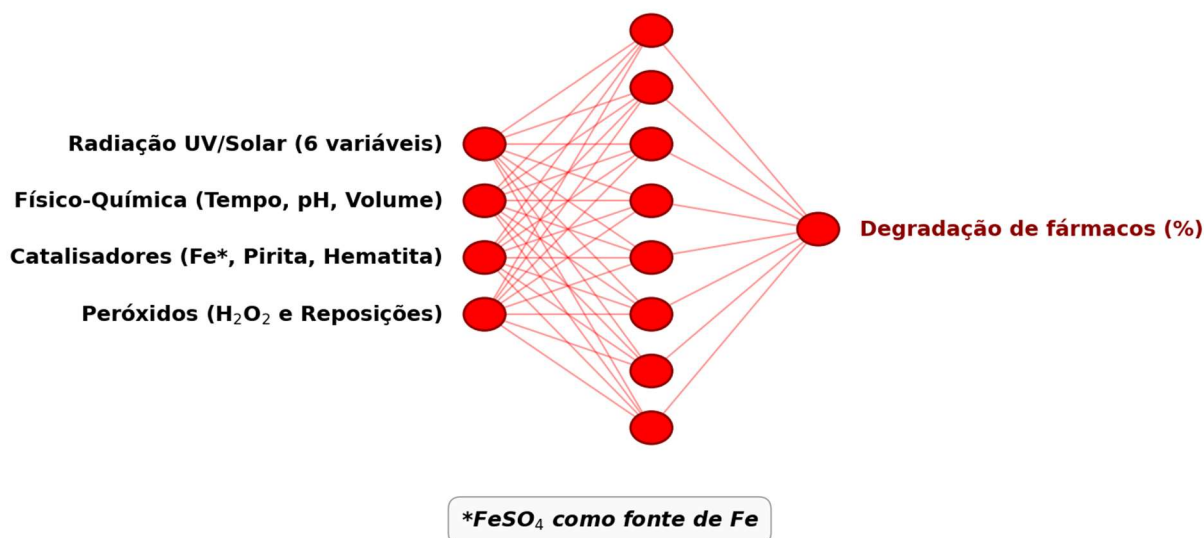
A definição dos descritores de entrada (*inputs*) e da variável de resposta (*output*) baseou-se na relevância cinética e termodinâmica das grandezas que governam os POA, com ênfase nas rotas de foto-Fenton homogêneo e heterogêneo aplicadas ao tratamento de Lamivudina e Zidovudina. As variáveis independentes foram selecionadas por caracterizarem as principais condições operacionais do sistema, ao passo que a eficiência de degradação foi estabelecida como o indicador de desempenho do processo. A arquitetura da matriz de dados está detalhada Quadro 2. A Figura 1 contém a esquematização da rede neural desenvolvida de maneira simplificada, com suas respectivas camadas de entrada e a saída sendo a taxa de degradação dos contaminantes.

Quadro 2. Estrutura de parâmetros para a modelagem via Rede Neural Artificial.

Categoria	Parâmetros	Unidade
Entrada (<i>Input</i>)	Radiação (UV-C, Solar, UV-A)	W
Entrada (<i>Input</i>)	Tempo	min
Entrada (<i>Input</i>)	pH	-
Entrada (<i>Input</i>)	Catalisador (Fe, Pirita, Hematita)	mg.L ⁻¹
Entrada (<i>Input</i>)	H ₂ O ₂	mg.L ⁻¹
Saída (<i>Output</i>)	Degradação	%

Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 1. Arquitetura da Rede Neural Artificial desenvolvida para modelagem de POA.



Fonte: elaborada pelo autor.

A Figura 1 demonstra uma representação gráfica da arquitetura da rede, que foi projetada sob a configuração de um *Multilayer Perceptron* (MLP), estruturado em três camadas principais. A camada de entrada (*input*) foi composta por 15 neurônios, correspondendo diretamente às variáveis físico-químicas independentes previamente tabuladas, incluindo as variações qualitativas e quantitativas de radiação, tempo de processo, pH, volume reacional, além das concentrações de catalisadores e de peróxido de hidrogênio

2.2. Modelagem computacional e arquitetura da Rede Neural Artificial

Com a matriz de dados devidamente estruturada e os parâmetros preditores selecionados, a etapa subsequente da metodologia consistiu no desenvolvimento e treinamento de uma Rede Neural Artificial (RNA) capaz de descrever o comportamento do processo de degradação da mistura dos poluentes. O modelo foi implementado em linguagem de programação *Python* com o uso das bibliotecas *Keras* e *TensorFlow*. Para assegurar a convergência eficiente do gradiente e evitar o enviesamento dos pesos sinápticos devido às diferentes ordens de grandeza das variáveis, todos os dados de entrada foram normalizados para o intervalo entre 0 e 1 utilizando o algoritmo *MinMaxScaler*.

A camada oculta foi dimensionada com 64 neurônios, o número de neurônios foi definido por meio de um processo de ajuste de hiperparâmetros por experimentação, onde foram testadas diferentes arquiteturas e a configuração escolhida apresentou a melhor relação entre o erro médio e a capacidade de generalização. Optou-se por uma arquitetura enxuta, com apenas uma camada oculta, visando reduzir a complexidade computacional e *overfitting*, garantindo a capacidade de generalização empírica do modelo. Os neurônios desta camada foram equipados com a função de ativação *Rectified Linear Unit* (ReLU), que insere a não linearidade necessária para o aprendizado de padrões cinéticos complexos. Adicionalmente, implementou-se uma camada de *Dropout* com taxa de retenção penalizada em 20%. Esse mecanismo de regularização desativa aleatoriamente uma fração dos neurônios a cada época de treinamento, forçando a rede a aprender características redundantes e conferindo maior robustez à predição. Por fim, o *output* foi constituído por um único neurônio, configurado com a função de ativação *Sigmoid*, que restringe o valor matemático predito a um intervalo contínuo, traduzido posteriormente para o percentual de degradação da amostra.

A base de dados foi dividida aleatoriamente em conjuntos de treinamento (80%) e teste (20%). Modelos pesos da RNA foram estimados utilizando o algoritmo *Adaptive Moment Estimation* (Adam), com uma taxa de aprendizado inicial de 0,005, tendo como função de perda o erro quadrático médio (MSE, do inglês *Mean Squared Error*). O treinamento foi conduzido com um total de 300 *epochs* e *batch size* igual a 10. Além disso, aplicou-se o método *ReduceLROnPlateau*, que reduz dinamicamente a taxa de aprendizado ao detectar platôs na função de perda, garantindo uma convergência mais refinada para os pesos sinápticos.

2.3. Avaliação do modelo e validação cruzada

Para garantir a estabilidade estatística e a confiabilidade das predições, foi empregada a técnica de validação cruzada do tipo *k-fold*, com $k=5$. O conjunto de dados original foi segmentado em cinco subconjuntos distintos; em cada iteração, quatro subconjuntos foram utilizados para o ajuste dos pesos e um para a validação dos resultados. Este procedimento garantiu que toda a base de dados fosse utilizada tanto para treinamento quanto para teste, reduzindo o viés de seleção.

Essa metodologia é fundamental para reduzir o viés da amostragem e evitar *overfitting*, garantindo que a avaliação de performance da rede não seja dependente de uma única partição arbitrária. Na prática operacional, o conjunto de dados foi segmentado de forma aleatória em cinco subconjuntos mutuamente exclusivos e de proporções equivalentes. A cada ciclo iterativo de treinamento, quatro desses subconjuntos foram combinados e alocados para o ajuste dos pesos sinápticos e calibração do gradiente, enquanto o quinto subconjunto remanescente foi preservado para a validação isolada, atuando como dados totalmente inéditos para avaliar o poder preditivo do modelo.

O procedimento de partição foi repetido sistematicamente por cinco vezes, alternando-se o bloco de validação de modo que, ao final do ciclo completo, todas as amostras originais houvessem participado de ambos os estágios exatamente uma vez. Ao término de cada *fold*, as métricas de convergência determinadas pelo Erro Quadrático Médio (MSE) e pelo Erro Médio Absoluto (MAE, do inglês *Mean Absolute Error*) foram registradas, permitindo o cálculo do desempenho preditivo médio.

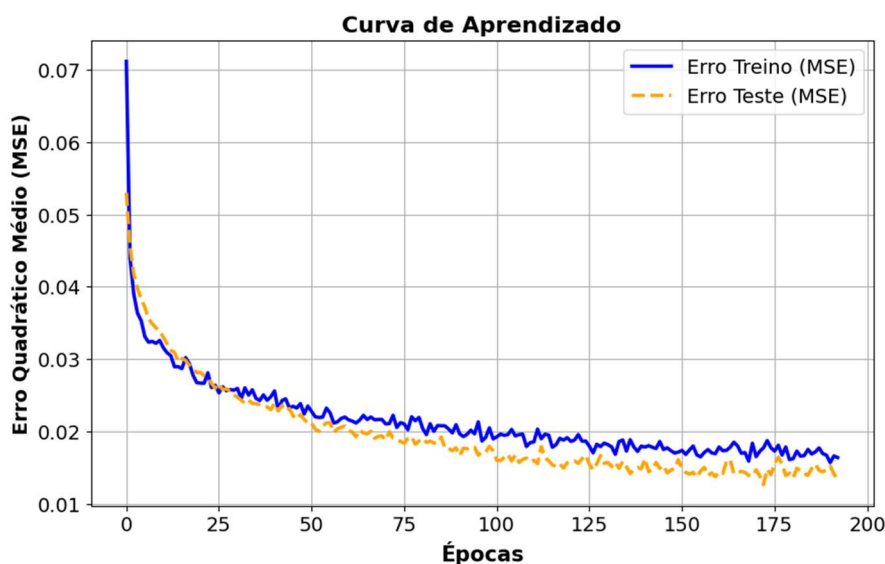
3. Resultados e Discussão

3.1. Otimização da rede neural

A arquitetura de uma única camada oculta com 64 neurônios foi selecionada por apresentar a melhor estabilidade na convergência do erro quadrático médio (MSE). Durante o treinamento, o comportamento da rede

foi monitorado através da Curva de Aprendizado demonstrada na Figura 2, que ilustra a evolução do erro tanto para o conjunto de treinamento quanto para o de validação ao longo das épocas.

Figura 2. Curva de aprendizado da RNA desenvolvida.



Fonte: elaborada pelo autor.

Como observado na Figura 2, a implementação do recurso *ReduceLROnPlateau* permitiu que a rede superasse patamares de erro estagnados, realizando ajustes finos nos pesos sinápticos. A convergência suave das curvas de treino e teste, sem divergências significativas, atesta a eficácia da camada de *Dropout* (0,2) e do mecanismo de *Early Stopping* na mitigação do *overfitting*. Essa configuração estrutural permitiu que a RNA mapeasse com precisão as interações entre os 15 preditores operacionais e a degradação dos poluentes orgânicos persistentes (POP).

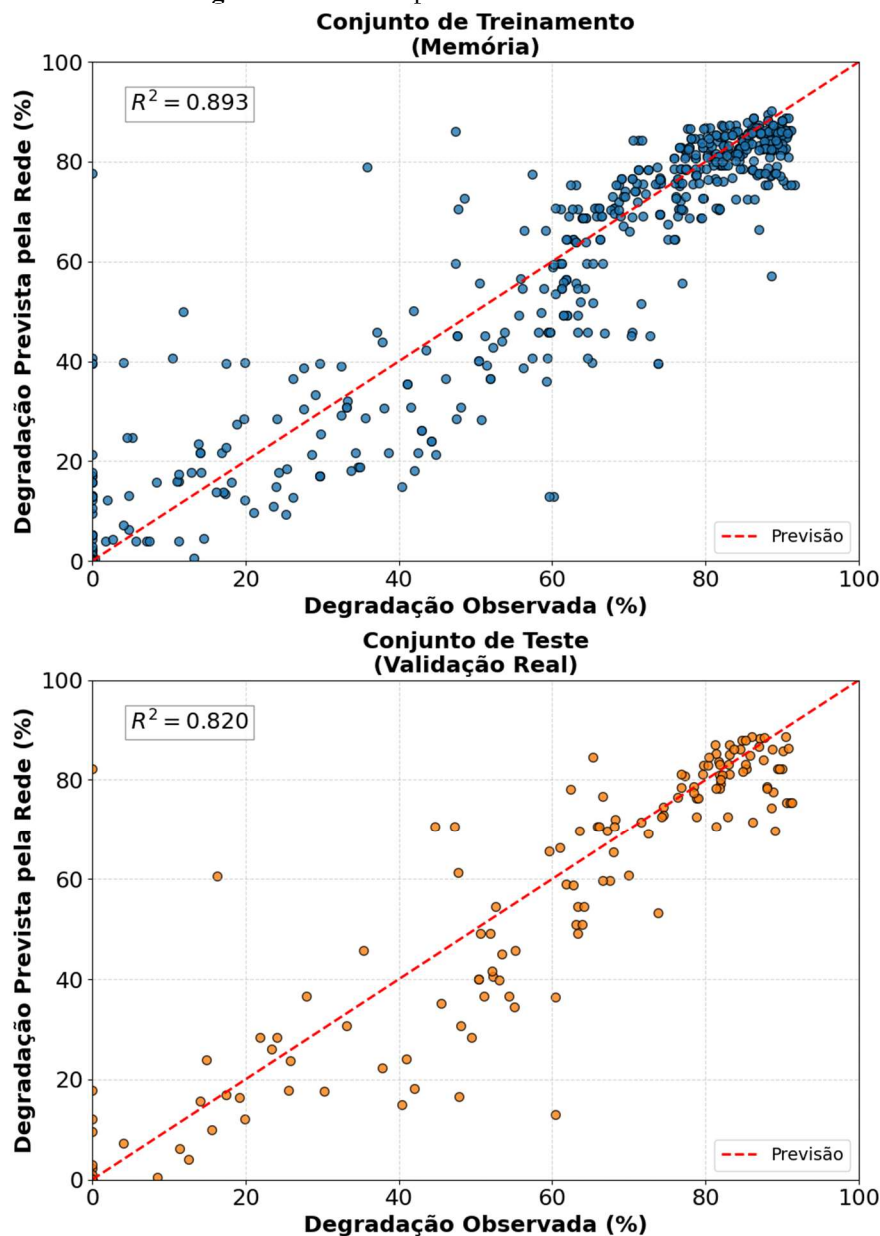
A análise visual das curvas de aprendizado demonstrou uma queda suave e estável do erro ao longo das 300 épocas de treinamento, com as curvas de treino e validação convergindo sem sinais de divergência tardia, o que atesta a eficácia das estratégias de regularização adotadas.

3.2. Avaliação do desempenho e validação do modelo

O modelo apresentou um desempenho global consistente, alcançando um coeficiente de determinação (R^2) de 0,893 no conjunto de treinamento e 0,820 no conjunto de teste, indicando que a rede internalizou com sucesso a fenomenologia do processo. A pequena queda do valor de R^2 do conjunto de teste é um reflexo de uma variação natural que ocorre devido ao processo de avaliação da performance dos dados independentes do conjunto de treinamento. A qualidade desse ajuste é visualmente confirmada pelos gráficos de paridade apresentados na Figura

3, que comparam os valores de degradação observados experimentalmente com as previsões geradas pela inteligência artificial.

Figura 3. Curva de aprendizado da RNA desenvolvida.



Fonte: elaborada pelo autor.

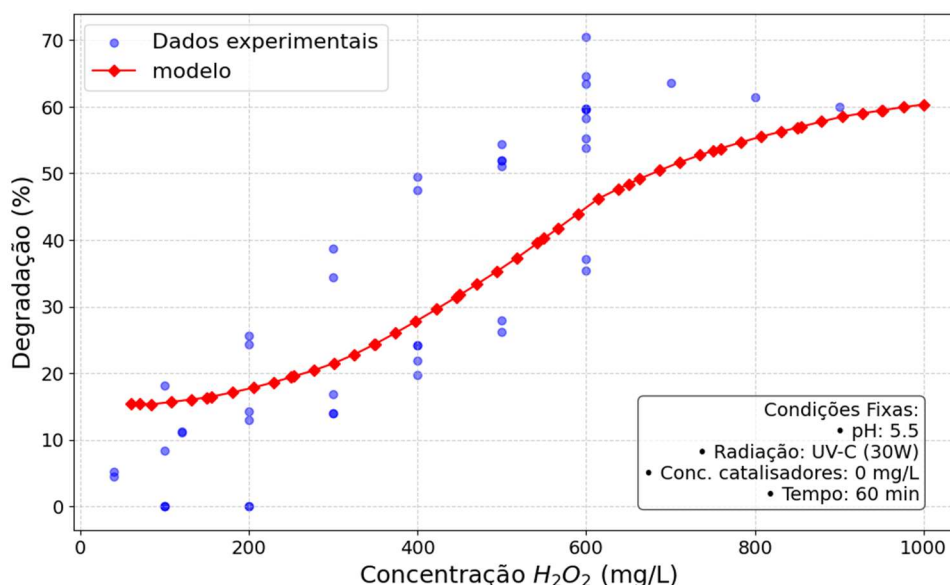
Avaliando os gráficos de paridade das curvas de aprendizado exibidos na Figura 3, observou-se uma distribuição homogênea dos pontos ao redor da linha de identidade, confirmando que o modelo é capaz de realizar previsões acuradas tanto em baixas quanto em altas taxas de degradação. Portanto, a arquitetura otimizada validou-se como uma ferramenta preditiva segura e precisa, apta a orientar a otimização de tratamento de contaminantes orgânicos persistentes via POA.

A análise do MAE revelou uma precisão média de 0,0615% para o treino e 0,0734% para o teste. Em termos práticos, isso significa que a estimativa da rede neural apresenta um desvio médio de aproximadamente 6,4% em relação aos valores experimentais de degradação observados em laboratório. Segundo os estudos de Aghababaei,

Alizadeh e Bahrami (2025), essa margem de erro é considerada aceitável para sistemas complexos de POA, onde a variabilidade analítica e a interação entre múltiplos radicais livres impõem desafios constantes à previsibilidade.

A performance do modelo foi avaliada por meio de uma análise de sensibilidade, focada na influência isolada da variação da concentração de peróxido de hidrogênio sobre a eficiência do processo, representada na Figura 4. Para se obter uma maior representatividade estatística à simulação, as demais variáveis operacionais foram mantidas constantes nos valores exatos correspondentes ao cenário experimental de maior frequência identificado na base de dados original.

Figura 4. Análise de sensibilidade da influência da concentração de peróxido de hidrogênio na eficiência de degradação



Fonte: elaborada pelo autor.

A análise de sensibilidade apresentada na Figura 4 evidencia a capacidade da rede neural de filtrar o ruído dos dados brutos e identificar um padrão no processo. Enquanto os dados experimentais apresentam uma dispersão característica de ensaios laboratoriais multivariados, a trajetória descrita pelo modelo se manifesta de forma suavizada, indicando que a RNA atuou como um mapeador da tendência da evolução do processo estudado, levando em consideração que os pontos exibidos pelo modelo representam respostas a variações de peróxido de hidrogênio que não haviam sido executadas experimentalmente até o momento. Essa representação idealizada cumpre a função metodológica de buscar descrever o comportamento global do sistema, como o crescimento da eficiência em função da dosagem de peróxido de hidrogênio, sem se deixar enviesar por oscilações estatísticas pontuais.

4. Conclusão

O seguinte estudo demonstrou a aplicação de RNA como ferramenta preditiva para a degradação de certas classes de fármacos via POA. A arquitetura otimizada, composta por uma única camada oculta de 64 neurônios, apresentou um bom desempenho, alcançando um coeficiente de determinação de 0,8512 no conjunto de teste e um erro médio absoluto de 0,0639. A RNA proposta apresentou resultados promissores para um futuro desenvolvimento de simulações mais complexas, para que se possa obter a otimização de condições operacionais e a redução de custos e tempo experimentais, contribuindo significativamente para o desenvolvimento de estratégias mais eficientes e sustentáveis no tratamento de efluentes contaminados.

Agradecimentos: O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, ao CNPq (processo 303911/2025-5).

Referências

- AGHABABAEI, E.; ALIZADEH, M.; BAHRAMI, A. Using artificial neural network to predict degradation rates of pollutants in industrial wastewater with TiO₂-based nanocomposites. *Discover Artificial Intelligence*, v. 5, n. 1, 24 dez. 2025.
- BOULKHESSAIM, S. et al. Emerging Trends in the Remediation of Persistent Organic Pollutants Using Nanomaterials and Related Processes: A Review. *Nanomaterials*, v. 12, n. 13, p. 2148, 2022.
- Chen, P. et al. From Challenge to Opportunity: Revolutionizing the Monitoring of Emerging Contaminants in Water with Advanced Sensors. *Water Research*, v. 265, p. 122297–122297, 2024.
- MORAES, N. F. S. et al. Performance verification of different advanced oxidation processes in the degradation of the dye acid violet 17: reaction kinetics, toxicity and degradation prediction by artificial neural networks. *Chemical Papers*, v. 75, n. 2, p. 539–552, 25 ago. 2020.
- DHAMORIKAR, R. S. et al. Review on integrated advanced oxidation processes for water and wastewater treatment. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 26 abr. 2024.
- GARRIDO, I. et al. Degradation of pharmaceutical pollutants in different soils by photocatalytic treatment under solar irradiation. *Journal of Photochemistry and Photobiology A Chemistry*, p. 115717–115717, 2024.
- HICKEL, J.; KALLIS, G. Is Green Growth Possible? *New Political Economy*, v. 25, n. 4, p. 469–486, 17 abr. 2020.
- HUANG, Z. et al. Interpretable artificial intelligence for advanced oxidation systems: Principle, operations and performance. *Process safety and environmental protection/Transactions of the Institution of Chemical Engineers. Part B, Process safety and environmental protection/Chemical engineering research and design/Chemical engineering research & design*, v. 180, p. 242–259, 1 dez. 2023.
- PALMA, D. et al. Artificial neural networks applied to photo-Fenton process: An innovative approach to wastewater treatment. *Water Science and Engineering*, v. 18, n. 3, p. 324–334, set. 2025.
- SANTANA et al. Photo-Fenton process under sunlight irradiation for textile wastewater degradation: monitoring of residual hydrogen peroxide by spectrophotometric method and modeling artificial neural network models to predict treatment. *Chemical Papers*, v. 75, n. 6, p. 2305–2316, 5 jan. 2021.
- SATHYA, K. et al. A comprehensive review on comparison among effluent treatment methods and modern methods of treatment of industrial wastewater effluent from different sources. *Applied Water Science*, v. 12, n. 4, 21 mar. 2022.
- UNDP, Sustainable Health Procurement Guidance Note, 2020. United Nations Development Programme, 2020.
- WANG, J.; WANG, S. Toxicity changes of wastewater during various advanced oxidation processes treatment: An overview. *Journal of Cleaner Production*, v. 315, p. 128202, 2021.