Predição de Parâmetros Raman por Redes Neurais: Comparação com ajuste tradicional em vidros teluretos

VIANA, Giovanny Luttierri1[1]; SANTOS, Guilherme Teixeira[1]; GAUGLITZ, Marcos Vinicius[1]; NOVATSKI, Andressa[1,2]; Somer, Aloisi[1,2];

Universidade Estadual de Ponta Grossa - Programa de Pós-Graduação em Ciências[1]
Universidade Estadual de Ponta Grossa - Departamento de Física[2]

giovannyviana580@gmail.com[1]

Palavras-Chave: Espectroscopia Raman; Aprendizado de Máquina; Materiais Vítreos.;

Resumo

Este trabalho investiga a aplicação de redes neurais artificiais na predição de parâmetros gaussianos de espectros Raman de vidros teluretos TLZ dopados com Cr_2O_3. Redes perceptron multicamadas foram treinadas utilizando espectros simulados para determinar áreas, centros e larguras de bandas Raman. Os resultados foram comparados aos obtidos por métodos tradicionais de ajuste espectral, demonstrando boa concordância e elevada precisão. A análise das cinco melhores arquiteturas revelou baixa dispersão entre as predições, especialmente para áreas e centros. Os resultados indicam que as redes neurais constituem uma alternativa robusta e eficiente para análise espectroscópica de materiais vítreos.

I. Introdução

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) são modelos computacionais inspirados no cérebro humano, capazes de aprender padrões a partir de dados experimentais e aplicados em tarefas de classificação, reconhecimento e predição (HAYKIN, 2009; BABINI; MARRANGHELLO, 2007). Nos últimos anos, seu uso em técnicas espectroscópicas como Raman, FTIR e UV-Vis tem crescido, contribuindo para a análise qualitativa e quantitativa de materiais (LI et al., 2021; ZOU et al., 2025).

Entretanto, a interpretação de espectros experimentais ainda é desafiadora devido à sobreposição de bandas, ruído e interações vibracionais, o que dificulta a extração precisa de parâmetros físico-químicos (BRANDT et al., 2021). Em espectroscopia Raman, especialmente em vidros teluretos, a decomposição espectral por múltiplas Gaussianas constitui um problema inverso sensível às condições iniciais, podendo gerar soluções não únicas mesmo com altos valores de ajuste ($R^2 \approx 1$) (NOVATSKI et al., 2019; GONÇALVES et al., 2016).

Diante disso, redes perceptron multicamadas (MLPs) surgem como alternativa promissora para análise espectral, por modelarem relações não lineares e permitirem a extração automática de padrões relevantes (FAN et al., 2019; JOHNSON et al., 2025; WANG et al., 2023). Essas redes têm sido aplicadas com sucesso na identificação de componentes químicos e análise de dados espectroscópicos em geral (EWUSI-ANNAN et al., 2020; GHOSH et al., 2019).

II. Fundamentação Teórica/Materiais e Métodos

III. Preparação das amostras

As amostras foram preparadas pelo método de fusão e resfriamento no Grupo de Propriedades Eletrônicas e Vibracionais em Materiais (GPEViM) da Universidade Estadual de Ponta Grossa (UEPG), utilizando TeO_2, Li_2CO_3, ZnO e Cr_2O_3 de grau analítico. A matriz vítrea 65TeO_2-15Li_2O-20ZnO foi dopada com concentrações de Cr_2O_3 variando de 0,1 a 2,0 mol%.

As matérias-primas foram pesadas em balança analítica, homogeneizadas em almofariz de ágata e posteriormente fundidas em cadinho de platina. O material foi aquecido a 400 ℃ por 60 min e, em seguida, a 870 ℃ por 30 min para completa homogeneização. O fundido foi vertido em molde de latão pré-aquecido, seguido de choque térmico para formação das amostras vítreas. Por fim, as amostras foram submetidas a tratamento térmico a 240 ℃ por 240 min para alívio de tensões internas.

IV. Espectroscopia Raman

As medidas de espectroscopia Raman foram realizadas em um espectrofotômetro Bruker Senterra (C-Labmu/UEPG), utilizando laser de excitação de 532 nm, grade de 1200 linhas/mm e objetiva de 50× (NA = 0,40). Os espectros foram obtidos em amostras *bulk*, na região de 100 a 1500 cm^{-1}, com tempo de integração de 5 s.

A análise espectral foi realizada por meio do ajuste de bandas com funções gaussianas, das quais foram extraídos os parâmetros de posição, largura e área. A posição está associada aos modos vibracionais, a largura ao grau de desordem estrutural e a área à contribuição relativa de cada banda. A variação desses parâmetros com a concentração de dopante permite investigar modificações estruturais nas unidades TeO_3, TeO_{3+1} e TeO_4, bem como suas correlações com propriedades macroscópicas do material, como estabilidade térmica, densidade e energia de *band gap* óptico (NOVATSKI et al., 2019).

V. Redes Neurais Artificias

Para o treinamento e a predição dos parâmetros gaussianos foi utilizado o *software* Wolfram Mathematica. Foram investigadas diferentes arquiteturas de redes perceptron multicamadas (MLPs), variando-se o número de camadas ocultas, o número de neurônios e as funções de ativação (ReLU, Tanh e Sigmoide). Também foi avaliada a influência da normalização dos dados, da adição de ruídos aleatórios (1%, 2% e 5%) e da inclusão de linha de base nos espectros de treinamento. As bases de dados foram compostas por espectros Raman teóricos gerados a partir da soma de cinco funções gaussianas, contendo 410 pontos na região de 300 a 1000 cm^{-1}. As entradas da rede corresponderam aos espectros simulados, enquanto as saídas foram constituídas pelos 15 parâmetros gaussianos (posição, largura e área das cinco bandas). O desempenho das redes foi avaliado por meio do Erro Quadrático Médio (MSE) durante o treinamento e dos erros percentuais obtidos na predição dos parâmetros.

VI. Resultados

VII. Predição de parâmetros e espectros Raman

Redes neurais perceptron multicamadas (MLPs) foram treinadas para a predição de espectros Raman de vidros teluretos dopados com Cr_2O_3, utilizando espectros teóricos e experimentais. Os modelos foram avaliados a partir de diferentes arquiteturas e tamanhos de bases de dados, variando entre 1.000 e 20.000 curvas, com o objetivo de analisar o impacto da quantidade de dados no desempenho e no custo computacional.

Os treinamentos foram realizados com 5.000 épocas, *batch size* de 64 e taxa de aprendizado de 0,001. Entre as funções de ativação testadas (Sigmoid, Tanh e ReLU), observou-se que as redes com ReLU apresentaram melhor desempenho preditivo, enquanto Sigmoid e Tanh levaram a resultados insatisfatórios, com tendência a sobreajuste. As melhores configurações foram obtidas com bases de aproximadamente 10.000 curvas, representando um equilíbrio entre desempenho e custo computacional.

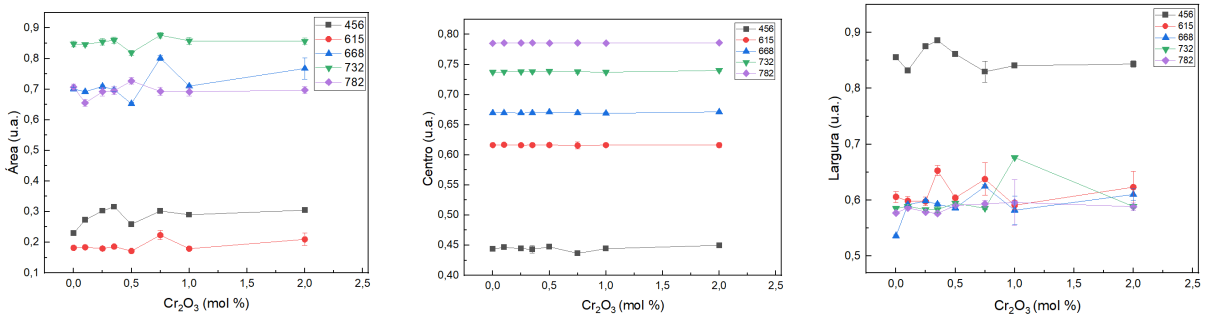
VIII. Parâmetros espectrais: área, centro e largura

Foram analisados simultaneamente os parâmetros espectrais (área, centro e largura) das cinco melhores redes neurais (1C-1Ag, 1C-2Ag, 1C-3Ag, 1C-4Ag e 1C-11Ag), treinadas com 1% de ruído e correção de linha de base. Os resultados indicam elevada consistência entre as redes, com baixa dispersão entre as predições e boa reprodutibilidade para todas as amostras analisadas.

A análise das áreas das bandas indica pequenas variações em função da concentração de Cr_2O_3, sem mudanças significativas no comportamento geral. Os centros das bandas permanecem praticamente constantes entre as redes, com variações inferiores à resolução experimental do equipamento (3 cm^{-1}), indicando ausência de deslocamentos espectrais relevantes.

As larguras apresentam maior dispersão em comparação aos demais parâmetros, o que está associado à maior sensibilidade desse parâmetro à forma do pico e ao processo de correção de linha de base. Ainda assim, os desvios permanecem baixos, inferiores a 3 cm^{-1}, mantendo boa concordância entre os modelos.

Fig. 1. Parâmetros espectrais obtidos pelas cinco melhores redes neurais: áreas, centros e larguras das bandas Raman.



(a) Áreas (b) Centros (c) Larguras

Fonte: Elaboração própria.

Em conjunto, os resultados demonstram que a abordagem baseada em redes neurais reproduz de forma consistente os parâmetros espectrais obtidos por métodos tradicionais, apresentando boa estabilidade e robustez estatística.

IX. Conclusões

Os resultados obtidos indicam que o uso de redes neurais artificiais é eficiente na determinação dos parâmetros das bandas Raman em vidros teluretos dopados com Cr_2O_3. Em comparação com métodos tradicionais de ajuste, as redes apresentaram maior flexibilidade na análise dos espectros e menor sensibilidade a ruídos experimentais, reproduzindo de forma consistente os parâmetros gaussianos das bandas vibracionais. A metodologia proposta mostrou-se capaz de fornecer estimativas confiáveis dos parâmetros espectrais, contribuindo para uma análise mais robusta da estrutura dos vidros estudados. Dessa forma, as redes neurais se apresentam como uma ferramenta promissora para o tratamento de dados espectroscópicos complexos e para investigações estruturais em materiais vítreos.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Grupo de Propriedades Eletrônicas e Vibracionais em Materiais (GPEViM) da UEPG pela estrutura, ao C-LABMU/UEPG e às agências de fomento CAPES e CNPq.

Referências

BABINI, M.; MARRANGHELLO, N. **Introdução às Redes Neurais Artificiais**. São José do Rio Preto, SP: Cultura Acadêmica Editora; Laboratório Editorial IBILCE, UNESP - Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, 2007.

BRANDT, J. et al. Deep learning for reconstructing low-quality ftir and raman spectra — a case study in microplastic analyses. **Applied Spectroscopy**, SAGE Publications, v. 75, n. 6, p. 665–674, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1177/00037028211009455>. Acesso em: 24 abr. 2026.

EWUSI-ANNAN, E. et al. Automatic preprocessing of laser-induced breakdown spectra using partial least squares regression and feed-forward artificial neural network: Applications to earth and mars data. **Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy**, v. 171, p. 105930, 2020.

FAN, M. et al. Deep learning-based component identification for the raman spectra of mixtures. **Analytica Chimica Acta**, Elsevier, v. 1081, p. 51–59, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2019.06.034>. Acesso em: 04 maio 2026.

GHOSH, K. et al. Deep learning spectroscopy: Neural networks for molecular excitation spectra. **Advanced Science**, v. 6, p. 1801367, 2019. ISSN 2198-3844.

GONÇALVES, A. et al. Estudo da dependência composicional com as propriedades térmicas e espectroscópicas do sistema teo2-li2o-bao. UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA, 2016.

HAYKIN, S. **Neural Networks and Learning Machines**. 3. ed. New York: Prentice Hall, 2009.

JOHNSON, J. R. et al. Towards optimizing neural network-based quantification for nmr metabolomics. **Analytica Chimica Acta**, Elsevier, v. 1309, p. 347054, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2024.347054>. Acesso em: 04 maio 2026.

LI, L.-N. et al. A review of artificial neural network based chemometrics applied in laser-induced breakdown spectroscopy analysis. **Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy**, Elsevier, v. 180, p. 106183, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.sab.2021.106183>. Acesso em: 24 abr. 2026.

NOVATSKI, A. et al. Thermal and optical properties of lithium-zinc-tellurite glasses. **Materials Chemistry and Physics**, v. 231, p. 150–158, 2019.

WANG, Z. et al. An iterative curve-fitting baseline correction method for raman spectra driven by neural network. **Vibrational Spectroscopy**, Elsevier, v. 125, p. 103560, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2023.103560>. Acesso em: 04 maio 2026.

ZOU, H. H. et al. Spectral preprocessing across featureless nir and feature-rich mir: Machine learning classification of black plastics. **Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, Elsevier, v. 309, p. 124921, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2025.124921>. Acesso em: 24 abr. 2026.