

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS**

JEFERSON SHIGUEMI MUKUNO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NO DESENVOLVIMENTO DE
FORMULAÇÕES DE COMPÓSITOS ELASTOMÉRICOS COM NEGRO DE CARBONO
RECUPERADO DE PNEUS INSERVÍVEIS**

**ROSANA
2025**



JEFERSON SHIGUEMI MUKUNO

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NO DESENVOLVIMENTO DE
FORMULAÇÕES DE COMPÓSITOS ELASTOMÉRICOS COM NEGRO DE CARBONO
RECUPERADO DE PNEUS INSERVÍVEIS**

Dissertação apresentada como requisito à obtenção do título de Mestre à Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais, linha de pesquisa em Modelagem e Simulação em Materiais, área de concentração em Ciência dos Materiais, sob a orientação do Prof. Dr. Renivaldo José dos Santos.

**ROSANA
2025**

M953a Mukuno, Jeferson Shiguemi

Aplicação de redes neurais artificiais no desenvolvimento de formulações de compósitos elastoméricos com negro de carbono recuperado de pneus inservíveis / Jeferson Shiguemi Mukuno. -- Rosana, 2025

98 f. : il., tabs.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Engenharia e Ciências, Rosana

Orientador: Renivaldo José dos Santos

Coorientador: Carlos Toshiyuki Hiranobe

1. Ciência dos materiais. 2. Elastômeros. 3. Propriedades mecânicas. 4. Modelagem de dados. 5. Redes neurais (Computação). I. Título.

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE JEFERSON SHIGUEMI MUKUNO, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DA FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA - CÂMPUS DE PRESIDENTE PRUDENTE.

Aos 28 de novembro de 2025, às 14h20min, por meio de Videoconferência, realizou-se a defesa de DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de JEFERSON SHIGUEMI MUKUNO, intitulada

Aplicação de redes neurais artificiais no desenvolvimento de formulações de compósitos elastoméricos com negro de carbono recuperado de pneus inservíveis. A Comissão Examinadora foi constituída pelos seguintes membros: Prof. Dr.

RENIVALDO JOSÉ DOS SANTOS (Orientador(a) - Participação Virtual) do(a) Diretoria /

UNESP / Câmpus de Rosana - FEC, Prof. Dr. AUGUSTO BATAGIN NETO (Participação

Virtual) do(a) Departamento de Ciências e Tecnologia / UNESP / Câmpus de Itapeva - ICE,

Prof. Dr. GIOVANNI BARRERA TORRES (Participação Virtual) do(a) Departamento de

Engenharia do Desenho Industrial / Instituto Tecnológico Metropolitano, Após a exposição

pelo mestrando e arguição pelos membros da Comissão Examinadora que participaram

do ato, de forma presencial e/ou virtual, o discente recebeu o conceito final: APROVADO

 . Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi

assinada pelo(a) Presidente(a) da Comissão Examinadora.

Documento assinado digitalmente
 **RENIVALDO JOSE DOS SANTOS**
Data: 28/11/2025 15:13:12-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. RENIVALDO JOSÉ DOS SANTOS

AGRADECIMENTOS

À minha família, pelo apoio incondicional nos momentos difíceis, pela paciência diante de meus rompantes, pela compreensão e resignação perante minhas ausências, bem como pela constante companhia e incentivo ao longo de toda a trajetória acadêmica.

À Chefia do Departamento de Engenharia da FEC – Faculdade de Engenharia e Ciências, na pessoa do Prof. Dr. Leonardo Lataro Paim e da Profa. Dra. Andréia Fátima Zanette, que, ao incentivarem meu desenvolvimento acadêmico e profissional, tornaram possível o cumprimento das atividades vinculadas ao Programa de Pós-Graduação.

À Direção da FEC – Faculdade de Engenharia e Ciências, na pessoa do Prof. Dr. Renivaldo José dos Santos, pelo apoio institucional e pelo incentivo contínuo ao meu desenvolvimento acadêmico e profissional.

Ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais (POSMAT), pela oportunidade de crescimento acadêmico e profissional, bem como pelo apoio financeiro concedido para a participação em eventos científicos.

À Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, pelas oportunidades oferecidas ao longo de minha formação, as quais foram fundamentais para meu desenvolvimento acadêmico, científico e profissional.

Ao Prof. Dr. Renivaldo José dos Santos, orientador, conselheiro e amigo, pela orientação segura, pelas valiosas conversas, pelo incentivo constante e pela confiança depositada durante todas as etapas deste trabalho.

Ao Dr. Carlos Toshiyuki Hiranobe, coorientador, conselheiro e amigo, pelas relevantes contribuições científicas e pelo apoio fundamental na pesquisa e no desenvolvimento na área de Ciência dos Materiais, com ênfase em compósitos elastoméricos.

Ao Prof. Dr. Guilherme Pina Cardim, conselheiro e amigo, pela dedicação, pelo rigor científico e pelas relevantes contribuições intelectuais, bem como pela colaboração decisiva no desenvolvimento da pesquisa na área de Ciência da Computação, especialmente no que se refere às redes neurais artificiais.

Ao Prof. Dr. Michael Jones da Silva, ao Prof. Dr. Flávio Camargo Cabrera, ao Prof. Dr. Iago William Zapelini e ao doutorando em Ciência e Tecnologia de Materiais, Sr.

Henrique Pina Cardim, conselheiros e amigos, pelo apoio acadêmico, pelas discussões construtivas e por contribuírem de forma significativa para a construção de minha consciência crítica, ética e do brio acadêmico.

Ao Prof. Dr. Erivaldo Antonio da Silva, pelo apoio ao meu desenvolvimento acadêmico e pelas contribuições ao longo de minha trajetória no Programa.

Ao Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais da FEIS – Campus de Ilha Solteira, bem como ao técnico de laboratório Elton, pela realização dos ensaios de Microscopia Eletrônica de Varredura e pelo suporte técnico oferecido.

Aos membros da Banca Examinadora, por disponibilizarem seu valioso tempo para a leitura, análise e avaliação deste trabalho, contribuindo com sugestões e críticas que certamente enriqueceram esta pesquisa.

MUKUNO, J. S. **Aplicação de redes neurais artificiais no desenvolvimento de formulações de compósitos elastoméricos com negro de carbono recuperado de pneus inservíveis**. 2025. 98 f. Dissertação (Mestre em Ciência e Tecnologia de Materiais) UNESP, Campus de Rosana, Faculdade de Engenharia e Ciências, Departamento de Engenharia, Rosana, 2025.

RESUMO

Em 2023, a produção mundial de pneus foi de 2,3 bilhões de unidades. Após seu uso, os pneus inservíveis representam um desafio ambiental, devido à sua elevada resistência à degradação e ao potencial poluente dos reagentes utilizados na vulcanização da borracha. A pirólise de pneus surge como alternativa sustentável, gerando gases, óleos de alto poder calorífico e negro de carbono recuperado (rCB), este último aplicável como carga em formulações elastoméricas. Apesar de o rCB apresentar propriedades próximas às do negro de carbono virgem (CB), a variação na composição dos pneus originais compromete a padronização e o desempenho mecânico dos compósitos. Diversos estudos visam melhorar o desempenho do rCB por meio de formulações para borracha desenvolvidas a partir de métodos empíricos baseados em tentativa e erro, que demandam tempo, materiais, mão-de-obra qualificada e alto consumo de energia. Para otimizar esse processo, este trabalho propõe o uso de redes neurais artificiais (ANNs) na predição de propriedades reométricas e mecânicas de compósitos elastoméricos com rCB, reduzindo custos e evitando a geração desnecessária de resíduos durante o desenvolvimento de formulações. Foram produzidos compósitos de polibutadieno (BR) com teores de rCB variando entre 0 e 50 phr. Os dados experimentais obtidos foram utilizados para treinar nove ANNs, projetadas para prever: tempo ótimo de cura (t_{90}), dureza, densidade, resistência à abrasão, densidade de ligações cruzadas, resistência à tração (tensão e deformação na ruptura) e resistência ao rasgo (força e deslocamento no rasgo). O treinamento foi realizado utilizando o algoritmo Levenberg-Marquardt com regularização bayesiana. As predições apresentaram baixa margem de erro quando comparadas aos ensaios de validação, confirmando a eficácia da abordagem. O uso de ANNs mostrou-se uma ferramenta promissora para o desenvolvimento sustentável de compósitos elastoméricos com rCB, promovendo economia de recursos e maior eficiência no processo de vulcanização.

Palavras-chave: polibutadieno, negro de carbono recuperado, redes neurais artificiais, predição de propriedades, materiais sustentáveis.

ABSTRACT

In 2023, global tire production reached approximately 2.3 billion units. After their service life, end-of-life tires pose a significant environmental challenge due to their high resistance to degradation and the pollutant potential of the reagents employed in rubber vulcanization. Tire pyrolysis has emerged as a sustainable alternative, generating gases, high-calorific-value oils, and recovered carbon black (rCB), the latter of which can be used as a filler in elastomeric formulations. Although rCB exhibits properties similar to those of virgin carbon black (CB), variations in the composition of the original tires hinder standardization and compromise the mechanical performance of the resulting composites. Several studies have aimed to improve rCB performance through rubber formulations developed empirically by trial and error, a time-consuming process that demands significant material, labor, and energy resources. To optimize this process, the present work proposes the use of artificial neural networks (ANNs) to predict the rheometric and mechanical properties of elastomeric composites containing rCB, thereby reducing costs and preventing unnecessary waste generation during formulation development. Composites based on polybutadiene rubber (BR) were prepared with rCB contents ranging from 0 to 50 phr. The experimental data obtained were used to train nine ANNs designed to predict the following properties: optimum cure time (t_{90}), hardness, density, abrasion resistance, crosslink density, tensile strength (stress and strain at break), and tear strength (force and displacement at tear). The training process employed the Levenberg–Marquardt algorithm with Bayesian regularization. The predictions exhibited low error margins when compared with validation test results, confirming the effectiveness of the proposed approach. The use of ANNs proved to be a promising tool for the sustainable development of elastomeric composites reinforced with rCB, enabling resource savings and improved efficiency in the vulcanization process.

Keywords: polybutadiene, recovered carbon black, artificial neural networks, property prediction, sustainable materials.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Estrutura molecular básica da borracha de polibutadieno.....	22
Figura 2. Isômeros do polibutadieno: a) 1,2- <i>vinil</i> ; b) 1,4- <i>trans</i> e c) 1,4- <i>cis</i>	22
Figura 3. Polímeros formados pelos isômeros do polibutadieno	22
Figura 4. Arranjos das partículas de negro de carbono.....	25
Figura 5. Três tipos diferentes de negro de carbono.	26
Figura 6. Imagens de MEV mostrando a estrutura do negro de carbono.....	27
Figura 7. Estruturas do negro de carbono.	27
Figura 8. Diferentes arranjos de partículas em aglomerados de CB.	28
Figura 9. Ligações sulfídicas da borracha natural (poli-isopreno).	31
Figura 10. Tipos de ligação sulfídica	32
Figura 11. Partes de um neurônio biológico	35
Figura 12. Conexões neuronais em imagem CLSM.	36
Figura 13. Esquema gráfico de um neurônio artificial.....	37
Figura 14. Estrutura das ANNs.....	49
Figura 15. Parâmetros (a) e performance (b) de treinamento de ANNs	52
Figura 16. Histograma de erros e estrutura de ANNs.....	55
Figura 17. Curvas reométricas dos compósitos de BR-rCB de 0 a 50 phr.	57
Figura 18. Grau de dispersão da carga na matriz polimérica.	58
Figura 19. Densidade dos compósitos de BR-rCB com 0 a 50 phr.	62
Figura 20. Densidade de ligações cruzadas.....	63
Figura 21. Dureza e densidade de ligações cruzadas.....	64
Figura 22. Perda por abrasão e densidade de ligações cruzadas.....	65
Figura 23. Ensaios de resistência à tração e de resistência ao rasgo.....	66
Figura 24. Histogramas de erros dos treinamentos das ANNs.....	69
Figura 25. Performances de treinamento das ANNs	70
Figura 26. Execução da predição do t_{90} pela rede neural correspondente.....	71
Figura 27. Execução da aplicação com a integração das ANNs treinadas.	72
Figura 28. Erro relativo das predições das ANNs.....	73
Figura 29. Correlação entre as predições e os testes em laboratório.	75
Figura 30. Comparação de predições com as médias ponderadas	76
Figura 31. Comparação das predições com as médias ponderadas (deformação). 77	
Figura 32. Comparação das predições com as médias ponderadas (tensão).....	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Principais propriedades do polibutadieno 1,4-cis.	21
Tabela 2. Formulação dos compósitos de BR-rCB.	43
Tabela 3. Arquitetura das ANNs criadas e treinadas	49
Tabela 4. Ensaio reométrico: médias e desvios-padrão	58
Tabela 5. Arquitetura das ANNs e testes de performance	67
Tabela 6. Valores de entrada e de saída da ANN de predição do t_{90}	71
Tabela 7. Predições das ANNs para formulações com 23 phr de rCB.	72
Tabela 8. Resultados dos ensaios laboratoriais para 23 phr de rCB.	72

LISTA DE QUADROS

Quadro 1. Características físicas e aplicações dos tipos de polibutadieno.	23
Quadro 2. Sistemas de vulcanização sulfúrica.	33

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

rCB	negro de carbono recuperado (<i>recovered carbon black</i>)
BR	polibutadieno
NR	borracha natural
ANN	rede neural artificial
CB	negro de carbono virgem
R ²	coeficiente de determinação
UV	radiação ultravioleta
SBR	estireno-butadieno
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
OAN	número de absorção de óleo (<i>oil absorption number</i>)
DBP	dibutiftalato
HAP	hidrocarbonetos aromáticos policíclicos
SO _x	óxidos de enxofre (<i>sulfur oxides</i>)
NO _x	óxidos de nitrogênio (<i>nitrogen oxides</i>)
PM	material particulado (<i>particulate matter</i>)
CV	sistema de vulcanização convencional
SEV	sistema de vulcanização semi-eficiente
EV	sistema de vulcanização eficiente
A/S	proporção entre acelerador e enxofre
phr	partes por cem partes de borracha (<i>per hundred rubber</i>)
CLSM	microscopia confocal de varredura a laser (<i>confocal laser scanning microscopy</i>)
ReLU	função linear retificada (<i>rectified linear unit</i>)
FNN	rede neural de propagação direta (<i>feedforward neural network</i>)
RNN	rede neural recorrente (<i>recurrent neural network</i>)
CNN	rede neural convolucional (<i>convolutional neural network</i>)
DNN	rede neural de aprendizado profundo (<i>deep neural network</i>)
UM	unidades Mooney
PA	puro para análises
USP	<i>United States Pharmacopeia</i>
MBTS	dissulfureto de dibenzotiazol
TMTD	dissulfureto de tetrametiltiuram
PEG	polietilenoglicol

ODR	reômetro de disco oscilatório (<i>oscillating disk rheometer</i>)
MSE	erro quadrático médio (<i>mean square error</i>)
MARE	erro relativo absoluto médio (<i>mean absolute relative error</i>)
MLR	regressão linear múltipla (<i>multiple linear regression</i>)
RSM	metodologia de superfície de resposta (<i>response surface methodology</i>)
AAD	desvio médio absoluto (<i>absolute average deviation</i>)
DLC	densidade de ligações cruzadas
EC	ensaios laboratoriais de confirmação das predições das redes neurais
MPMI	médias ponderadas das médias internas

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	14
2. OBJETIVOS	19
2.1. Objetivo geral.....	19
2.2. Objetivos específicos	19
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
3.1. Elastômeros.....	20
3.2. Polibutadieno: estrutura, tipos e aplicações	21
3.3. Negro de carbono	24
3.4. Negro de carbono recuperado	29
3.5. Processo de Vulcanização.....	30
3.6. Redes Neurais Artificiais.....	34
3.6.1. Estrutura e Arquiteturas de Redes Neurais Artificiais	38
3.6.2. Implementação de ANNs	39
4. PROCESSO EXPERIMENTAL.....	42
4.1. Materiais	42
4.2. Preparo dos compósitos	42
4.3. Confeção dos Corpos de Prova	43
4.4. Métodos de Caracterização	44
4.4.1. Propriedades Reométricas	44
4.4.2. Grau de Dispersão da Carga na Matriz Polimérica.....	44
4.4.3. Ensaio de Densidade Relativa.....	45
4.4.4. Ensaio de Densidade de Ligações Cruzadas por Inchamento	46
4.4.5. Ensaio de Dureza Shore A	47
4.4.6. Ensaio de Resistência à Abrasão	47
4.4.7. Ensaio de Resistência à Tração e ao Rasgo	48
4.5. Redes Neurais Artificiais.....	48
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	57
5.1. Propriedades Reométricas	57
5.1.1. Grau de Dispersão do rCB na Matriz Polimérica	58
5.1.2. Torque Máximo e Torque Mínimo.....	59
5.1.3. Variação de Torque (ΔM).....	60
5.1.4. Tempo de Pré-Cura (t_{s1}) e Tempo Ótimo de Vulcanização (t_{90}).....	60

5.2. Propriedades Mecânicas	61
5.2.1. Densidade.....	62
5.2.2. Densidade de Ligações Cruzadas	63
5.2.3. Dureza	64
5.2.4. Resistência à Abrasão	65
5.2.5. Resistência à Tração e ao Rasgo	66
5.3. Redes Neurais Artificiais.....	67
6. CONCLUSÃO	79
REFERÊNCIAS	81
ANEXO I – TRABALHOS PUBLICADOS NO PERÍODO	95
ANEXO II – PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS NO PERÍODO	96
ANEXO III – PREMIAÇÃO OBTIDA NO PERÍODO	98

1. INTRODUÇÃO

Em 2023, a produção de pneus em nível global atingiu 2,29 bilhões de unidades [1]. A maior parte dessa produção concentrou-se nos continentes Ásia e Oceania, responsáveis por aproximadamente 67% do total, enquanto Europa, Oriente Médio e África contribuíram com 18%, e as Américas do Norte, Central e do Sul responderam por 15% [2]. Pneus que já cumpriram sua vida útil ou foram descartados são classificados como pneus inservíveis [3, 4, 5]. Dados de 2018 [6] indicaram que a geração anual desses resíduos alcançava 25,6 milhões de toneladas, com a China sendo a maior responsável, com 10,3 milhões de toneladas (40,2%), seguida pelos Estados Unidos, que contribuíram com 3,5 milhões de toneladas (13,7%).

A complexidade da composição dos pneus inservíveis representa um desafio ambiental considerável, uma vez que eles contêm polímeros elastoméricos, negro de carbono, fios de aço, fibras e diversos aditivos orgânicos e inorgânicos [7]. Em termos quantitativos, os elastômeros representam entre 60 e 65% do peso total, o negro de carbono varia de 25 a 35%, os aditivos orgânicos correspondem a 6 a 9%, os aditivos inorgânicos de 3 a 9%, o aço cerca de 19%, e o restante é composto por aceleradores e enchimentos introduzidos durante a fabricação [8, 9, 10].

O reaproveitamento desses materiais depende de um manejo adequado, permitindo a valorização de seus constituintes e a redução dos impactos ambientais associados ao descarte inadequado. Entre os métodos de tratamento mais comuns, destacam-se a incineração e a disposição em aterros sanitários, práticas que, embora difundidas, podem acarretar consequências ambientais negativas, incluindo a emissão de gases tóxicos, o aumento da concentração de gases de efeito estufa e a geração de lixiviados [11]. A adoção de estratégias de gestão sustentável para pneus inservíveis, portanto, revela-se essencial tanto para a mitigação dos impactos ambientais quanto para a recuperação de materiais de valor, possibilitando alternativas mais responsáveis e eficientes em relação ao ciclo de vida desses resíduos.

Entre as alternativas de destinação dos pneus inservíveis, destacam-se a recuperação, a utilização como agregado e a pirólise, as quais se configuram como estratégias mais econômicas e ambientalmente sustentáveis em comparação ao simples depósito em aterros sanitários. Nesse contexto, o processo de recuperação consiste na ruptura da rede covalentemente reticulada da borracha, acompanhada da

fragmentação parcial das cadeias poliméricas pela ação combinada de energia térmica, mecânica e química. Como resultado, a borracha recuperada torna-se novamente processável, podendo ser reformulada e submetida a um novo processo de vulcanização para dar origem a diferentes artefatos.

Além disso, a incorporação da borracha de pneus inservíveis como agregado em matrizes cimentícias representa uma alternativa promissora para a construção civil. Pesquisas recentes têm demonstrado que a substituição da areia em compósitos alcalinos ativados por pó de borracha pode ser aplicada em processos de manufatura aditiva baseados em extrusão. Essa estratégia, por sua vez, contribui para reduzir a dependência do concreto Portland convencional, cuja produção é reconhecida como uma das maiores fontes industriais de emissões de CO₂ [12].

Outro método relevante é a pirólise, na qual os resíduos de pneus são submetidos a temperaturas entre 400 e 700 °C em atmosfera inerte, ou seja, sem a presença de oxigênio. Esse processo promove a decomposição do material, resultando na formação de carvão ativado, negro de carbono recuperado (rCB), óleo e gás de pirólise. Por conseguinte, o rCB obtido apresenta custos de produção mais baixos e se insere como uma alternativa sustentável para a valorização desses resíduos, em contraste com outros métodos que geram impactos ambientais mais expressivos.

Apesar dos avanços obtidos no aprimoramento das técnicas de pirólise e de recuperação, é importante destacar que o rCB ainda apresenta variações em suas propriedades, uma vez que suas características estão diretamente relacionadas à origem do pneu utilizado como matéria-prima. Essas diferenças decorrem não apenas da formulação do composto elastomérico, mas também do próprio processo de fabricação do pneu, que inclui etapas de mistura, conformação, moldagem e vulcanização. Tais particularidades influenciam tanto as propriedades do rCB quanto o desempenho dos materiais nos quais ele é empregado, o que reforça a necessidade de aprofundar os estudos sobre padronização e controle de qualidade desse insumo [13].

Cada elastômero apresenta um conjunto particular de propriedades que orienta sua seleção para aplicações específicas. Nesse contexto, entre as borrachas sintéticas, destaca-se o polibutadieno (BR), cuja vulcanização resulta em materiais com elasticidade e resistência ao calor superiores às observadas na borracha natural

(NR). Essa característica está associada à sua menor histerese, o que confere maior resistência à abrasão, além de elevada flexibilidade em baixas temperaturas [14].

Apesar dessas propriedades promissoras, a pesquisa e o desenvolvimento de novos elastômeros vulcanizados ainda se baseiam, em grande parte, em métodos de tentativa e erro. Essa abordagem demanda elevado investimento de tempo e de recursos materiais, uma vez que, para se obter um compósito elastomérico com determinada dureza, resistência ao rasgo ou menor tempo de cura, são necessárias múltiplas tentativas até que se atinja o desempenho desejado. Esse processo, além de consumir energia e prolongar o ciclo de pesquisa, frequentemente gera resíduos que nem sempre recebem destinação adequada, resultando em custos adicionais e impactos ambientais. Nesse sentido, a aplicação de ferramentas computacionais capazes de prever propriedades dos compósitos surge como uma alternativa eficiente para reduzir tempo, energia e consumo de materiais, otimizando o processo de desenvolvimento.

Como as propriedades mecânicas e reométricas de compostos elastoméricos são influenciadas por uma ampla gama de fatores, desde a formulação até as condições do processo de fabricação, torna-se imprescindível a utilização de sistemas computacionais aptos a lidar com múltiplas variáveis interdependentes ou independentes, fornecendo resultados consistentes. Por conseguinte, as técnicas de redes neurais artificiais (ANNs) apresentam-se como instrumentos promissores para esse tipo de modelagem e simulação. Com a vantagem de serem tolerantes a dados discrepantes, as ANNs conseguem generalizar o comportamento de fenômenos complexos a partir de conjuntos de dados, sendo capazes, inclusive, de identificar padrões e relações não explícitas nesses dados [15]. Dessa forma, ao estabelecer e aproximar as correlações entre variáveis de entrada e saída, as ANNs demonstram eficiência na análise e na previsão de propriedades, independentemente da extensão ou da complexidade do problema [16].

As redes neurais artificiais (ANNs) configuram-se como modelos computacionais inspirados no funcionamento do cérebro humano, estruturadas em múltiplas camadas de neurônios artificiais [17]. Nesse arranjo, a primeira camada corresponde à de entrada de dados, em que cada neurônio é responsável por representar um tipo específico de informação. Em seguida, encontram-se uma ou mais camadas ocultas, compostas por neurônios interconectados, cujas ligações recebem, durante o processo de treinamento, valores de relevância ou pesos. Além

disso, cada neurônio possui uma função matemática associada, de modo que os resultados processados sejam ponderados antes de sua propagação. Assim, cada neurônio da camada oculta recebe os dados da camada anterior, aplica os fatores de relevância correspondentes, processa os valores obtidos e, por conseguinte, gera um resultado que é transmitido à rede, influenciando diretamente os cálculos dos neurônios subsequentes [18]. Finalmente, a camada de saída reúne e apresenta o resultado final desse processamento.

Nesse contexto, as ANNs apresentam ampla aplicabilidade em diferentes áreas do conhecimento, como o processamento de linguagem natural, o reconhecimento de padrões, a modelagem de sistemas complexos, a análise de séries temporais e a predição funcional. Sua versatilidade decorre, sobretudo, da capacidade de generalização e da robustez frente a dados discrepantes de entrada [19]. Por conseguinte, mostram-se especialmente eficazes na aproximação de relações entre variáveis obtidas a partir de medições experimentais, sobretudo em sistemas nos quais a modelagem matemática tradicional se apresenta como limitada ou mesmo inviável [20].

Além disso, diversos estudos têm explorado a utilização dessa ferramenta no campo dos elastômeros. Nesse sentido, Xiang [21], desenvolveu um trabalho pioneiro no qual aplicou ANNs para a predição da resistência à fadiga por tração em compósitos de borracha natural (NR) reforçados com negro de carbono (CB). Os dados de entrada considerados incluíram propriedades mecânicas, como resistência à tração (tensão a 100%, tensão e alongamento na ruptura), bem como parâmetros de viscoelasticidade ($\tan \delta$ a 7% de deformação). Como resultado, obteve-se uma precisão média de 97,3%, evidenciando a eficiência da metodologia proposta. De forma complementar, Marin [22], conduziu um estudo voltado à modelagem matemática da dinâmica de forças de restauração e dissipação em coxins elásticos e viscoelásticos empregados em sistemas de suspensão de motores a combustão de automóveis. Nesse caso, o modelo baseado em ANNs apresentou desempenho notável, alcançando coeficientes de determinação (R^2) variando entre 0,9872 e 0,9999, o que confirma a elevada confiabilidade da técnica para aplicações de engenharia.

Diante do exposto, torna-se evidente que as redes neurais artificiais podem ser aplicadas como modelos computacionais promissores para a predição de propriedades de compósitos elastoméricos, contribuindo de maneira significativa para

a redução da necessidade de ensaios laboratoriais extensivos. Nesse contexto, o presente estudo concentrou-se na aplicação de ANNs com o objetivo de prever nove conjuntos de dados correspondentes a sete propriedades reométricas e mecânicas de formulações de polibutadieno (BR) com adição de negro de carbono recuperado (rCB). Para cada variável de interesse, foi desenvolvida e treinada uma rede neural específica, de modo que, a partir da quantidade de rCB em relação ao BR informada pelo usuário, o sistema pudesse fornecer estimativas consistentes das demais propriedades.

Além disso, por meio de recursos de programação, essas nove redes neurais foram integradas em uma única ferramenta computacional, apta a prever com precisão as propriedades das formulações propostas. Tal abordagem não apenas potencializa a melhoria dos produtos fabricados em termos de segurança e eficiência, como também promove a economia de energia e insumos, na medida em que reduz, ou mesmo elimina, o tradicional processo de tentativa e erro. Ademais, contribui para a mitigação da geração de resíduos de borracha e para a otimização do tempo dedicado às pesquisas, ao mesmo tempo em que fortalece a perspectiva de sustentabilidade ao valorizar o uso do rCB proveniente da reciclagem de pneus inservíveis de caminhão.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo geral

O presente trabalho tem como objetivo geral desenvolver uma ferramenta computacional com a aplicação de redes neurais artificiais para a predição de propriedades reométricas e mecânicas de compósitos de polibutadieno com negro de carbono recuperado.

2.2. Objetivos específicos

- I. Desenvolver estudos sobre as técnicas de fabricação e de caracterização de borracha sintética vulcanizada, utilizando-se o polibutadieno como matriz elastomérica e o rCB de pneus inservíveis de caminhões como carga;
- II. Determinar as propriedades reométricas e mecânicas dos compósitos obtidos com rCB;
- III. Treinar as ANNs com os resultados obtidos nos ensaios reométricos e mecânicos;
- IV. Confirmar experimentalmente a predição das propriedades reométricas e mecânicas fornecida pelas ANNs.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Elastômeros

Os elastômeros constituem uma classe de materiais poliméricos que apresentam comportamento intermediário entre os estados sólido e fluido, caracterizando-se por sua elevada capacidade de deformação reversível quando submetidos a tensões moderadas. Em condições usuais de temperatura, esses materiais exibem um comportamento viscoelástico, situando-se entre o modelo ideal de um sólido elástico de Hooke, no qual a deformação é proporcional à tensão aplicada e ocorre recuperação completa após a retirada do esforço, e o modelo de um fluido newtoniano, em que a taxa de deformação é diretamente proporcional à tensão de cisalhamento [23, 24].

Quando submetidos a uma tensão de cisalhamento ou de extensão, os elastômeros sofrem uma deformação imediata, típica dos sólidos elásticos, seguida de uma deformação dependente do tempo, conhecida como fluência. Após a remoção da carga, parte da deformação se recupera instantaneamente, enquanto outra parte se recupera de forma gradual, podendo, em determinadas condições, permanecer uma deformação residual permanente [25, 26]. Esse comportamento está relacionado à mobilidade segmentar das cadeias poliméricas e às interações intermoleculares relativamente fracas, que permitem o rearranjo estrutural sob a ação de esforços mecânicos.

A denominação elastômero aplica-se, portanto, a polímeros que apresentam elevada elasticidade, resultante de sua estrutura molecular composta por longas cadeias flexíveis interligadas por ligações cruzadas. Essas ligações impedem o deslizamento irreversível entre as macromoléculas e permitem a recuperação da forma original após a deformação, conferindo estabilidade dimensional e resistência mecânica ao material [27, 28].

Os elastômeros também podem ser empregados como agentes de tenacificação em compósitos e blendas poliméricas. Quando incorporados a uma matriz mais rígida, as partículas elastoméricas dispersas são capazes de absorver e redistribuir tensões, alterando o estado de tensões locais e promovendo deformações plásticas controladas na fase contínua. Esse mecanismo resulta em maior resistência ao impacto e em melhor desempenho mecânico global do material [29, 30].

3.2. Polibutadieno: estrutura, tipos e aplicações

O polibutadieno (BR – *butadiene rubber*) é um elastômero sintético obtido por polimerização do monômero 1,3-butadieno, pertencente à classe dos polímeros diênicos. Devido à sua versatilidade estrutural e às suas propriedades físico-químicas, o BR pode substituir a borracha natural em diversas aplicações industriais ou ser combinado com outros materiais poliméricos, a fim de aprimorar determinadas propriedades mecânicas e reológicas [31,32].

Esse elastômero destaca-se por apresentar excelente resistência à abrasão e ao rasgo, alta flexibilidade em baixas temperaturas e boa resistência a solicitações mecânicas cíclicas, como indicado na Tabela 1. Tais características explicam seu amplo emprego nas indústrias automotiva, calçadista, de construção civil, de artigos esportivos e de equipamentos médicos. O BR também apresenta razoável resistência ao envelhecimento térmico e oxidativo, bem como boa flexibilidade a baixas temperaturas; contudo, possui resistência limitada à fadiga e moderada estabilidade química frente a ácidos orgânicos, álcoois, cetonas e aldeídos [33, 34].

Tabela 1. Principais propriedades do polibutadieno 1,4-cis.

Propriedade	Valores típicos
Densidade (g/cm ³)	0,91 – 0,93
Dureza Shore A	40 – 95
Tensão de ruptura (MPa)	3,5 – 21
Alongamento na ruptura (%)	600
Resistência ao rasgo	Excelente
Resistência ao impacto	Excelente
Deformação residual (%)	10 – 30
Resistência à abrasão	Excelente
Resistência elétrica ($\Omega \cdot \text{cm}^2$)	1×10^{11}
Temperatura mínima de serviço (°C)	-60
Temperatura máxima de serviço (°C)	90
Temperatura máxima por curtos períodos (°C)	100
Resistência ao ozônio	Moderada
Resistência à intempérie e UV	Moderada
Impermeabilidade a gases	Moderada
Resistência à água	Boa
Resistência a ácidos e bases diluídas	Boa
Resistência a ácidos e bases concentradas	Fraca
Resistência a solventes alifáticos	Muito fraca
Resistência a solventes aromáticos	Muito fraca
Resistência a óleos e combustíveis	Muito fraca
Vida útil média	3 a 5 anos

Fonte: Adaptado de Brydson, 1999 [33].

O BR é um homopolímero cujas unidades repetitivas derivam do 1,3-butadieno, conforme ilustrado na Figura 1.

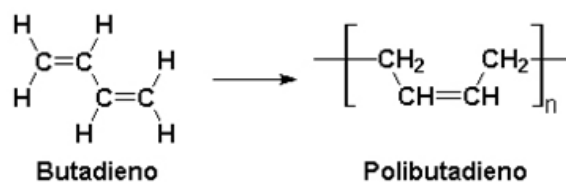


Figura 1. Estrutura molecular básica do butadieno e da borracha de polibutadieno

Fonte: Caetano, s/d [35].

A polimerização pode ocorrer por meio de ligações em ambas as extremidades da molécula (configuração 1,4) ou por adição em apenas uma extremidade (configuração 1,2), formando um grupo vinílico na cadeia lateral, como ilustrado na Figura 2 (a) e na Figura 3 (c).

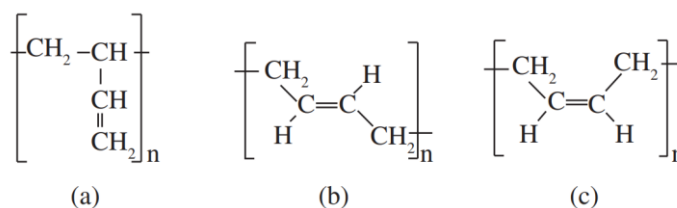


Figura 2. Isômeros do polibutadieno: a) 1,2-vinil; b) 1,4-trans e c) 1,4-cis.

Fonte: Adaptado de Rovere, *et al.*, 2008 [36].

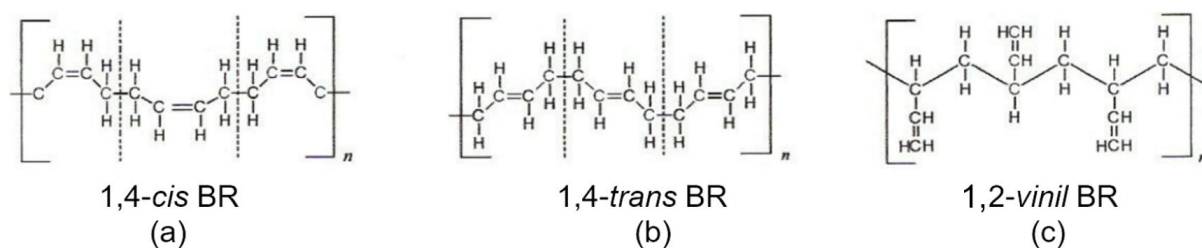


Figura 3. Polímeros formados pelos isômeros do polibutadieno.

Fonte: Short, Krauss e Zelinski, 1959 [37].

Essa diferença estrutural dá origem a três principais isômeros: 1,4-cis, 1,4-trans e 1,2-vinil, cada qual associado a propriedades e aplicações distintas, conforme resumido no Quadro 1.

Quadro 1. Características físicas e aplicações dos diferentes tipos de polibutadieno.

Tipos de BR	Especificidades	Características físicas do polímero a temperatura ambiente e aplicações
1,4- <i>cis</i>	Baixo teor (< 91%)	Aplicação na fabricação de pneus; em correias transportadoras, solados para calçados, isolante para cabos, fios, bolas de golfe, etc.
	Médio teor (92 a 96%)	
	Alto teor (> 97%)	
1,4- <i>trans</i>	Alto teor	Utilização restrita somente para reforço de pneus (termoplástico altamente cristalino e com alto ponto de fusão). Elastômero usado em mistura com outras borrachas sintéticas ou com a natural.
	Médio teor	Aplicado na banda de rodagem de pneus; toner e cintos de segurança.
1,2- <i>vinil</i>	1,2- <i>vinil</i> -isotático	Polímero cristalino, sem aplicação comercial significativa.
	1,2- <i>vinil</i> -sindiotático	Polímero cristalino que combina as propriedades de plástico e borracha. Usado na fabricação de fibras de carbono ou grafite.
	1,2- <i>vinil</i> -atático	Elastômero amorfo, usado em pneus.

Fonte: Short, Krauss e Zelinski, 1959 [37].

O polibutadieno de alto teor de unidades 1,4-*cis* é o mais relevante do ponto de vista tecnológico e econômico, pois suas propriedades se aproximam das da borracha natural, apresentando comportamento elastomérico puro à temperatura ambiente. Essa variedade é amplamente empregada na fabricação de pneus, na modificação de plásticos e em artigos técnicos de uso industrial e esportivo [38].

Apesar de suas excelentes propriedades mecânicas e dinâmicas, o BR de alto teor *cis* apresenta limitações, como sensibilidade ao ozônio, ao calor e à fadiga, além de desafios no processamento. Essas limitações justificam seu uso em misturas com outros polímeros, especialmente com borracha natural (NR) e com o estireno-butadieno (SBR), com o objetivo de equilibrar desempenho mecânico, resistência química e processabilidade [37].

O controle microestrutural é determinante para a obtenção de um polibutadieno de alto desempenho. A proporção entre unidades 1,4-*cis* e 1,4-*trans* depende fortemente da natureza do catalisador empregado na reação de polimerização [39]. Catalisadores estereoespecíficos do tipo Ziegler-Natta, baseados em metais como titânio, níquel, cobalto e lantanídeos, especialmente, neodímio, são

capazes de induzir seletividade *cis* superior a 97%, resultando em elastômeros de alta elasticidade e baixo módulo [40].

No mecanismo de polimerização por coordenação, os catalisadores Ziegler-Natta promovem a inserção do monômero na ligação carbono–metal terminal da cadeia em crescimento. A natureza do metal de transição determina a seletividade do processo, influenciando a razão entre adições 1,2 e 1,4. A proporção entre as configurações *cis* e *trans* é controlada pela estereoquímica do complexo alílico intermediário e pelas condições de reação, como razão molar dos componentes catalíticos, temperatura e tipo de solvente [41].

Dessa forma, a escolha do sistema catalítico e dos parâmetros operacionais de polimerização é crucial para direcionar a microestrutura e, consequentemente, as propriedades físicas e tecnológicas do polibutadieno, impactando diretamente sua aplicação industrial e desempenho em compósitos elastoméricos.

3.3. Negro de carbono

Na antiguidade, a fuligem (ou negro de fumo) era usada como pigmento para escrita à tinta, sendo um produto da queima de combustíveis fósseis ou madeira, que inclui muitos materiais diferentes do carbono. É um antigo produto, composto por 88 a 99,5% de carbono, 0,3 a 11% de oxigênio e 0,1 a 1% de hidrogênio, podendo apresentar diversas impurezas orgânicas e inorgânicas. Com a descoberta de outras aplicações, foi necessário aumentar, além da eficiência no volume produzido, o grau de pureza do produto para viabilizar seu uso, o que levou a aperfeiçoamentos dos processos de produção e, principalmente, de filtragem e remoção dos contaminantes, que degradavam os produtos que utilizavam o negro de fumo como matéria-prima. Passou-se a utilizar processos de combustão parcial ou de decomposição térmica de hidrocarbonetos selecionados, obtendo-se um negro de fumo com maior teor de carbono e quase isento de contaminantes, ao qual se deu a denominação de “negro de carbono” [42].

O negro de carbono é um material industrial que contém mais de 95% de carbono, fabricado de acordo com uma ampla gama de especificações que seguem normas de padronização internacionais.

Dos processos artesanais passando pela produção por canal, no século XIX, até os dias atuais, foram desenvolvidos processos de cada vez mais eficientes, como os de fornalha e os de decomposição térmica, impulsionados pela crescente demanda [43]. A aplicação do negro de carbono, que inicialmente se resumia à coloração de tintas, nos dias atuais consiste no aproveitamento de suas propriedades químicas, elétricas, térmicas e mecânicas em fabricação de borrachas, plásticos, refratários, tintas e papéis, além de aplicações em pinturas, revestimentos, cosméticos e condutores de energia elétrica.

O negro de carbono é um material em forma de pó muito fino, constituído de 95 a 99,9% de átomos de carbono que formam partículas de forma aproximadamente esférica com diâmetro inferior a 1 μm ; essas partículas agrupam-se em agregados, que, por sua vez, arranjam-se em aglomerados, conforme ilustrado na Figura 4 [44].

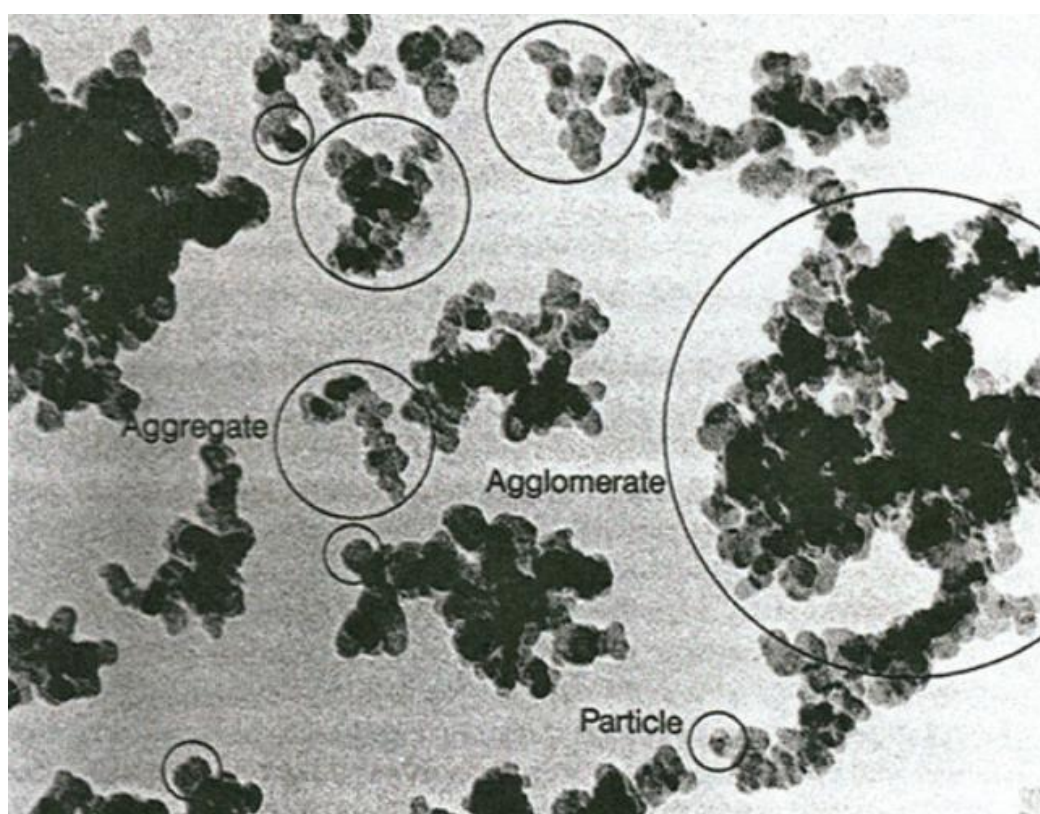


Figura 4. Arranjos das partículas de negro de carbono.
Fonte: Penta Carbon, 2025 [43].

Atualmente, o negro de carbono é produzido a partir de hidrocarbonetos de óleos aromáticos baseados em alcatrão de hulha, como o óleo de antraceno, e em

petróleo bruto, como fração de óleo pesado e resíduos de refinarias, podendo ser também usados gás, nafta, gasóleo e acetileno [45].

O negro de carbono é caracterizado por tamanho de partícula, estrutura, área superficial específica, e atividade superficial.

O tamanho da partícula influencia no poder de reforço mecânico dos negros de carbono e na dificuldade de processamento, que são inversamente proporcionais ao diâmetro da partícula. Não há processo normalizado para medir o tamanho de partícula do negro de carbono, apesar de poder ser observado por meio de microscópios eletrônicos. Conforme a norma ASTM D-3265-24a [46], é utilizada a determinação do poder de coloração do negro de carbono como método indireto para essa análise. O poder de coloração de uma amostra consiste na capacidade de reduzir a reflectância de uma pasta branca padrão em comparação com um negro de carbono de referência. Como se pode observar na Figura 5, é perceptível que a cor do material é mais escura conforme se diminui o tamanho de partícula.



Figura 5. Três tipos diferentes de negro de carbono.
Fonte: Penta Carbon, 2025 [43].

Assim como o tamanho de partícula, a estrutura do negro de carbono afeta a capacidade de coloração e de dispersão do material. A Figura 6 e a Figura 7 ilustram essas estruturas. O aumento do tamanho da estrutura melhora a capacidade de dispersão e a condutividade elétrica, mas a capacidade de coloração diminui [47].

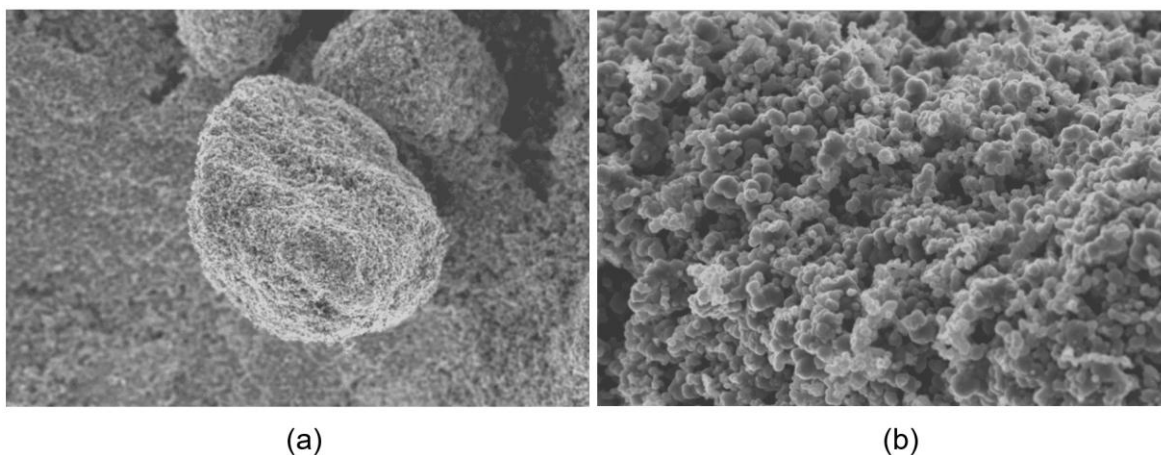


Figura 6. Imagens de MEV mostrando as partículas primárias (a) e os agregados e aglomerados (b) que compõem a estrutura do negro de carbono.

Fonte: Penta Carbon, 2025 [43].

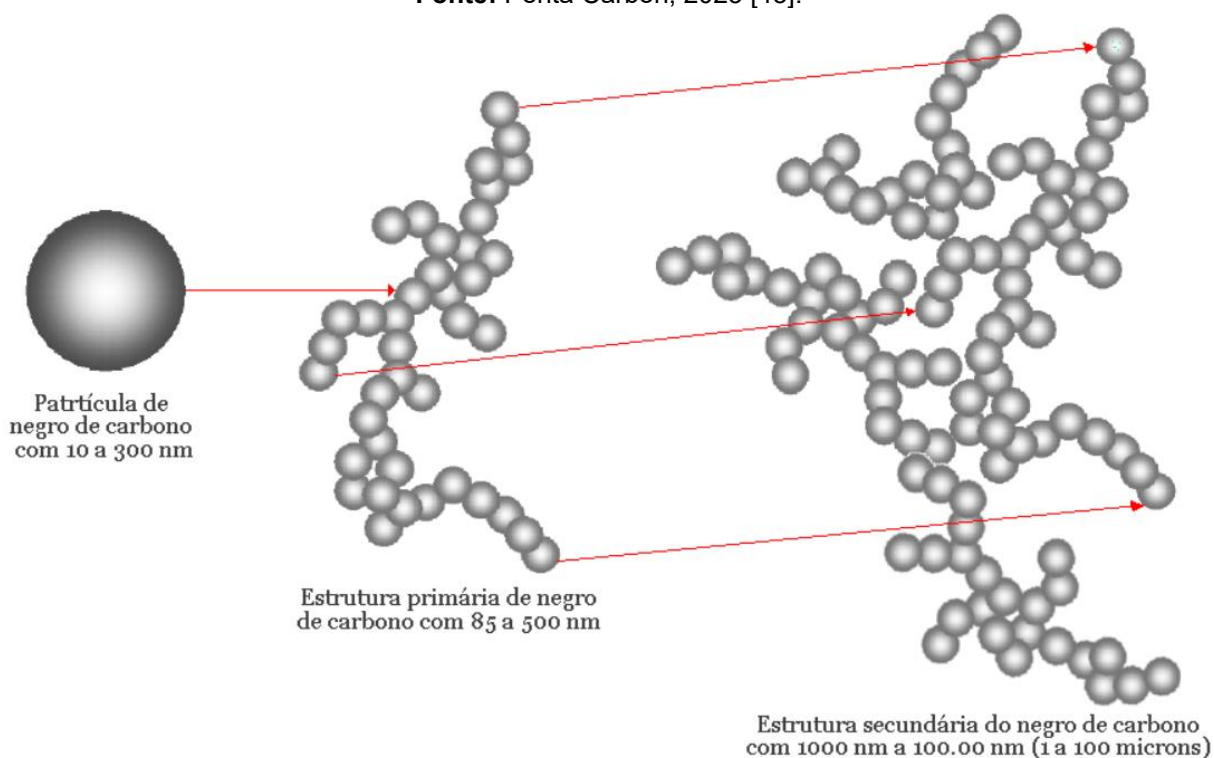


Figura 7. Estruturas que compõem o negro de carbono: partícula, agregado e aglomerado e suas dimensões aproximadas.

Fonte: Ciência e Tecnologia da Borracha, 2023 [35].

Área de superfície específica refere-se à superfície disponível para interação intermolecular em um grama do produto analisado, dada em m^2/g [32]. Para o negro de carbono, como se pode ver na Figura 8, depende da estrutura dos aglomerados e das partículas. Por apresentar diversos grupos funcionais na superfície, a área superficial é calculada com o uso de métodos de adsorção, como:

- a adsorção de iodo [32], que mede a massa de iodo adsorvida por quilograma de negro de fumo sob condições especificadas pela Norma ASTM D1510-21 [48];
- a absorção de azoto (gás), que mede a superfície específica total (interna e externa) por adsorção de nitrogênio, por meio do isoterma de adsorção de um gás puro a baixas temperaturas (-196°C), formando uma camada macromolecular de gás sobre a superfície das partículas; conhecendo o número total de moléculas de gás adsorvidas, calcula-se a superfície específica, de acordo com a norma ASTM 6556-21 [49].

A estrutura é uma propriedade decorrente do número de partículas por agregado, bem como a dimensão e a forma desses agregados e a densidade do entrelaçamento das partículas. A Norma ASTM D 2414-04 [50] estabelece os padrões para sua medição, por meio da medição da absorção de óleo (OAN – Oil Absorption Number) paraafínico ou dibutilftalato (DBP) por negros de carbono do tipo N, dada em cm^3/g (volume de óleo, em cm^3 , absorvido por grama de CB). O OAN depende do processo de produção do CB, sendo associado a um elevado número de partículas por agregado.

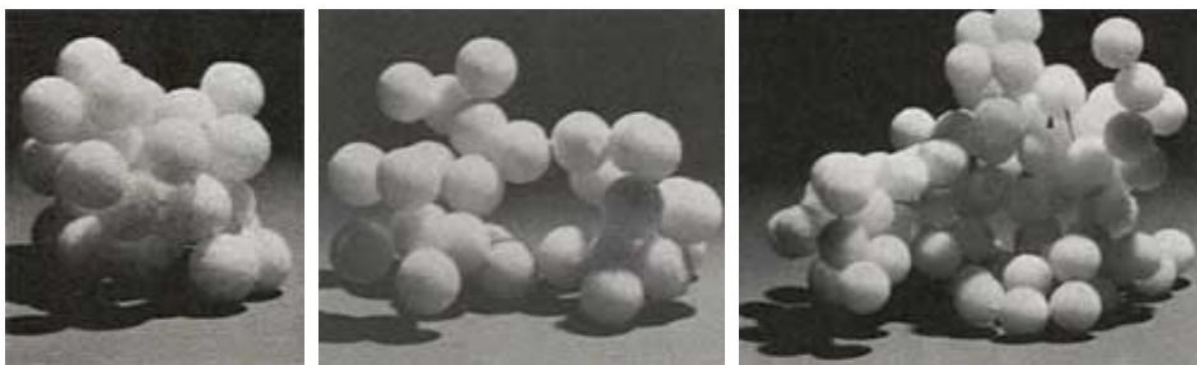


Figura 8. Diferentes arranjos de partículas em aglomerados de CB.

Fonte: Rubberpedia, 2023 [44].

A atividade superficial do negro de carbono mede a capacidade de gerar reforço mecânico nos compostos aos quais é adicionado, relacionada às ligações químicas na interface com a borracha e depende das condições de produção do CB. Não existe um método direto para medir a atividade superficial do CB, sendo aplicáveis dois métodos: a descoloração por tolueno, conforme Norma ASTM D 1618-99, ou pela subtração do número de iodo do valor da área superficial específica calculada pelo azoto, o que resultaria em valores positivos para CBs muito ativos, ao

passo em que resultados negativos indicam que o composto de borracha irá se degradar de forma progressiva.

3.4. Negro de carbono recuperado

O negro de carbono virgem (CB) é produzido a partir de combustíveis fósseis, o que leva a uma alta pegada de carbono e alta emissão de poluentes, o que fomenta a demanda por substitutos menos agressivos ao meio ambiente [51].

Os pneus inservíveis podem ser aproveitados como fonte de matéria-prima e de energia com o uso do processo de pirólise, que tem se mostrado promissor no tratamento desses resíduos [52]. Após serem triturados, passam por um processo de decomposição térmica em atmosfera inerte a temperaturas que variam de 400 a 650 °C, produzindo gases, óleo de pirólise e resíduos de carbono. A massa de carbono resultante da pirólise de pneus inservíveis, que pode chegar a 35% do total, carece de tratamento para se obter negro de carbono recuperado (rCB) com melhores teores de carbono [53].

O resíduo de carbono resultante da pirólise apresenta ampla distribuição de tamanhos de partícula, por serem originários de pneus de diferentes composições, que variam de acordo com o fabricante e com a destinação de uso. Além dos tamanhos de partícula, os agregados e aglomerados têm estrutura mais grosseira que as encontradas no negro de carbono virgem. A concentração de impurezas também é elevada, podendo chegar a 20% de sua massa, e são constituídas de zinco, silício, cálcio e potássio, entre outros elementos. As impurezas reduzem a atividade da superfície, dificultando as interações intermoleculares quando o rCB é utilizado na produção de compostos de borracha.

Apesar de o rCB ser inferior em desempenho ao CB, sua utilização na fabricação de compostos de borracha conduz a uma diminuição significativa da pegada de carbono, assim como da emissão de poluentes como óxidos de enxofre (SO_x), óxidos de nitrogênio (NO_x), material particulado (PM) e hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (HAP) que a fabricação do CB produz [51].

O processo de pirólise aplicado determina quais impurezas estarão presentes no rCB produzido, considerando a moagem, o aquecimento, a separação

magnética, a desmineralização e a modificação de superfície, podendo, com o uso desses processos, melhorar as propriedades do rCB.

Dessa forma, pesquisar formas de promover o uso do rCB na indústria sem comprometer a qualidade do produto final se torna um caminho promissor para a redução da emissão de poluentes no meio ambiente e no uso de recursos finitos, como os derivados de petróleo.

3.5. Processo de Vulcanização

A borracha é um material elastomérico que possui características mecânicas exclusivas, como a elasticidade, impermeabilidade, isolamento, flexibilidade e resistência à temperatura. No entanto, apresentava-se mole e pegajosa em temperaturas mais altas e dura e rígida em clima frio [54]. Em 1834, Friederich Ludersdorfe e Nathaniel Hayward observaram que a adição de enxofre tornava a borracha menos pegajosa quando aquecidas [56].

Em 1839, Charles Goodyear descobriu um processo no qual o enxofre era misturado à borracha e, submetida a mistura a determinada temperatura e pressão, melhorava as propriedades mecânicas do composto, tornando-a mais elástica, resistente ao desgaste e menos suscetível a deformações permanentes. Esse processo foi aperfeiçoado e denominado como vulcanização.

A vulcanização é um processo essencial para a obtenção das propriedades finais das borrachas, naturais ou sintéticas, transformando materiais termoplásticos em polímeros com comportamento elastomérico estável e durável [55]. Trata-se, como se pode observar na Figura 9, de um processo de reticulação no qual a estrutura química da borracha é alterada, onde as cadeias poliméricas são ligadas umas às outras em vários pontos pela ação de um agente de vulcanização, formando ligações cruzadas entre as cadeias macromoleculares do polímero, que promovem a interconexão da estrutura formando uma rede tridimensional elástica em um emaranhado viscoso [56], conferindo elasticidade, resistência mecânica, e estabilidade térmica ao material.

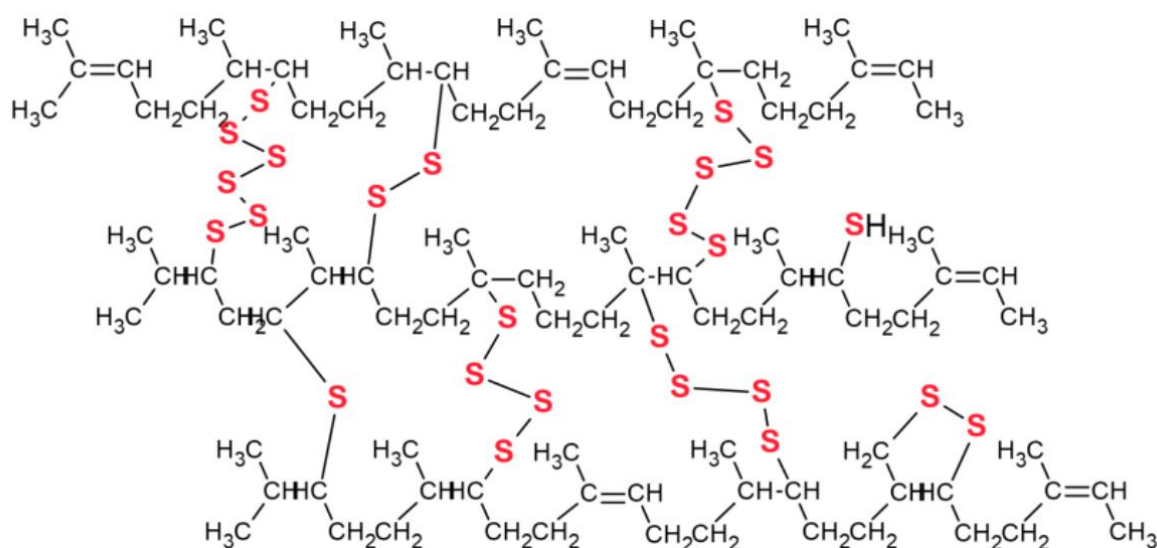


Figura 9. Ligações sulfídicas formadas pelos precursores de polissulfuretos nas cadeias principais da borracha natural (poli-isopreno).

Fonte: Adaptado de Hiranobe, 2022 [57].

Os principais componentes da borracha vulcanizada são elastômeros, agentes de vulcanização, aceleradores, ativadores, cargas de enchimento e de reforço, antioxidantes, plastificantes, agentes de acoplamento e outros aditivos específicos que possam conferir propriedades elétricas, químicas, magnéticas, térmicas, óticas e estéticas ao compósito [57].

No caso específico do BR, a vulcanização tem papel fundamental na definição de suas propriedades de desempenho, especialmente devido à elevada insaturação presente na cadeia polimérica, que possibilita múltiplos sítios de reação para agentes de cura [58]. A reação de vulcanização com enxofre, geralmente acelerada por compostos orgânicos, é a mais amplamente empregada, resultando em uma rede tridimensional cuja densidade de ligações cruzadas influencia diretamente a dureza, a resistência ao rasgo, a deformação permanente e o comportamento dinâmico do material [59].

Durante o processo, o enxofre reage com as duplas ligações carbono-carbono do polímero, formando pontes de enxofre entre cadeias adjacentes. O tipo e a quantidade de aceleradores utilizados determinam a cinética de vulcanização, a distribuição das pontes de enxofre (mono-, di- ou polissulfídicas), como ilustradas na Figura 10, e, conseqüentemente, o equilíbrio entre resistência e flexibilidade [60]. Além disso, parâmetros como temperatura, tempo e presença de agentes auxiliares (óxidos metálicos e ativadores) exercem papel decisivo na estrutura final da rede polimérica,

podendo também atribuir propriedades à borracha com a adição de outros reagentes, como os antioxidantes, para melhorar a durabilidade do material.

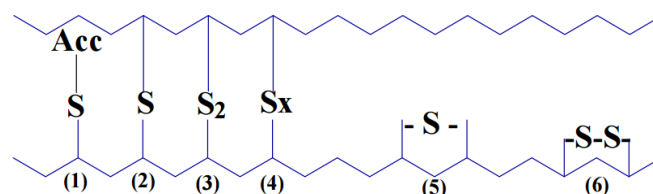


Figura 10. Tipos de ligação sulfídica formados na vulcanização da borracha: (1) grupos sulfídicos pendentes terminados pelo acelerador; (2) ligações monossulfídicas; (3) ligações dissulfídicas; (4) ligações polissulfídicas ($x > 2$); (5) e (6) mono e dissulfídicas cíclicas.

Fonte: Santos, 2014 [61].

A vulcanização sulfúrica dos elastômeros, entre os quais o BR se destaca pela presença de duplas ligações conjugadas, pode ser classificada em três sistemas principais: convencional (CV), semi-eficiente (SEV ou semi-EV) e eficiente (EV) [62,63]. A natureza do sistema de cura empregado influencia diretamente a rede de ligações cruzadas formada (mono-, di- ou polissulfídicas) e, conseqüentemente, as propriedades mecânicas, térmicas e dinâmicas do material vulcanizado.

No sistema convencional (CV) utiliza-se alta proporção de enxofre em relação ao acelerador, resultando em uma razão acelerador/enxofre baixa (tipicamente 0,1 a 0,6). Esse elevado teor de enxofre favorece a formação de ligações polissulfídicas, que conferem ao compósito elevada resistência ao rasgo e à fadiga de flexão, porém menor resistência ao calor e à degradação por intempéries [62,64]. Para o BR, essa característica é relevante quando se busca desempenho dinâmico elevado, embora a vulnerabilidade térmica limite algumas aplicações.

No sistema semi-eficiente (SEV), aplica-se moderada quantidade de enxofre e maior proporção de acelerador, estabelecendo uma razão acelerador/enxofre (A/S) ao redor de 0,7 a 2,5. Essa configuração possibilita um equilíbrio entre ligações polissulfídicas e mono/di-sulfídicas, resultando em boa combinação entre resistência mecânica, flexibilidade e estabilidade térmica [63,65]. No polibutadieno, este sistema é frequentemente adotado quando se busca um nível intermediário de rigidez com aceitável resistência ao envelhecimento.

Já no sistema eficiente (EV) emprega-se enxofre em quantidades muito reduzidas (0,4 a 0,8 phr) e elevado nível de acelerador (2,0 a 5,0 phr), gerando razão A/S tipicamente entre 2,5 e 12. Esse arranjo favorece predominantemente ligações mono- ou di-sulfídicas, que possuem maior estabilidade térmica e melhor resistência

ao envelhecimento, mas menor flexibilidade e resistência ao impacto [62,63]. No caso do BR, o sistema EV pode ser escolhido para aplicações estáticas ou de alta exigência térmica, com priorização da durabilidade sobre a deformação elástica.

Para o polibutadieno, a escolha do sistema de vulcanização deve levar em conta sua microestrutura (alto teor de unidades 1,4-cis, flexibilidade da cadeia) e a aplicação final desejada. Por exemplo, em aplicações de pneus ou solados onde exigem-se boa adaptação dinâmica, um sistema CV pode ser apropriado; já em vedações ou componentes expostos a altas temperaturas e oxidantes, o sistema EV ou SEV pode oferecer vantagem. O controle fino dos parâmetros, tais como tempo de cura, temperatura e a relação A/S, permite ajustar a densidade de ligações cruzadas e o tipo predominante de ligações (mono, di ou polissulfídicas), afetando propriedades como dureza, módulo elástico, alongamento, resistência à abrasão, fadiga e degradação térmica, conforme mostra o Quadro 2.

Quadro 2. Sistemas de vulcanização sulfúrica.

Sistema de Vulcanização	Enxofre (phr)	Acelerador (phr)	Razão A/S	Tipo Ligação	Características principais	Propriedades do vulcanizado
Convencional (CV)	2,5 – 3,5	0,4 – 0,6	0,10 – 0,25	Polissulfídicas (S–S–S–)	Alta taxa de reticulação e boa processabilidade	Boa resistência à fadiga e flexão; menor resistência ao envelhecimento térmico
Semi-eficiente (SEV)	1,0 – 2,0	0,8 – 1,2	0,50 – 0,70	Mistas (poli e dissulfídicas)	Compromisso entre CV e EV; equilíbrio entre propriedades dinâmicas e térmicas	Boa resistência à abrasão e envelhecimento, sem perda expressiva de elasticidade
Eficiente (EV)	0,3 – 0,8	1,5 – 3,0	2,0 – 5,0	Monossulfídicas (C–S–C)	Baixa densidade de reticulação e alta estabilidade térmica	Excelente resistência ao envelhecimento e à deformação permanente; menor histerese

Fonte: Adaptado de Coran (2003) [55], Hamed (2000) [66], Blow & Hepburn (2009) [67] e Mark, Erman & Eirich (2013) [68].

Conforme mencionado anteriormente, o polibutadieno apresenta elevada viscosidade, o que pode dificultar seu processamento e homogeneização com outros componentes da formulação. Essa limitação pode ser mitigada pela incorporação de

plastificantes, como o polietilenoglicol (PEG 4000), que reduzem a viscosidade do sistema e favorecem a dispersão dos demais reagentes durante o processo de mistura [69]. Além de facilitar o processamento, os plastificantes podem melhorar a resistência do elastômero à fadiga e à fratura, contribuindo para o aumento de sua durabilidade sob solicitações dinâmicas [70].

Do ponto de vista físico-químico, a presença de plastificantes também exerce efeito benéfico sobre a estabilidade do material frente a agentes externos, como radiação ultravioleta e umidade, retardando os mecanismos de envelhecimento oxidativo e a degradação térmica. Dessa forma, a seleção adequada do tipo e da concentração de plastificante torna-se um fator determinante para o equilíbrio entre processabilidade e propriedades mecânicas [71].

Assim, a compreensão detalhada dos mecanismos de reticulação e das interações moleculares envolvidas em cada sistema de cura, associada ao conhecimento das características estruturais do polibutadieno, constitui um elemento essencial para a otimização das formulações elastoméricas. Essa abordagem permite não apenas o desenvolvimento de compósitos com desempenho previsível e reproduzível, mas também o ajuste de suas propriedades às exigências específicas de cada aplicação, promovendo maior eficiência e sustentabilidade nos processos industriais.

3.6. Redes Neurais Artificiais

As redes neurais artificiais (ANNs) são modelos computacionais inspirados no funcionamento do cérebro humano, compostos por múltiplas camadas de unidades de processamento, conhecidas como neurônios artificiais, organizadas de forma hierárquica e interconectada [72]. Nessa configuração, as ANNs são capazes de analisar grandes volumes de dados, identificar padrões complexos de correlação entre variáveis de entrada e, a partir desse aprendizado, gerar previsões para condições ou valores ainda não testados experimentalmente [73].

Entre as principais características das ANNs está a capacidade de generalização, que consiste na habilidade de aprender o comportamento de um sistema a partir dos dados de treinamento e aplicá-lo de maneira eficaz a novos conjuntos de informações [74]. Além disso, as redes neurais destacam-se pela aptidão em aproximar relações não lineares entre variáveis de entrada e saída, sem a

necessidade de expressões analíticas explícitas ou de restrições quanto à complexidade dos sistemas analisados.

As ANNs podem ser compreendidas como técnicas computacionais de aprendizado de máquina que buscam reproduzir, de forma simplificada, a maneira como os cérebros biológicos processam informações e tomam decisões. Esses sistemas são capazes de identificar padrões, relacionar variáveis e selecionar soluções adequadas para a resolução de problemas complexos, apresentando desempenho notável em tarefas que envolvem reconhecimento de padrões, predição e classificação [73,75,76].

O termo “rede neural artificial” decorre da analogia com as redes neurais biológicas, que serviram de inspiração para o desenvolvimento desses modelos. Nos organismos vivos, os neurônios biológicos, representados na Figura 11, são as unidades fundamentais responsáveis pela recepção, processamento e transmissão de informações. Cada neurônio é composto por estruturas especializadas com funções distintas: os dendritos recebem estímulos provenientes de outros neurônios; o núcleo celular coordena o processamento das informações; o axônio conduz o impulso nervoso; e os telodendros transmitem os sinais para outras células nervosas [77,78].

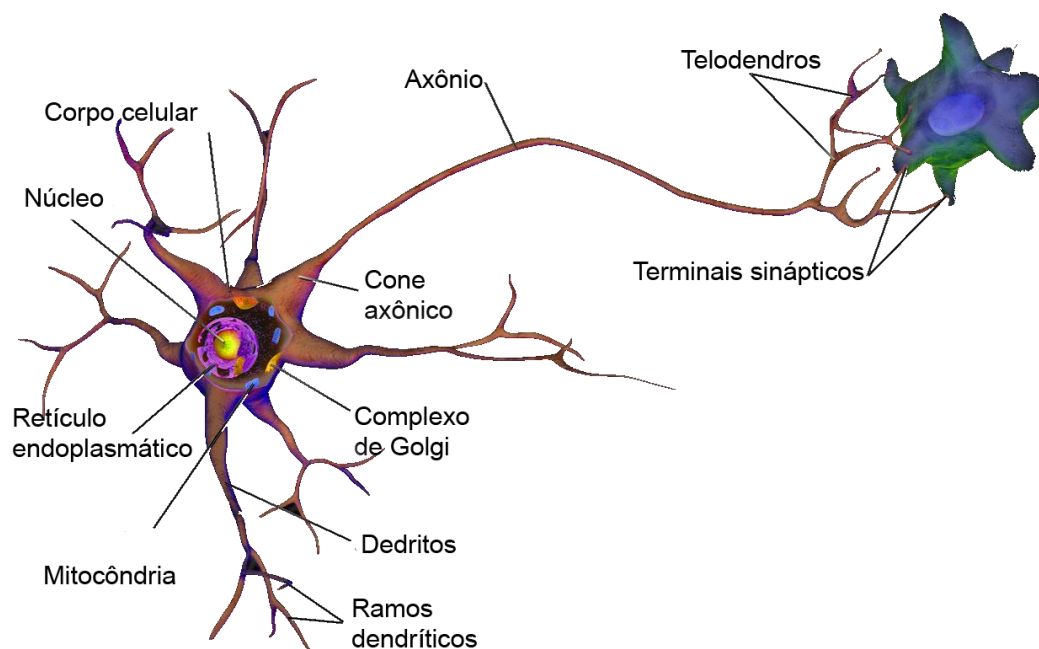


Figura 11. Partes de um neurônio biológico.
Fonte: BRUCE BLAUS, 2014 [79].

No cérebro humano, milhões de neurônios encontram-se interconectados, formando uma rede altamente complexa, capaz de processar e integrar um grande volume de informações de maneira dinâmica e paralela [78], como ilustrado na Figura 12. Essa complexidade estrutural e funcional foi a principal inspiração para a formulação das redes neurais artificiais, que, de modo análogo, recebem dados de entrada, realizam o processamento de informações e produzem respostas de saída com base em um processo de aprendizado adaptativo [72,73].

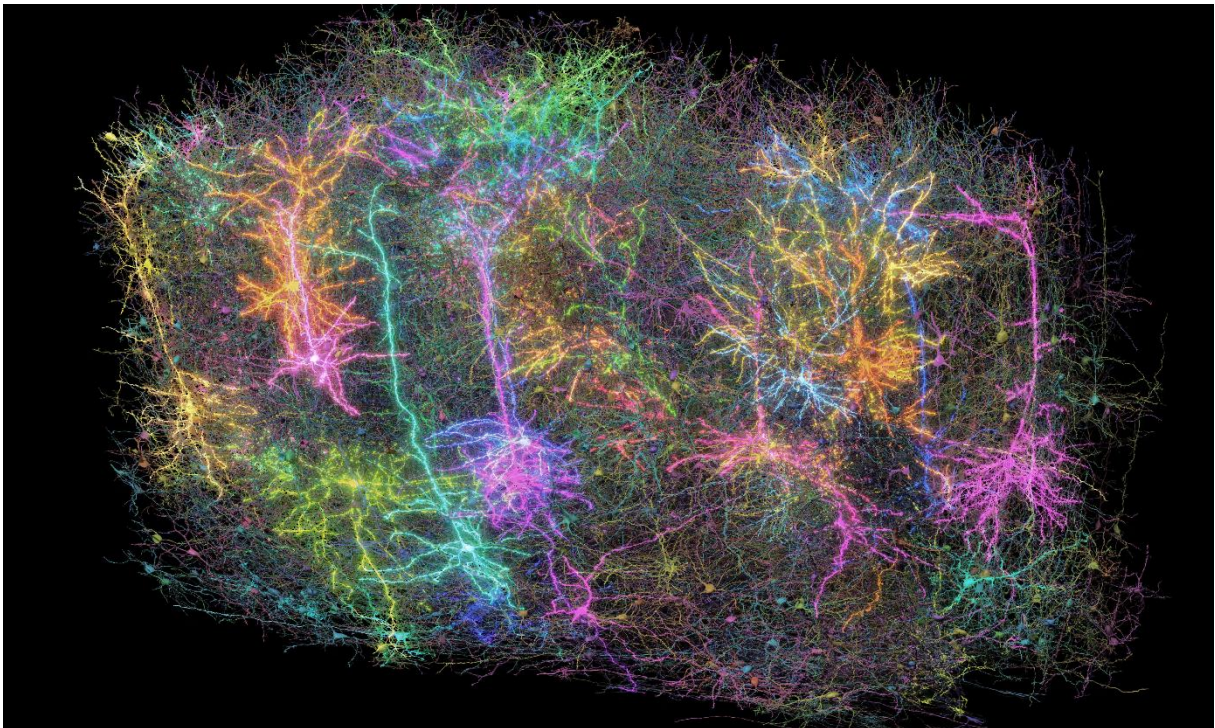


Figura 12. Conexões neuronais em imagem de Microscopia Confocal de Varredura a Laser (CLSM) de um excerto de cérebro de um camundongo.

Fonte: COLLMAN, Forrest; ALLEN INSTITUTE; ASSOCIATED PRESS, 2025 [80].

Do ponto de vista computacional, os neurônios artificiais foram concebidos como modelos matemáticos simplificados dos neurônios biológicos, buscando representar de forma funcional os principais mecanismos de recepção e transmissão de sinais [75]. Em uma ANN, como ilustrado na Figura 13 e representado matematicamente nas Equações 1 e 2, cada neurônio recebe um conjunto de valores de entrada (x_m), normalmente denominados inputs, que são ponderados por coeficientes chamados de pesos sinápticos (w_{km}). Esses pesos definem a importância relativa de cada entrada para a saída do neurônio e são ajustados ao longo do processo de aprendizado [73].

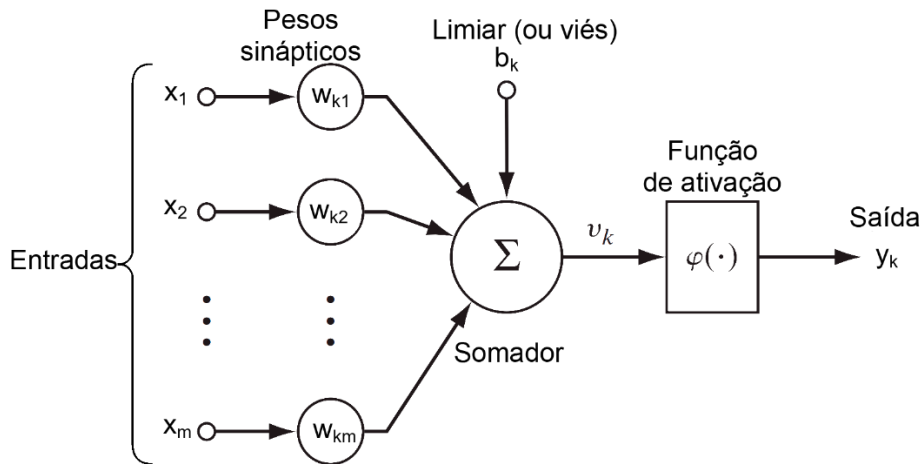


Figura 13. Esquema gráfico de um neurônio artificial.
Fonte: RIBEIRO, T. R.; OLIVEIRA, F. H. L., 2023 [81].

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} \cdot x_j \quad (1)$$

$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (2)$$

A soma ponderada das entradas (u_k) somadas ao fator de ajuste ou bias (b_k) é então processada por uma função de ativação (φ), responsável por introduzir não linearidades ao modelo. Essa função permite que a rede neural seja capaz de aprender e representar relações complexas entre variáveis, o que seria impossível em sistemas puramente lineares [72, 82]. Entre as funções de ativação mais utilizadas destacam-se a função sigmoide, a tangente hiperbólica e a função linear retificada (ReLU), cada uma delas adequada a diferentes tipos de problema e arquitetura de rede [83,84].

Após o processamento, o sinal resultante é transmitido às camadas subsequentes da rede, onde o mesmo processo é repetido até que se obtenha uma saída final. Durante a fase de treinamento, o modelo compara as saídas geradas com os valores esperados e ajusta os pesos sinápticos com base no erro calculado, em um processo iterativo denominado *backpropagation* (retropropagação do erro) [18,73]. Esse mecanismo permite que a rede aprenda progressivamente a associar corretamente padrões de entrada e saída, aprimorando sua capacidade de generalização e previsão.

As redes neurais artificiais, portanto, baseiam-se em princípios matemáticos e computacionais capazes de reproduzir, em certa medida, o comportamento adaptativo observado em sistemas biológicos. Essa analogia entre biologia e computação constitui a base conceitual do campo da inteligência artificial e sustenta o desenvolvimento de aplicações avançadas em diversas áreas da engenharia e das ciências dos materiais [85].

3.6.1. Estrutura e Arquiteturas de Redes Neurais Artificiais

As ANNs são compostas por unidades de processamento elementares denominadas neurônios artificiais, organizadas em camadas interconectadas por meio de pesos sinápticos que determinam a intensidade de cada conexão. Estruturalmente, uma ANN apresenta três tipos principais de camadas: a camada de entrada, a camada ou camadas ocultas e a camada de saída [86,87].

A camada de entrada é responsável por receber os dados e transmiti-los às camadas subsequentes, representando as variáveis independentes do problema. As camadas ocultas realizam o processamento interno da informação, aplicando funções de ativação que introduzem não linearidade ao modelo e permitem capturar relações complexas entre entradas e saídas [83,84]. Por sua vez, a camada de saída produz o resultado final, que pode corresponder a valores contínuos, em problemas de regressão, ou a classes discretas, em tarefas de classificação supervisionada [82].

A topologia de uma rede neural é definida pela forma como os neurônios estão conectados e pela direção do fluxo de informação entre as camadas. As arquiteturas *feedforward* (FNN – *feedforward neural network*), também chamadas de redes de propagação direta, caracterizam-se por conexões unidirecionais, em que os sinais fluem da camada de entrada para a de saída, sem retroalimentação [18]. Este tipo de arquitetura é amplamente utilizado na modelagem de propriedades mecânicas e térmicas de materiais poliméricos devido à sua estabilidade e à relativa simplicidade computacional [81].

Em contrapartida, as redes neurais recorrentes (RNN - *recurrent neural network*) incorporam conexões retroativas entre os neurônios, possibilitando a manutenção de uma memória temporal dos estados anteriores, o que as torna adequadas ao tratamento de dados sequenciais e séries temporais [88]. Dentre outras variações, incluem-se as redes convolucionais (CNN - *convolutional neural network*),

amplamente aplicadas ao reconhecimento de padrões e à análise de imagens de microestruturas de materiais, e as redes profundas (*Deep Neural Networks* – DNNs), caracterizadas por múltiplas camadas ocultas que conferem maior capacidade de abstração e aprendizado hierárquico [89].

A escolha da arquitetura, do número de camadas e da quantidade de neurônios em cada uma deve ser feita de forma criteriosa, de modo a equilibrar a capacidade de generalização e a complexidade computacional. Modelos subdimensionados tendem a apresentar desempenho insatisfatório na identificação de padrões complexos, enquanto redes excessivamente complexas podem sofrer de *overfitting* (sobreajuste), reproduzindo com precisão os dados de treinamento, mas com baixa capacidade preditiva em novos conjuntos de dados [90,91]. Estratégias de regularização, como *dropout*, normalização e validação cruzada, são amplamente empregadas para mitigar esse efeito e aprimorar o desempenho das ANNs [83].

3.6.2. Implementação de ANNs

As ANNs operam a partir da análise de conjuntos de dados, sobre os quais realizam um processo iterativo de ajuste e armazenamento dos pesos sinápticos atribuídos às conexões entre neurônios. Esse procedimento permite estabelecer relações de dependência entre as variáveis de entrada e saída do sistema modelado [16, 82].

A implementação de uma ANN envolve três etapas fundamentais: definição do tipo de rede, estruturação da topologia e fase de aprendizado. A definição do tipo de rede depende essencialmente da natureza do problema a ser modelado. As redes do tipo *feedforward* (FNN) são geralmente empregadas em tarefas supervisionadas que envolvem dados independentes e estacionários. As redes convolucionais (CNNs) apresentam desempenho superior em aplicações que requerem reconhecimento de padrões, como visão computacional e processamento de imagens. Por sua vez, as redes neurais recorrentes (RNNs) são mais adequadas para lidar com dados sequenciais, como séries temporais e linguagem natural [17, 83].

Na etapa de estruturação, define-se a topologia da rede, que compreende o número de neurônios na camada de entrada, correspondente ao número de variáveis independentes, o número de camadas ocultas e de neurônios por camada,

além da camada de saída e do tipo de conexões entre os neurônios. Cada conexão possui um peso associado que indica sua importância relativa no processo de propagação das informações. Nessa fase, também se escolhe a função de ativação de cada neurônio, cuja função é introduzir não linearidade no modelo. Entre as funções mais utilizadas encontram-se a *Rectified Linear Unit* (ReLU), a sigmoide e a tangente hiperbólica, dependendo da natureza da aplicação [82, 84].

A fase de aprendizado corresponde ao processo de treinamento da rede, conduzido com um conjunto de dados rotulado (supervisionado) por meio de algoritmos de otimização, como o gradiente descendente ou o método de Levenberg–Marquardt. Em cada iteração, os pesos das conexões são ajustados conforme o erro calculado entre a saída prevista e a saída desejada. O conhecimento adquirido pela rede ao longo do treinamento é representado pelos valores finais dos pesos sinápticos [18, 92]. Caso o desempenho obtido não seja satisfatório, podem ser adotadas estratégias de aprimoramento, como o aumento da profundidade da rede (inclusão de mais camadas ocultas), o aumento da largura (maior número de neurônios por camada) ou a aplicação de técnicas de regularização, como *dropout* ou regularização bayesiana, além da utilização de funções de treinamento alternativas, com o objetivo de melhorar a capacidade de generalização e reduzir o erro de predição [83, 93].

Nesse contexto, é importante salientar que a definição adequada da arquitetura da rede constitui uma etapa crítica do processo, uma vez que envolve a determinação do número ótimo de neurônios nas camadas ocultas e a seleção do conjunto mais representativo de variáveis de entrada. Como não existe um método universalmente aceito para essas escolhas, a modelagem tende a depender fortemente da experiência e do julgamento do pesquisador, o que pode comprometer a capacidade de generalização do modelo e introduzir viés humano na seleção das variáveis mais relevantes [15].

A implementação das ANNs é concluída ao registrar-se o valor dos pesos sinápticos, os fatores de ajuste (bias, limiar, ou ainda, viés), a arquitetura, as funções de ativação e outros parâmetros que foram estabelecidos nas fases de criação, estruturação e aprendizado, formando um “aprendizado” sobre o conjunto de dados experimentais analisado.

Dessa forma, é possível fornecer à ANN os valores de entrada, que são processados segundo esse conhecimento adquirido sobre os dados e que retornam uma saída.

A aplicação de ANNs na predição de propriedades mecânicas de compostos elastoméricos, a partir de dados provenientes de ensaios laboratoriais, apresenta diversas vantagens que justificam sua adoção em estudos dessa natureza. Entre elas, destacam-se a não linearidade introduzida pelas funções de ativação dos neurônios nas camadas ocultas, a capacidade de estabelecer relações complexas entre as variáveis de entrada e de saída sem a necessidade de definir previamente uma função analítica específica, bem como a elevada adaptabilidade do modelo às informações utilizadas no treinamento. Além disso, ressalta-se a relativa simplicidade de implementação computacional frente à complexidade estrutural que pode ser alcançada por meio da configuração das ANNs [94].

4. PROCESSO EXPERIMENTAL

4.1. Materiais

Neste estudo, a matriz polimérica empregada consistiu em borracha de polibutadieno (BR) SABIC® 4610, caracterizada por uma viscosidade Mooney de 46 UM, conforme norma ASTM D1646-19a [95], teor máximo de voláteis de 0,5% e teor máximo de cinzas de 0,25%, de acordo com a ASTM D5667-21 [96]. A carga utilizada foi o negro de carbono PX-300, obtido a partir da pirólise de pneus inservíveis de caminhões pela empresa Polimix Ambiental. O rCB PX-300 apresenta absorção de iodo entre 70 e 89 g/Kg, conforme a ASTM D1510-24b [48], absorção de óleo de 75 a 90 cm³/100 g, de acordo com a ASTM D2414-23a [50], e densidade variando de 300 a 350 kg/m³, conforme a ASTM D1513-05(2023) [97].

No que se refere aos ativadores, empregou-se óxido de zinco (ZnO) P.A., adquirido da LABSYNTH Produtos para Laboratório Ltda., com teor mínimo de 99%, e ácido esteárico (C₁₈H₃₆O₂) puro da mesma marca, caracterizado por ponto de fusão entre 55 e 61 °C e índice de acidez de 200 a 210. Como plastificante, utilizou-se polietilenoglicol (PEG) 4000 U.S.P., fornecido pela Oxiteno. O agente reticulador adotado foi enxofre duplamente ventilado, de pureza mínima de 99,5%, ponto de fusão entre 110 e 119,5 °C, teor máximo de cinzas de 0,2%, acidez máxima de 0,1% e umidade máxima de 1%, fornecido pela Êxodo Científica. Os aceleradores empregados foram MBTS e TMTD, ambos fornecidos pela Basile Química Ltda.

Após a realização dos ensaios reométricos e mecânicos, os dados obtidos foram utilizados no treinamento das redes neurais artificiais desenvolvidas e integradas por meio do software Matlab 2024b e seus complementos Deep Learning Toolbox (v.23.2) e Statistics and Machine Learning Toolbox (v.23.2). Essa integração possibilitou a predição precisa das propriedades dos compósitos de BR com rCB, assegurando consistência entre os resultados experimentais e os modelos computacionais aplicados.

4.2. Preparo dos compósitos

Os compósitos foram elaborados em um misturador aberto de cilindros da marca Veiga, modelo V-MA-320, com razão de fricção de 1,25:1, conforme estabelecido na norma ASTM D3182-21a [98]. A formulação detalhada encontra-se

apresentada na Tabela 2 em phr (*parts per hundred rubber* – partes por cem partes de borracha).

Inicialmente, o BR foi misturado durante cinco minutos para reduzir temporariamente sua elasticidade com a quebra parcial das cadeias poliméricas. Esse procedimento promoveu maior plasticidade e diminuição da viscosidade do composto, facilitando a incorporação subsequente dos ativadores, óxido de zinco e ácido esteárico, que reagem entre si formando o estearato de zinco, do plastificante PEG 4000 e da carga rCB, até a obtenção de uma mistura homogênea. Após essa etapa, o composto foi deixado em repouso para assegurar a completa formação do estearato de zinco, garantindo a uniformidade química da mistura.

Posteriormente, a mistura foi novamente processada no misturador para a adição do enxofre e dos aceleradores MBTS e TMTD, iniciando-se a fase de vulcanização acelerada. Para cada uma das seis formulações, foram preparados doze corpos de prova, totalizando 72 amostras, que foram posteriormente submetidas aos ensaios reométricos.

Tabela 2. Formulação dos compósitos de BR-rCB.

Componente	0 phr*	10 phr*	20 phr*	30 phr*	40 phr*	50 phr*
BR	100	100	100	100	100	100
Óxido de zinco	4	4	4	4	4	4
Ácido esteárico	2	2	2	2	2	2
rCB	0	10	20	30	40	50
PEG 4000 ^a	2	2	2	2	2	2
Enxofre	1,8	1,8	1,8	1,8	1,8	1,8
MBTS ^b	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
TMTD ^c	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6

^a polietilenoglicol; ^b dissulfureto de dibenzotiazol; ^c dissulfureto de tetrametiltiuram.

* As formulações foram nomeadas de acordo com seu teor de carga (em phr).

Fonte: Autoria própria, 2025.

4.3. Confeção dos Corpos de Prova

Com a determinação do tempo de cura ótimo t_{90} de cada formulação, foi possível confeccionar os corpos de prova destinados aos ensaios de dureza, densidade e resistência à abrasão, bem como as placas de borracha vulcanizada, conforme a norma ASTM D3182-21a [98], que foram posteriormente utilizadas na fabricação de corpos de prova para ensaios de tração e de rasgo. Os corpos de prova para o ensaio de tração foram preparados em formato de haltere, de acordo com a

norma ASTM D412-16 (2020) [99], enquanto os destinados ao ensaio de rasgo seguiram o formato da matriz tipo C, conforme a norma ASTM D624-00 (2020) [100].

As placas de borracha, empregadas na confecção dos corpos de prova de tração e de rasgo, foram vulcanizadas em prensa hidráulica da Mastermac, modelo Vulcan 400/20-1, utilizando moldes de aço 1010/1020, sob temperatura controlada de 160 °C e pressão de 3 MPa, respeitando o tempo t_{90} de cada formulação. Após a vulcanização, foram obtidas chapas com dimensões de 150 x 150 x 2 mm, a partir das quais os corpos de prova foram cortados por cisalhamento, utilizando moldes em aço em prensa hidráulica manual, assegurando precisão dimensional e uniformidade na preparação das amostras.

4.4. Métodos de Caracterização

4.4.1. Propriedades Reométricas

Os parâmetros de vulcanização das formulações foram determinados a partir de curvas obtidas em reômetro de disco oscilatório (ODR), operando com arco de 1° e temperatura de 160 °C, de acordo com a norma ASTM D2084-19a [101], utilizando um reômetro TEAM Solutions, modelo Teametro. Durante o ensaio, uma oscilação axial foi aplicada às amostras, enquanto o módulo de torque era registrado ao longo do tempo. Esse procedimento permitiu a determinação de parâmetros essenciais, tais como o torque mínimo (M_L), o torque máximo (M_H), o tempo de pré-cura (t_{s1}) e o tempo ótimo de vulcanização (t_{90}), fornecendo informações críticas sobre a cinética de cura dos compósitos.

4.4.2. Grau de Dispersão da Carga na Matriz Polimérica

O grau de dispersão da carga, representado pelo índice L, consiste em um indicador que evidencia a uniformidade da distribuição das partículas de rCB na matriz polimérica. A obtenção de uma dispersão eficiente é determinante para o desempenho ideal dos compósitos de borracha, pois influencia diretamente as propriedades mecânicas e reométricas. No contexto dos ensaios de reometria, uma dispersão mais uniforme tende a resultar em valores mais elevados de torque e em alterações significativas em outros parâmetros reométricos, uma vez que as partículas de rCB interagem de forma mais efetiva com a matriz, resistindo à deformação.

O grau de dispersão pode ser avaliado de maneira qualitativa e indireta por meio da relação entre M_H e M_L , conforme apresentado na Equação (3) [102]:

$$L = \eta_r - m_r = \frac{M_{Lc}}{M_{Lg}} - \frac{M_{Hc}}{M_{Hg}} \quad (3)$$

Onde:

L = grau de dispersão da carga na matriz polimérica

η_r = torque mínimo com rCB / torque mínimo sem rCB

m_r = torque máximo com rCB / torque máximo sem rCB

M_{Lc} = torque mínimo da formulação com rCB

M_{Lg} = torque mínimo da formulação sem rCB

M_{Hc} = torque máximo da formulação com rCB

M_{Hg} = torque máximo da formulação sem rCB

Esse indicador permite correlacionar o comportamento reométrico observado com a qualidade da dispersão do negro de carbono recuperado na matriz de polibutadieno, fornecendo uma base sólida para análise e interpretação dos resultados obtidos nos compósitos estudados.

4.4.3. Ensaio de determinação da densidade relativa

A densidade das composições foi determinada por meio do método hidrostático, em conformidade com a norma ASTM D297-21 [103]. Esse procedimento baseia-se na medição da massa da amostra em duas condições distintas: no ar e totalmente imersa em um líquido de densidade previamente conhecida. Para este estudo, utilizou-se etanol como meio líquido, cuja densidade foi considerada na temperatura de análise. A partir das massas obtidas, a densidade da amostra foi calculada conforme a Equação (4).

$$\rho = \frac{\rho_L * m_A}{m_A - m_B} \quad (4)$$

Onde:

ρ = densidade da amostra (g/cm³)

ρ_L = densidade do etanol na temperatura de análise (g/cm³)

m_A = massa da amostra sem fio no ar (g)

m_B = massa da amostra sem fio no líquido (g)

Esse método, amplamente utilizado na caracterização de elastômeros, possibilita avaliar variações estruturais decorrentes do teor de carga e da densidade de ligações cruzadas, refletindo indiretamente o grau de compactação da matriz polimérica.

4.4.4. Ensaio de Determinação da Densidade de Ligações Cruzadas por Inchamento em Solvente Orgânico

A densidade de ligações cruzadas dos compósitos foi obtida por meio da técnica de inchamento em solvente orgânico, procedimento consagrado para a avaliação indireta da rede reticulada em elastômeros. Inicialmente, foram preparadas amostras de massa aproximada de $0,25 \pm 0,01$ g, as quais permaneceram imersas em tolueno durante cinco dias, a fim de permitir o equilíbrio de inchamento. Em seguida, as amostras foram retiradas, cuidadosamente secas para a remoção do excesso de solvente e pesadas. Posteriormente, foram colocadas em estufa a 85°C por 24 h para completa eliminação do solvente residual, sendo então novamente pesadas.

Com base nas massas obtidas antes e após o inchamento, bem como após a secagem, determinou-se a fração volumétrica de borracha inchada (V_B). A partir desse valor, calculou-se a densidade de ligações cruzadas (ν), utilizando-se a Equação (5), proposta por Flory e Rehner [104], a qual considera o parâmetro de interação polímero-solvente de Flory-Huggins χ [105] e as densidades do polímero e do solvente empregados.

$$\nu = \frac{-(\ln(1 - V_B) + V_B + \chi \cdot (V_B)^2)}{\rho_B \cdot V_0 \cdot \left(V_B^{\frac{1}{3}} - \frac{V_B}{2} \right)} \quad (5)$$

Onde:

V_B = fração volumétrica de borracha inchada

m_0 = massa inicial

m_i = massa inchada

m_s = massa seca

ρ_B = densidade da borracha

ρ_0 = densidade do solvente

Essa técnica permite avaliar a influência do teor de carga e da formulação sobre o grau de reticulação da matriz polimérica, fornecendo informações essenciais para a correlação entre estrutura e propriedades mecânicas.

4.4.5. Ensaio de Dureza Shore A

A dureza dos compósitos foi determinada segundo a norma ASTM D2240-15 [106]. O método consiste em aplicar um penetrador (identador) sobre a superfície do corpo de prova e registrar a resistência do material à penetração. O valor obtido na escala Shore A está inversamente relacionado à profundidade atingida pelo identador, sendo, portanto, indicativo da rigidez do material. Valores mais elevados de dureza correspondem a uma maior resistência à deformação elástica, o que reflete o aumento do módulo elástico e, conseqüentemente, uma estrutura mais rígida. Essa propriedade é particularmente relevante para compósitos elastoméricos, pois fornece um parâmetro rápido e reprodutível da sua consistência estrutural. [107].

4.4.6. Ensaio de Resistência à Abrasão

Os ensaios de resistência à abrasão foram realizados conforme a norma ASTM D5963-22 [108], utilizando um abrasímetro da marca Maqtest, configurado com rolo de rotação constante a uma frequência de 40 ciclos por minuto. O cilindro abrasivo possuía diâmetro de 150 mm e curso de abrasão de 40 m, com deslocamento lateral de 4,2 mm por volta e aplicação de carga de 5,0 N sobre o corpo de prova. O suporte do corpo de prova foi inclinado a 3° em relação à vertical do eixo central.

Durante o ensaio, o corpo de prova, fixado em uma pinça de diâmetro variável, foi submetido simultaneamente à rotação, translação e compressão contra a superfície abrasiva. Ao término do ciclo, o corpo de prova foi novamente pesado, e a perda por abrasão (AL) foi calculada conforme a Equação (6).

$$AL = \frac{(m_0 - m_1) \cdot S_0}{(\rho \cdot S)} \quad (6)$$

Onde:

AL = perda por abrasão (mm³/40 m)

m_0 = massa antes da abrasão (mg)

m_1 = massa depois da abrasão (mg)

S_0 = índice de ataque teórico da lixa na borracha padrão (200 ± 20 mg)

S = índice de ataque real da lixa na borracha (mg)

ρ = densidade do compósito (mg/mm^3)

A análise da perda volumétrica permite avaliar a resistência superficial dos compósitos e sua adequação a aplicações que envolvem atrito e desgaste.

4.4.7. Ensaio de Resistência à Tração e ao Rasgo

As propriedades de resistência à tração e ao rasgo foram determinadas de acordo com as normas ASTM D412-16 [99] e ASTM D624-00 [100], respectivamente. Os corpos de prova para o ensaio de tração foram confeccionados no formato tipo A (haltere), enquanto aqueles destinados ao ensaio de rasgo apresentavam geometria tipo C (ângulo reto). Para cada formulação, foram produzidas doze amostras, tanto para o ensaio de tração quanto para o de rasgo, totalizando um conjunto experimental estatisticamente representativo.

Os ensaios foram conduzidos em uma máquina universal de ensaios da marca Biopdi, equipada com célula de carga de 5 kN, transdutor de deformação interno e velocidade de deslocamento de 500 mm/min. Esse procedimento permitiu a obtenção precisa dos parâmetros de tensão na ruptura, alongamento e energia de rasgo, fundamentais para a compreensão do comportamento mecânico dos compósitos vulcanizados.

4.5. Redes Neurais Artificiais

A arquitetura das ANNs do trabalho foi desenvolvida por meio de um processo empírico e iterativo, no qual foram definidos o número de neurônios nas camadas de entrada, ocultas e de saída, bem como o número de camadas ocultas e o algoritmo de treinamento empregado. As configurações específicas de cada rede estão apresentadas na Tabela 3. Após a definição da estrutura, o processo de treinamento foi conduzido utilizando o conjunto de dados experimentais obtidos em laboratório, permitindo o ajuste progressivo dos pesos sinápticos das conexões entre os neurônios. Dessa forma, cada ANN foi capaz de modelar as relações subjacentes

entre os parâmetros de formulação e as propriedades do compósito, possibilitando a predição confiável do comportamento do material em estudo.

Tabela 3. Arquitetura das ANNs criadas e treinadas para cada propriedade.

ANN	Camada de entrada	1 ^a . camada oculta	2 ^a . camada oculta	3 ^a . camada oculta	Camada de saída
t_{90}	9	10	-	-	1
Dureza	9	10	-	-	1
Densidade	9	10	-	-	1
Perda por abrasão	9	3	-	-	1
DLC ^a	9	10	-	-	1
Deformação na ruptura	9	10	-	-	1
Tensão na ruptura	9	10	-	-	1
Deslocamento no rasgo	9	10	5	-	1
Força no rasgo	9	10	8	5	1

^a Densidade de ligações cruzadas.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Para melhor ilustrar a configuração das redes neurais artificiais desenvolvidas, a Figura 14 apresenta a representação esquemática da rede empregada na predição da força de rasgo, proveniente do ensaio de resistência ao rasgo. Essa rede foi a que apresentou a estrutura mais complexa dentre as nove ANNs construídas, sendo composta por três camadas ocultas com 10, 8 e 5 neurônios, respectivamente.

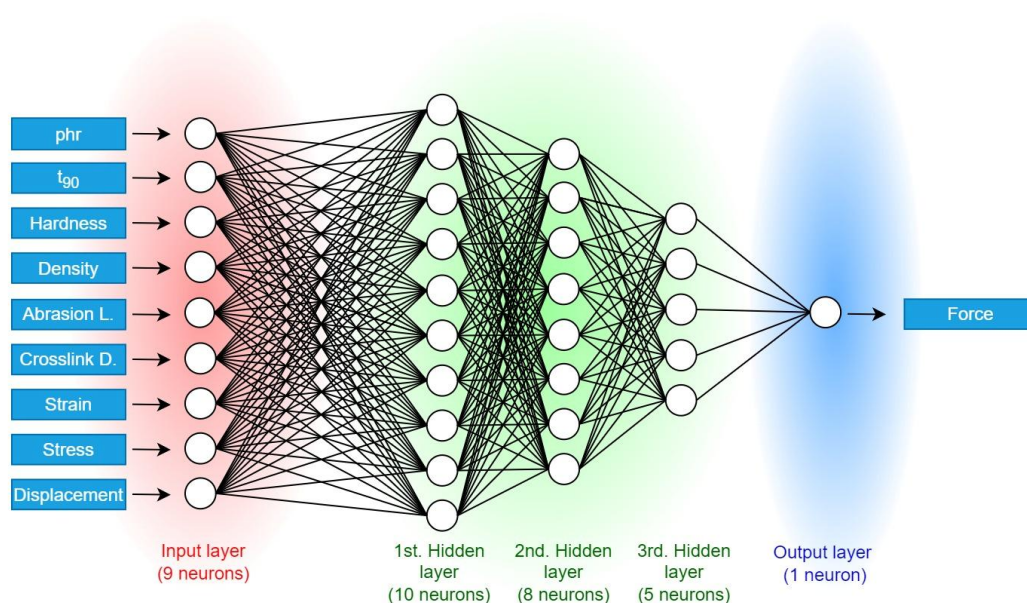


Figura 14. Estrutura da ANN de predição da Força no Rasgo, do ensaio de resistência ao rasgo.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Para realizar o processo de treinamento das ANNs com o conjunto de dados obtido nos ensaios de determinação das propriedades mecânicas dos compósitos de BR e rCB, foi empregada a função de treinamento Levenberg–Marquardt associada à regularização bayesiana. Essa abordagem combina a eficiência do método Levenberg–Marquardt, amplamente reconhecido pela rápida convergência em problemas de regressão não linear, com o rigor estatístico da regularização bayesiana, que ajusta automaticamente os parâmetros de regularização com base em princípios de inferência bayesiana [109]. Dessa forma, alcança-se um melhor equilíbrio entre o erro de treinamento e a capacidade de generalização da rede, minimizando o risco de *overfitting* e otimizando o desempenho preditivo do modelo.

As ANNs com regularização bayesiana adotam uma perspectiva probabilística no tratamento dos pesos sinápticos e das incertezas associadas às previsões, aproximando-se conceitualmente das redes bayesianas clássicas. Nessa abordagem, os pesos e parâmetros da rede são tratados como variáveis aleatórias, permitindo a modelagem explícita da incerteza e a execução de inferências probabilísticas. Essa característica as torna particularmente adequadas para conjuntos de dados reduzidos ou experimentais, como os obtidos em laboratório, nos quais a presença de ruído ou dispersão de resultados pode comprometer o desempenho das redes neurais convencionais. Ao combinar o potencial das ANNs com a robustez estatística da inferência bayesiana, essa técnica reduz a probabilidade de falhas de convergência e o risco de *overfitting*, proporcionando resultados mais estáveis e consistentes mesmo em condições experimentais complexas [83].

A partir do software Matlab R2024b, utilizando os complementos Deep Learning Toolbox (v.23.2) e Statistics and Machine Learning Toolbox (v.23.2), foram desenvolvidas e treinadas ANNs destinadas à predição de cada propriedade mecânica dos compósitos elastoméricos para diferentes teores de rCB. Optou-se pela utilização do Matlab R2024b em razão de sua interface gráfica intuitiva e da disponibilidade de ferramentas automatizadas para geração de gráficos de erro, regressão, desempenho, validação cruzada e gradientes. Além disso, o software oferece suporte à função de treinamento Levenberg–Marquardt com regularização bayesiana, fator determinante diante do tamanho limitado do conjunto de dados provenientes dos ensaios reométricos e mecânicos.

O conjunto de dados referente aos ensaios de propriedades mecânicas dos compósitos de BR contendo rCB foi constituído por 72 amostras, cada uma delas apresentando dez propriedades distintas, descritas a seguir:

- teor de rCB em phr;
- tempo ótimo de vulcanização (t_{90}) em segundos;
- dureza na escala Shore A;
- densidade em g/cm^3 ;
- perda por abrasão em $\text{mm}^3/40\text{m}$;
- densidade de ligações cruzadas em mol/cm^3 ;
- deformação na ruptura em % (ensaio de resistência à tração);
- tensão na ruptura em Mpa (ensaio de resistência à tração);
- deslocamento no rasgo em mm (ensaio de resistência ao rasgo);
- força no rasgo em N (ensaio de resistência ao rasgo).

Embora o conjunto de 72 amostras tenha se mostrado adequado para a modelagem preditiva, um aumento no número de formulações testadas ou na quantidade de replicatas por formulação poderia, em princípio, ampliar a robustez e a capacidade de generalização dos modelos gerados. Com o intuito de minimizar riscos de *overfitting* (sobreajuste) e de assegurar a generalização, empregou-se o algoritmo Levenberg-Marquardt com regularização bayesiana (`trainbr()` no Matlab) durante o treinamento das redes. Esse algoritmo altera a função de custo original ao incorporar um termo de penalização sobre os pesos sinápticos, o que permite controlar a complexidade do modelo e promover melhor capacidade de generalização, mesmo diante de bases de dados de dimensão relativamente reduzida.

No contexto deste trabalho, o processo de treinamento inicia-se com a definição da estrutura da ANN, etapa em que são especificados os parâmetros de entrada (propriedades utilizadas como variáveis independentes), a propriedade a ser predita (variável dependente), o algoritmo de treinamento, o número de camadas ocultas e a quantidade de neurônios em cada camada. Após a definição estrutural, o treinamento prossegue com a análise do conjunto experimental de dados, durante a qual a rede estima o valor da propriedade de interesse a partir das demais variáveis, compara o resultado obtido com o valor experimental correspondente e calcula a diferença entre ambos, representada pelo erro.

Esse procedimento é repetido para todas as amostras do conjunto de dados, caracterizando um ciclo denominado época. Ao término de cada época, o algoritmo calcula o erro quadrático médio (MSE) e o erro relativo absoluto médio (MARE), os quais atuam como métricas estatísticas de avaliação da convergência do modelo neural. Assim, o processo de treinamento monitora o valor do MSE ao longo das épocas e, caso o índice permaneça elevado, indicando a ausência de convergência, o modelo é ajustado e uma nova época é iniciada.

O número máximo de épocas é definido no complemento Deep Learning Toolbox do Matlab, cujo valor padrão é de 1000 épocas. Todavia, o próprio algoritmo acompanha a evolução do erro durante o treinamento e interrompe o processo automaticamente quando é alcançado o menor valor de erro possível, indicando a convergência da ANN. Esse comportamento é ilustrado na Figura 15, que representa o ponto em que a rede neural atinge o melhor desempenho de predição para o conjunto de dados analisado [92].

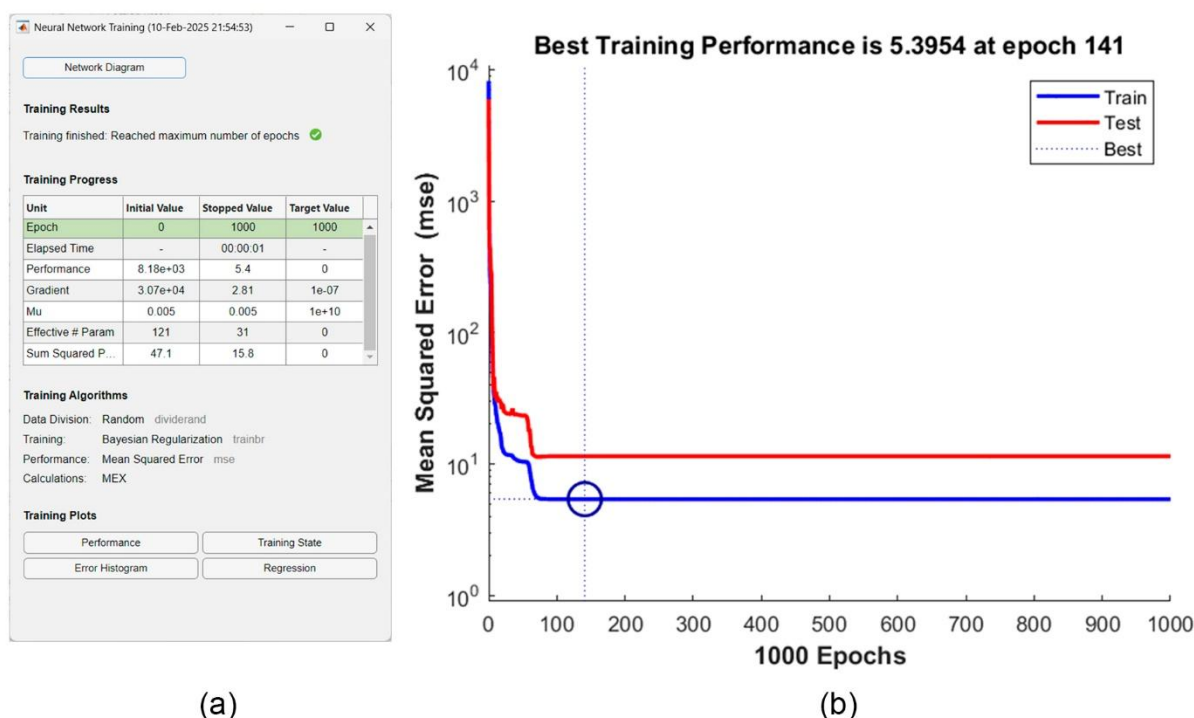


Figura 15. Parâmetros (a) e performance (b) de treinamento de uma ANN no Matlab 2024b.
Fonte: MathWorks, 2025.

As métricas mais comumente utilizadas para avaliar o desempenho do treinamento de redes neurais são o erro quadrático médio (MSE), o erro relativo absoluto médio ($MARE$) e o coeficiente de determinação (R^2). Tais parâmetros são calculados a partir da diferença entre os valores previstos pelas redes e os valores

reais obtidos experimentalmente [110], conforme expresso nas Equações (7), (8) e (9):

$$MSE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (7)$$

$$MARE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (8)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (9)$$

Onde:

MSE = erro quadrático médio

$MARE$ = erro relativo absoluto médio

R^2 = coeficiente de determinação

n = número de amostras

y_i = valor real

$\hat{y}_i$ = valor previsto

$\bar{y}$ = média dos valores reais

O MSE quantifica o erro médio entre os valores ajustados e os valores reais, sendo obtido pelo quadrado das diferenças entre ambos. Assim, quanto menor o valor do MSE, melhor é o desempenho da rede neural na predição das propriedades analisadas. O MARE, por sua vez, expressa o erro absoluto relativo médio em relação ao valor experimental, geralmente apresentado em termos percentuais. Tal como o MSE, por se tratar de uma métrica de erro, valores próximos de zero indicam melhor desempenho do modelo. Já o coeficiente de determinação (R^2) avalia a fração da variabilidade dos dados experimentais que é explicada pelo modelo ajustado, podendo variar entre $-\infty$ e 1, sendo que o valor unitário representa o ajuste ideal e denota que a rede neural reproduz com precisão o comportamento observado experimentalmente.

A relevância dessas métricas estatísticas é amplamente reconhecida na literatura especializada, sendo frequentemente empregadas em estudos que envolvem a aplicação de técnicas de inteligência artificial. Por exemplo, Padmavathi [111], utilizou o R^2 e o MSE para avaliar o desempenho de redes neurais artificiais estruturadas para prever a viscosidade Mooney e a viscosidade do fluido a partir de variáveis do processo de fabricação de borracha de polibutadieno (BR).

Abdollahzadeh [112], ao desenvolver ANNs destinadas à predição da erosão do solo na bacia de Jajuko Rachidani, em Tanakami, Japão, aplicou o MARE, o MSE e o R^2 como métricas de avaliação de desempenho, comparando as predições obtidas por suas redes com aquelas geradas por modelos de regressão linear múltipla (MLR).

De forma semelhante, Almaliki [113], empregou o MSE e o R^2 para analisar o desempenho de ANNs baseadas no algoritmo Levenberg-Marquardt, desenvolvidas para prever o desempenho de tratores agrícolas em termos de potência na barra de tração, consumo de combustível, resistência ao rolamento e eficiência de tração. Já Rezazadeh e Naderpour [114], utilizaram o R^2 e o MSE para monitorar o desempenho de redes neurais desenvolvidas para prever a resistência ao cisalhamento e a deformação vertical de compósitos de concreto contendo partículas de borracha. Onoji [115], comparou o desempenho entre a metodologia de superfície de resposta (RSM) e redes neurais artificiais na predição da produção de óleo de sementes de borracha subutilizadas, empregando o MARE e o desvio médio absoluto (AAD), tendo verificado melhor desempenho preditivo nas redes neurais. Por fim, Abdelkareem [116] também adotou o MSE e o R^2 como critérios de desempenho no treinamento de ANNs destinadas à avaliação de tecnologias de produção de hidrogênio, buscando maximizar a produtividade e reduzir o custo do processo.

As redes neurais desenvolvidas neste trabalho foram implementadas por meio de rotinas computacionais específicas e submetidas a um rigoroso processo de treinamento. Durante essa etapa, o desempenho do modelo foi continuamente monitorado pelo software, que gerou indicadores estatísticos de erro, tais como o histograma de erros, ilustrado na Figura 16. O treinamento foi conduzido utilizando a função Levenberg-Marquardt com regularização bayesiana, uma vez que essa abordagem se mostra particularmente adequada para conjuntos de dados de menor dimensão, permitindo evitar o *overfitting* e assegurar maior capacidade de generalização das redes.

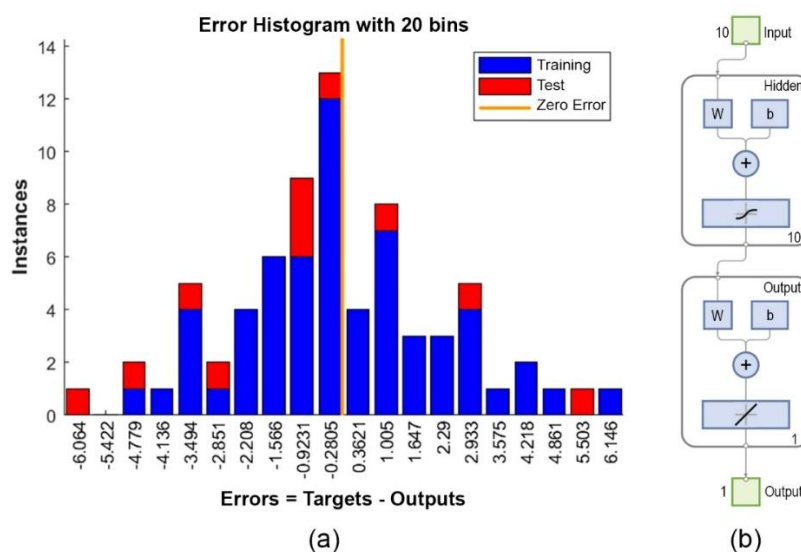


Figura 16. Histograma de erros da rede neural artificial para predição da perda por abrasão (a) e estrutura dessa rede neural artificial com 1 camada oculta com 10 neurônios e 1 camada de saída (b).
Fonte: MathWorks, 2025.

Após a obtenção de um aprendizado satisfatório, caracterizado por valores de erro considerados aceitáveis segundo as métricas MSE e MARE, a ANN foi armazenada, possibilitando sua utilização para a predição de uma propriedade específica do compósito avaliado. Ressalta-se que esse procedimento foi repetido para cada uma das nove propriedades estudadas, resultando em um conjunto de nove ANNs treinadas de forma independente, sendo que cada uma delas foi concebida para modelar computacionalmente uma propriedade distinta do compósito de BR com rCB.

Cada ANN treinada para uma propriedade específica requer, como dados de entrada, um conjunto de $(n - 1)$ variáveis, em que n representa o número total de propriedades contidas no conjunto de dados. Nesse contexto, a rede utiliza a quantidade de rCB (em phr) e os valores estimados das demais oito propriedades como variáveis de entrada, a fim de prever o valor da propriedade para a qual foi treinada. Dessa forma, a ANN é capaz de calcular o erro entre o valor previsto e o valor real obtido experimentalmente, ajustando seus pesos sinápticos para aprimorar a precisão do modelo.

Após o processo de treinamento e validação, as ANNs foram integradas a um aplicativo computacional desenvolvido neste estudo, destinado à predição das nove propriedades mecânicas dos compósitos de borracha com rCB, com base em um teor de rCB fornecido pelo usuário. Convém salientar que os ensaios experimentais foram realizados para seis formulações, com teores de rCB variando de 0 a 50 phr, em incrementos de 10 phr. Como cada ANN depende dos valores das

demais propriedades para prever aquela que foi treinada para modelar, o aplicativo desenvolvido fornece às redes valores médios ponderados, calculados a partir do teor de rCB informado e do conjunto de dados experimentais, de modo a gerar uma estimativa inicial consistente.

O cálculo das médias ponderadas é realizado com base nos valores de *phr* imediatamente inferiores e superiores ao teor especificado pelo usuário. Para cada nível de *phr* avaliado experimentalmente, foram testadas doze amostras, permitindo a obtenção de médias representativas. Considerando-se a variabilidade inerente aos dados experimentais e a possível ocorrência de valores discrepantes, o algoritmo incorpora um mecanismo de filtragem que descarta os resultados extremos (máximos e mínimos) de cada nível de *phr*. Essa operação é executada por meio da função interna *trimean*() do Matlab, que aprimora a robustez estatística dos dados de entrada utilizados pelas redes neurais.

Dessa maneira, cada estimativa inicial é obtida de forma automatizada por meio da Equação (10), a qual define a média ponderada entre as médias internas (média int.) dos valores experimentais correspondentes aos níveis de *phr* mais próximos (múltiplos de 10 *phr*) imediatamente abaixo e acima do valor de interesse:

$$E = M_{inf} + \left(M_{sup} - M_{inf} \cdot \left(\frac{phr_{pred} - phr_{inf}}{phr_{sup} - phr_{inf}} \right) \right) \quad (10)$$

Onde:

- E = estimativa de uma propriedade mecânica
- M_{inf} = média int. da propriedade do *phr* imediatamente inferior na matriz de dados
- M_{sup} = média int. da propriedade do *phr* imediatamente superior na matriz de dados
- phr_{pred} = *phr* para o qual está sendo feita a predição
- phr_{inf} = *phr* imediatamente inferior ao phr_{pred} na matriz de dados
- phr_{sup} = *phr* imediatamente superior ao phr_{pred} na matriz de dados

Dessa forma, as ANNs treinadas foram integradas em uma aplicação computacional que, a partir da inserção do teor desejado de rCB (em *phr*), realiza o cálculo e apresenta a predição correspondente de cada propriedade. O programa executa automaticamente o processo de estimativa, acionando a rede neural específica associada a cada propriedade do compósito, de modo a fornecer resultados consistentes e coerentes com o comportamento observado experimentalmente.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1. Propriedades Reométricas

A Figura 17 apresenta as curvas reométricas obtidas para os compósitos de BR com diferentes teores de rCB. Conforme ilustrado na Tabela 4, observa-se que tanto o tempo de pré-cura (t_{s1}) quanto o tempo ótimo de vulcanização (t_{90}) diminuem à medida que a quantidade de carga aumenta. Esse comportamento indica uma aceleração do processo de vulcanização promovida pela presença crescente de rCB.

Simultaneamente, o torque mínimo (M_L) apresenta um aumento gradual com o incremento da carga, refletindo o aumento da viscosidade do composto. Esse parâmetro está diretamente relacionado à processabilidade do material e à mobilidade das cadeias poliméricas na fase não vulcanizada. Já o torque máximo (M_H) também aumenta com o teor de rCB, evidenciando uma interação mais efetiva entre a carga e a matriz elastomérica, bem como uma maior formação de ligações cruzadas durante o processo de cura.

A diferença entre os torques máximo e mínimo ($\Delta M = M_H - M_L$) quantifica o grau de reforço promovido pela carga nas propriedades mecânicas do elastômero [117]. Esse parâmetro é amplamente empregado como um indicador indireto da densidade de ligações cruzadas (DLC) [118], permitindo inferir sobre a eficiência do processo de vulcanização e a qualidade da interação carga-matriz.

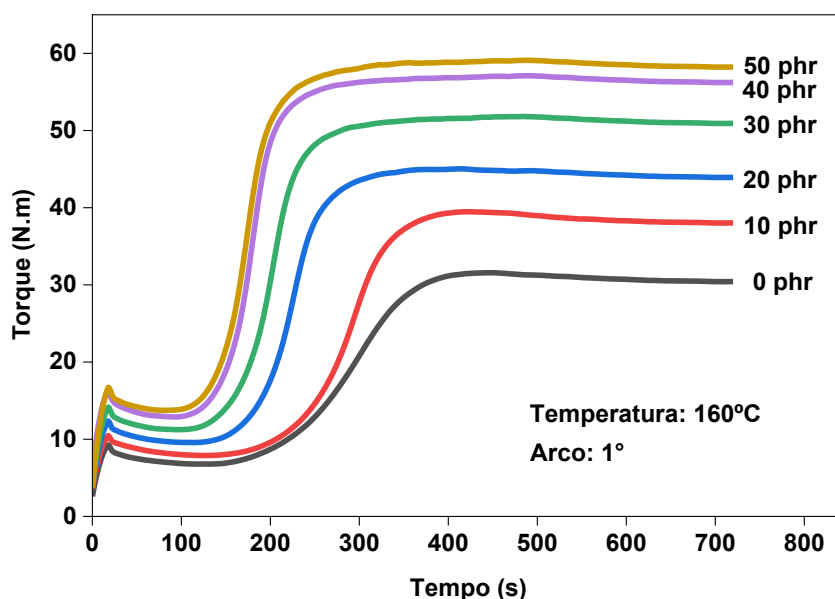


Figura 17. Curvas reométricas dos compósitos de BR-rCB de 0 a 50 phr.
Fonte: Team Solutions, 2024.

Tabela 4. Ensaio reométrico: médias e desvios-padrão de torque mínimo (M_L), torque máximo (M_H), variação de torque (ΔM), tempo de pré-cura (t_{s1}) e tempo ótimo de cura (t_{90}) de compósitos de BR-rCB.

Formulação (phr)	M_L (dN·m)	M_H (dN·m)	ΔM (dN·m)	t_{s1} (min)	t_{90} (min)
0	0.665 ± 0.005	3.129 ± 0.031	2.464 ± 0.030	1.927 ± 0.126	6.166 ± 0.058
10	0.815 ± 0.014	3.965 ± 0.419	3.150 ± 0.034	1.918 ± 0.169	5.373 ± 0.120
20	0.941 ± 0.009	4.533 ± 0.377	3.592 ± 0.037	1.652 ± 0.130	4.554 ± 0.026
30	1.13 ± 0.010	5.180 ± 0.536	4.050 ± 0.048	1.424 ± 0.132	3.906 ± 0.076
40	1.278 ± 0.008	5.633 ± 0.305	4.355 ± 0.029	1.353 ± 0.103	3.580 ± 0.030
50	1.363 ± 0.012	5.870 ± 0.582	4.507 ± 0.054	1.244 ± 0.101	3.614 ± 0.063

Fonte: Team Solutions, 2024.

5.1.1. Grau de Dispersão do rCB na Matriz Polimérica

O grau de dispersão (L) na matriz polimérica é um índice relativo à borracha pura, sem carga, e representa inversamente a dispersão da carga na matriz polimérica, sendo que, quanto menor o valor de L , melhor é a dispersão da carga.

Como pode ser observado na Figura 18, o valor de L aumenta com a adição da carga. Ainda que esses valores apresentem um ligeiro acréscimo em relação à borracha pura, eles permanecem próximos de zero, o que indica uma boa dispersão do rCB na matriz e, conseqüentemente, favorece a processabilidade do composto [119].

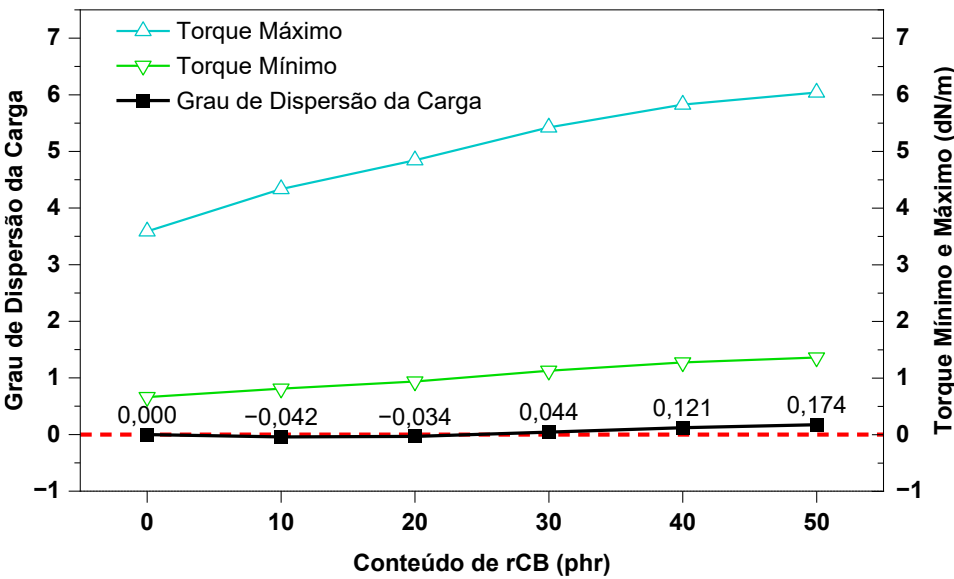


Figura 18. Grau de dispersão da carga na matriz polimérica.
Fonte: Autoria própria, 2025.

O índice L é um índice relativo, que, se for próximo de 0, indica que a proporção de aumento do torque mínimo da borracha com carga para a borracha sem carga é muito próxima da proporção de aumento do torque máximo da borracha com carga para a borracha sem carga, o que indica boa dispersão da carga na matriz polimérica.

O índice L é um parâmetro relativo que avalia a dispersão da carga na matriz polimérica. Quando seu valor se aproxima de zero, isso indica que a razão entre o torque mínimo da borracha com carga e o torque mínimo da borracha sem carga é muito próxima da razão entre o torque máximo da borracha com carga e o torque máximo da borracha sem carga. Essa condição evidencia uma boa dispersão da carga na matriz, uma vez que as variações de torque associadas à presença do reforço são equilibradas ao longo do processo de mistura.

5.1.2. Torque Máximo e Torque Mínimo

A análise dos resultados reométricos apresentados na Tabela 4 evidencia que tanto o torque mínimo (M_L) quanto o torque máximo (M_H) aumentam progressivamente com o incremento do teor de rCB na formulação.

O aumento de M_L , que passou de 0,665 dN·m na amostra sem carga para 1,363 dN·m na amostra com 50 phr de rCB, indica uma elevação gradual da viscosidade do composto não vulcanizado. Esse comportamento está associado à restrição de mobilidade das cadeias poliméricas devido à presença de partículas de carga, que atuam como pontos de impedimento físico ao fluxo da matriz. Consequentemente, compósitos com maior teor de rCB tendem a apresentar processabilidade reduzida, reflexo direto do aumento da resistência ao cisalhamento durante o processamento.

De forma análoga, o M_H apresentou incremento contínuo de 3,129 dN·m para 5,870 dN·m ao longo do aumento do teor de rCB, o que reflete a intensificação das interações carga-matriz e a maior formação de ligações cruzadas durante a vulcanização. O acréscimo de M_H sugere que o rCB atua como agente de reforço efetivo, contribuindo para o desenvolvimento de uma rede tridimensional mais densa e coesa, típica de sistemas elastoméricos reforçados.

Esse comportamento simultâneo de aumento de M_L e M_H é característico de compósitos elastoméricos com boa dispersão e interação interfacial entre o reforço

e a matriz polimérica. Além disso, a diferença entre M_H e M_L expressa pela variação de torque ΔM , reflete o potencial de reforço conferido pela carga, sendo este parâmetro discutido de forma mais detalhada na subseção seguinte.

5.1.3. Variação de Torque (ΔM)

A variação de torque ($\Delta M = M_H - M_L$) constitui um parâmetro de grande relevância na análise reométrica de compósitos elastoméricos, pois está diretamente associada à eficiência de vulcanização e ao grau de reforço conferido pela carga à matriz polimérica. Conforme os dados apresentados na Tabela 4, observa-se que os valores de ΔM aumentam progressivamente de 2,464 dN·m para 4,507 dN·m com o acréscimo de rCB de 0 a 50 phr.

Esse comportamento evidencia que o aumento do teor de rCB favorece a formação de uma rede tridimensional mais densa e resistente, resultado de um número maior de ligações cruzadas estabelecidas durante o processo de vulcanização. A elevação de ΔM indica, portanto, que o rCB atua de forma eficaz como agente de reforço, contribuindo para o desenvolvimento de propriedades mecânicas superiores nos compósitos.

Além disso, a tendência de crescimento contínuo de ΔM sugere que as partículas de rCB encontram-se bem dispersas na matriz de polibutadieno, favorecendo a transferência de tensões e a homogeneidade estrutural do sistema. Essa boa dispersão, em conjunto com a compatibilidade entre carga e matriz, é essencial para a maximização das propriedades de reforço e está em consonância com os resultados observados na análise do grau de dispersão (subseção 5.1.1).

De modo geral, a análise da variação de torque reforça o papel do rCB como um substituinte promissor do negro de carbono virgem, demonstrando potencial de reaproveitamento sustentável sem prejuízo significativo ao desempenho reométrico e ao comportamento de vulcanização do composto elastomérico.

5.1.4. Tempo de Pré-Cura (t_{s1}) e Tempo Ótimo de Vulcanização (t_{90})

Os parâmetros de tempo de pré-cura (t_{s1}) e tempo ótimo de vulcanização (t_{90}) são indicadores fundamentais do comportamento de cura dos compósitos elastoméricos, fornecendo informações sobre a velocidade de início da reticulação e o ponto de vulcanização ideal, respectivamente. Conforme se observa na Tabela 4,

ambos os tempos apresentam uma tendência de diminuição com o aumento do teor de rCB na matriz de polibutadieno. Especificamente, o tempo de pré-cura diminui de 1,927 min para 1,244 min, enquanto o tempo ótimo de vulcanização reduz-se de 6,166 min para 3,614 min ao se incrementar a carga de 0 a 50 phr.

Essa redução é atribuída à presença do rCB, que atua como um agente catalítico indireto, promovendo interações mais eficientes entre os grupos funcionais do elastômero e os aditivos de vulcanização, facilitando a formação das ligações cruzadas. Consequentemente, a reticulação do polímero ocorre de forma mais rápida, reduzindo os tempos de cura necessários para atingir a rede estrutural ideal.

A diminuição progressiva de t_{s1} e t_{90} também sugere que o aumento do teor de rCB incrementa a viscosidade inicial do composto, o que potencializa a transferência de tensões durante o processo de cura e favorece a formação homogênea da matriz vulcanizada. Tal comportamento é compatível com o aumento concomitante do torque mínimo e do torque máximo observado nos ensaios reométricos, indicando que o rCB contribui de maneira significativa tanto para a processabilidade quanto para o reforço estrutural do compósito.

Em síntese, os resultados demonstram que a incorporação de rCB promove um efeito positivo sobre os parâmetros de vulcanização, permitindo a obtenção de compósitos com reticulação eficiente e propriedades mecânicas aprimoradas, reforçando a viabilidade do uso de cargas recicladas de pneus inservíveis na formulação de borrachas de alto desempenho.

5.2. Propriedades Mecânicas

A caracterização das propriedades mecânicas de compósitos elastoméricos fornece informações essenciais sobre o efeito das cargas incorporadas na matriz polimérica, especialmente no que se refere ao comportamento sob esforços de deformação e ruptura. Tais propriedades refletem diretamente a qualidade da dispersão da carga, a eficiência da interação interfacial entre a carga e o polímero, bem como a densidade de ligações cruzadas formadas durante o processo de vulcanização.

Nos compósitos de borracha, a adição de partículas de reforço, como o rCB, modifica significativamente a resposta mecânica do material, influenciando tanto parâmetros de rigidez e resistência quanto características associadas à elasticidade

e à durabilidade. A avaliação desses efeitos requer a realização de diferentes ensaios experimentais, que permitem quantificar propriedades como dureza, densidade, densidade de ligações cruzadas, perda por abrasão, resistência à tração e resistência ao rasgo.

A análise integrada desses resultados possibilita compreender o papel estrutural e funcional do rCB na matriz de BR, identificando os efeitos sinérgicos e as limitações decorrentes da variação do teor de carga. Nas subseções a seguir, são apresentados e discutidos os resultados obtidos para cada uma dessas propriedades, relacionando-os aos mecanismos físico-químicos de reforço e à morfologia dos compósitos desenvolvidos.

5.2.1. Densidade

Os resultados obtidos no ensaio de densidade dos compósitos, apresentados na Figura 19, revelam que a densidade do elastômero aumenta progressivamente com o incremento do teor de rCB incorporado à matriz. Tal comportamento era esperado, uma vez que a adição de maior quantidade de carga ao mesmo volume de elastômero resulta em um acréscimo proporcional da massa do material, elevando, conseqüentemente, sua densidade final.

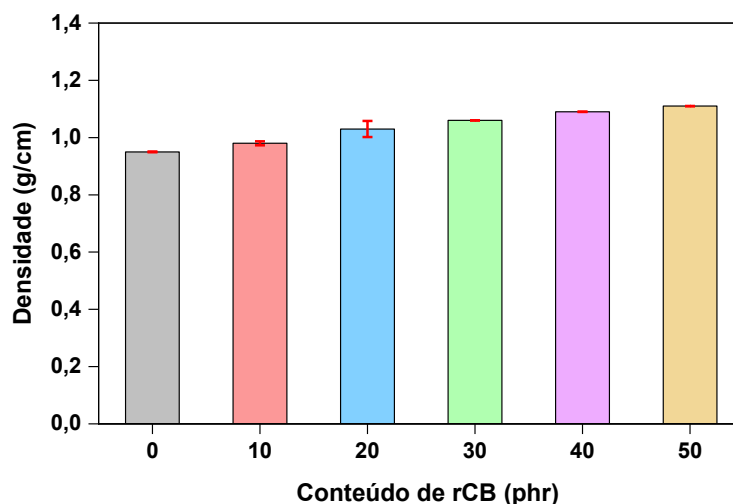


Figura 19. Densidade dos compósitos de BR-rCB com 0 a 50 phr.
Fonte: Autoria própria, 2025.

Esse aumento da densidade também reflete a boa incorporação do rCB à matriz polimérica, sugerindo uma dispersão homogênea das partículas de carga e uma adequada compatibilidade entre os componentes. Assim, a variação observada

pode ser considerada um indicativo indireto da eficiência do processo de mistura e da formação de uma estrutura mais compacta e coesa no compósito.

5.2.2. Densidade de Ligações Cruzadas

Conforme apresentado na Figura 20, observa-se que a densidade de ligações cruzadas (DLC) aumenta gradualmente com o acréscimo do teor de rCB nos compósitos. Esse comportamento pode ser atribuído à interação entre as partículas de rCB e a matriz elastomérica, a qual atua como uma espécie de pseudo-ligação cruzada, dificultando a penetração do solvente durante o ensaio de inchamento. Assim, essas interações são contabilizadas como pontos de reticulação no cálculo da DLC pela aplicação da equação de Flory-Rehner. A elevação observada nos valores de DLC, portanto, indica uma boa interação carga-matriz, favorecida pela eficiente dispersão do rCB na fase polimérica [120, 121].

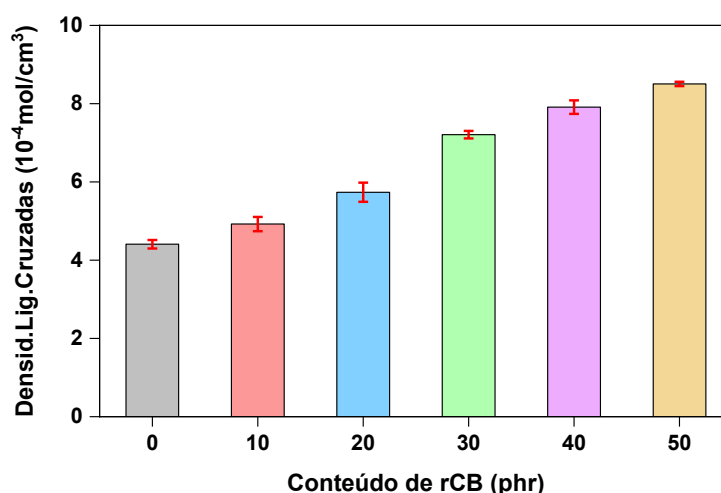


Figura 20. Densidade de ligações cruzadas em função da quantidade de rCB.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Resultados análogos foram relatados por Cruz [122], que também verificou um aumento na densidade de ligações cruzadas em compósitos de borracha natural (NR) com rCB, mesmo sem alterações no teor de enxofre ou no sistema de vulcanização. De modo semelhante, Ribeiro [123] observou que a intensa interação física entre a matriz polimérica e a carga promove a formação de pontos de ancoragem que são interpretados como reticulações quando avaliados pelo método de inchamento baseado na equação de Flory-Rehner.

Ressalta-se, ainda, que a densidade de ligações cruzadas exerce influência direta sobre a maioria das propriedades mecânicas e microestruturais de compósitos

elastoméricos vulcanizados, sendo um dos principais parâmetros responsáveis pelo desempenho final desses materiais [124].

5.2.3. Dureza

Os resultados apresentados na Figura 21 evidenciam que a dureza dos compósitos de BR com rCB aumenta progressivamente com o incremento do teor de carga. Esse comportamento pode ser explicado pela influência direta do rCB sobre a microestrutura do elastômero, uma vez que a presença de partículas de carga reforçante restringe a mobilidade das cadeias poliméricas, tornando a matriz menos suscetível à deformação.

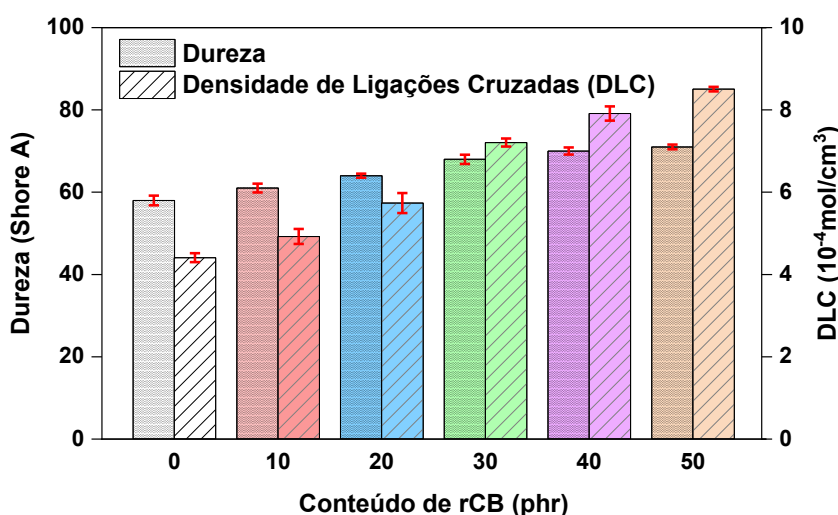


Figura 21. Dureza e densidade de ligações cruzadas, de 0 a 50 phr.
Fonte: Autoria própria, 2025.

Os ensaios de dureza refletem, de forma sensível, os efeitos decorrentes das variações na densidade de ligações cruzadas. Em escala microscópica, o aumento do teor de carga eleva a densidade de ligações cruzadas, o que reduz a liberdade de movimento das cadeias e aumenta a rigidez do material. Consequentemente, em escala macroscópica, esse fenômeno se traduz em valores mais elevados de dureza, indicando uma estrutura vulcanizada mais resistente à penetração do penetrador do durômetro Shore A.

Esse comportamento está associado à formação de uma rede tridimensional mais coesa após o processo de vulcanização, em que as interações entre o rCB e as cadeias poliméricas atuam como pontos adicionais de ancoragem. Dessa forma, a estrutura resultante apresenta maior resistência à deformação elástica

e melhor capacidade de suportar esforços de compressão, refletindo o efeito combinado do reforço físico proporcionado pela carga e do aumento da densidade de ligações cruzadas no sistema.

5.2.4. Resistência à Abrasão

Os resultados do ensaio de perda por abrasão, apresentados na Figura 22, evidenciam que a incorporação de rCB exerce influência direta na durabilidade superficial dos compósitos. Observa-se que a boa dispersão das partículas, aliada à homogeneidade da mistura e à reduzida formação de aglomerados, contribui significativamente para o aprimoramento da resistência ao desgaste. À medida que a concentração de rCB aumenta, ocorre uma redução expressiva na perda por abrasão, comportamento que pode ser atribuído ao incremento da densidade de ligações cruzadas na matriz elastomérica.

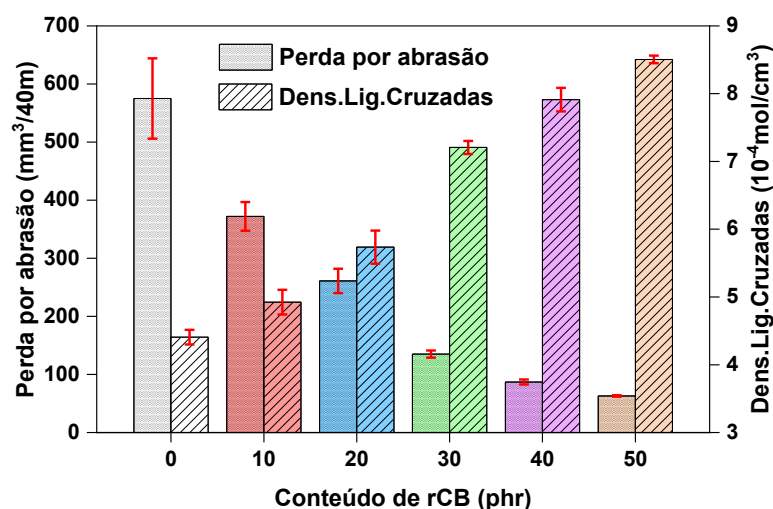


Figura 22. Perda por abrasão e densidade de ligações cruzadas para formulações de BR-rCB de 0 a 50 phr

Fonte: Autoria própria, 2025.

Esse efeito é explicado pela maior interação entre as cadeias poliméricas e as partículas de rCB, que favorece a formação de uma rede tridimensional mais coesa e resistente à ruptura mecânica. Consequentemente, o material apresenta menor remoção de massa sob ação abrasiva, o que reflete a melhora na adesão entre carga e matriz e confirma a eficiência do rCB como agente reforçante no sistema estudado.

5.2.5. Resistência à Tração e ao Rasgo

Conforme ilustrado na Figura 23, a adição de rCB promove reforço mecânico expressivo na matriz polimérica, elevando a resistência à tração e ao rasgo e exigindo maior esforço para a ruptura do material. Esse comportamento é consistente com as observações de Wetchakama [118], que relatou melhoria contínua das propriedades mecânicas em compósitos de polibutadieno (BR) com o aumento do teor de negro de carbono.

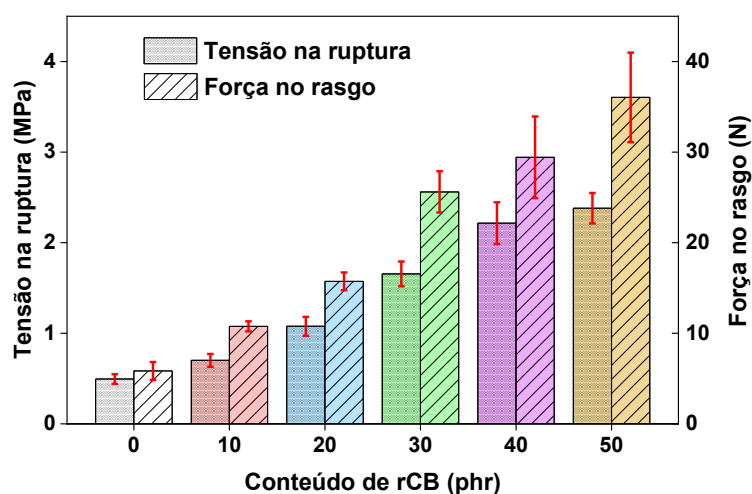


Figura 23. Tensão e força de ruptura nos ensaios de resistência à tração e de resistência ao rasgo.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Tal efeito pode ser atribuído ao incremento da densidade de ligações cruzadas e ao fortalecimento das forças de adesão interfacial entre as partículas de carga e as cadeias elastoméricas. À medida que a concentração de rCB aumenta, formam-se redes estruturais de interação entre as partículas e a matriz, as quais se integram às redes de reticulação química constituídas por ligações sulfídricas entre as cadeias poliméricas. Essa integração dá origem a uma superestrutura tridimensional que confere maior rigidez e resistência mecânica ao compósito. Além disso, a boa dispersão do rCB na matriz minimiza a formação de aglomerados, favorecendo uma distribuição mais uniforme das tensões e aprimorando a eficiência da transferência de carga entre os domínios da borracha e da carga reforçante.

Assim, os resultados obtidos evidenciam que o rCB atua de forma eficaz como agente de reforço, promovendo desempenho mecânico superior e configurando-se como uma alternativa sustentável e tecnicamente viável para substituição parcial de cargas convencionais em formulações elastoméricas.

5.3. Redes Neurais Artificiais

Após a execução dos ensaios reométricos e das determinações das propriedades mecânicas, foram obtidas 72 amostras de compósitos de BR com rCB, com teores de carga variando de 0 a 50 phr, em incrementos de 10 phr, sendo cada nível avaliado por meio de doze amostras. Para cada amostra, registrou-se um conjunto de dez propriedades distintas, permitindo a construção de uma base de dados abrangente e representativa para o estudo.

A partir desses dados experimentais, uma ANN foi treinada de forma independente para cada propriedade avaliada, seguindo os procedimentos metodológicos previamente descritos. O desempenho de cada ANN foi quantificado por meio de métricas de erro, cujos valores, juntamente com a descrição da arquitetura correspondente de cada rede, estão apresentados na Tabela 5.

Tabela 5. Arquitetura das ANNs e testes de performance (estatísticas de erros).

ANN	Arquitetura*	MARE	MSE	R ²
t_{90}	9 / 10 / 1	0.009294	12.762164	0.996241
Dureza	9 / 10 / 1	0.010364	0.733291	0.974413
Densidade	9 / 10 / 1	0.004977	0.000130	0.962889
Perda por abrasão	9 / 3 / 1	0.000150	0.000000	1.000000
DLC	9 / 10 / 1	0.019586	0.048090	0.979746
Deformação na ruptura	9 / 10 / 1	0.034940	5.844994	0.979416
Tensão na ruptura	9 / 10 / 1	0.035285	0.006013	0.988851
Deslocamento no rasgo	9 / 10; 5 / 1	0.021217	0.294487	0.988058
Força no rasgo	9 / 10; 8; 5 / 1	0.091706	2.000007	0.985416

* Arquitetura: número de neurônios na camada de entrada / número de neurônios da 1ª. camada oculta; número de neurônios da 2ª. camada oculta; número de neurônios da 3ª. camada oculta / número de neurônios na camada de saída.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Durante a etapa de treinamento das ANNs, os modelos apresentaram excelente desempenho estatístico, evidenciado por valores consistentemente baixos de *MARE* e *MSE*, além de elevados *R*² para praticamente todas as propriedades avaliadas. Destaca-se, por exemplo, o ensaio de perda por abrasão, no qual se observou o menor *MARE* (0,00015) e o *MSE* nulo (0,000000), associados a um *R*² de 1,000, foram observados para a perda por abrasão, indicando um ajuste praticamente perfeito entre os valores experimentais e os valores ajustados pelo modelo durante o treinamento.

De maneira geral, os modelos alcançaram *R*² superiores a 0,96 em todas as propriedades, demonstrando elevada capacidade de modelagem dos dados de

entrada. Entre as propriedades analisadas, a densidade destacou-se em termos de acurácia, com *MARE* de apenas 0,004977 e *MSE* de 0,000130, o que demonstra estabilidade na predição mesmo diante da variabilidade introduzida pelo rCB. Embora o valor de R^2 (0,962889) tenha sido ligeiramente inferior aos observados para outras propriedades, os indicadores de erro complementares corroboram a alta performance do modelo. Como o R^2 pode ser sensível à variabilidade dos dados e à presença de possíveis outliers, a utilização conjunta de métricas adicionais de erro é essencial para uma avaliação mais robusta do desempenho. Assim, os baixos valores de *MARE* e *MSE* indicam que o modelo apresenta capacidade satisfatória de generalização para a densidade, mesmo com um conjunto de dados relativamente limitado.

O maior *MARE* observado durante o treinamento correspondeu à força até o rasgo (0,091706), possivelmente em decorrência da maior complexidade da arquitetura da ANN empregada (10, 8 e 5 neurônios nas três camadas ocultas) e da sensibilidade desta propriedade a variações microestruturais do compósito. Apesar dessa maior variação relativa, o modelo apresentou R^2 de 0,985416, indicando que o ajuste global permaneceu excelente e capaz de representar de forma confiável os dados experimentais.

De maneira consistente com os ensaios laboratoriais utilizados para validação das predições, as menores taxas de erro durante o treinamento concentraram-se nas propriedades relacionadas à densidade, abrasão e deslocamento ao rasgo. Esse comportamento evidencia que tais variáveis apresentam maior estabilidade e previsibilidade em função das entradas fornecidas, reforçando a robustez dos modelos desenvolvidos. Tal consistência entre os resultados de treinamento e de validação sugere que as ANNs conseguiram ajustar efetivamente as relações entre a formulação dos compósitos e suas propriedades mecânicas e reométricas.

Ressalta-se que o treinamento das redes foi conduzido utilizando o algoritmo Levenberg-Marquardt com regularização bayesiana (função `trainbr()` do Matlab), o qual ajusta automaticamente os parâmetros de regularização com o objetivo de controlar a complexidade do modelo. Esse mecanismo contribui de maneira significativa para a estabilidade do treinamento e para a capacidade de generalização das ANNs, mesmo nos casos em que os valores de R^2 apresentem pequenas diferenças em relação às demais propriedades. A abordagem se mostra especialmente eficaz para conjuntos de dados de extensão limitada, como o utilizado

neste estudo, fortalecendo a confiabilidade dos resultados obtidos e garantindo a robustez das previsões realizadas pelas redes neurais.

Řeháčková [20] também se utilizou do R^2 e do $MARE$ como indicadores de confiabilidade na modelagem de dados por ANNs em sua pesquisa. Após a conclusão do treinamento, o desempenho das redes neurais pode ser monitorado por meio de gráficos de performance, que utilizam a métrica MSE, e de histogramas de erros, os quais permitem avaliar a proximidade das previsões em relação aos valores experimentais. Nos presentes resultados, os histogramas de erros e os gráficos de performance das ANNs treinadas estão apresentados, respectivamente, na Figura 24 e na Figura 25, proporcionando uma visão detalhada da precisão e do ajuste das redes aos dados obtidos nos ensaios laboratoriais.

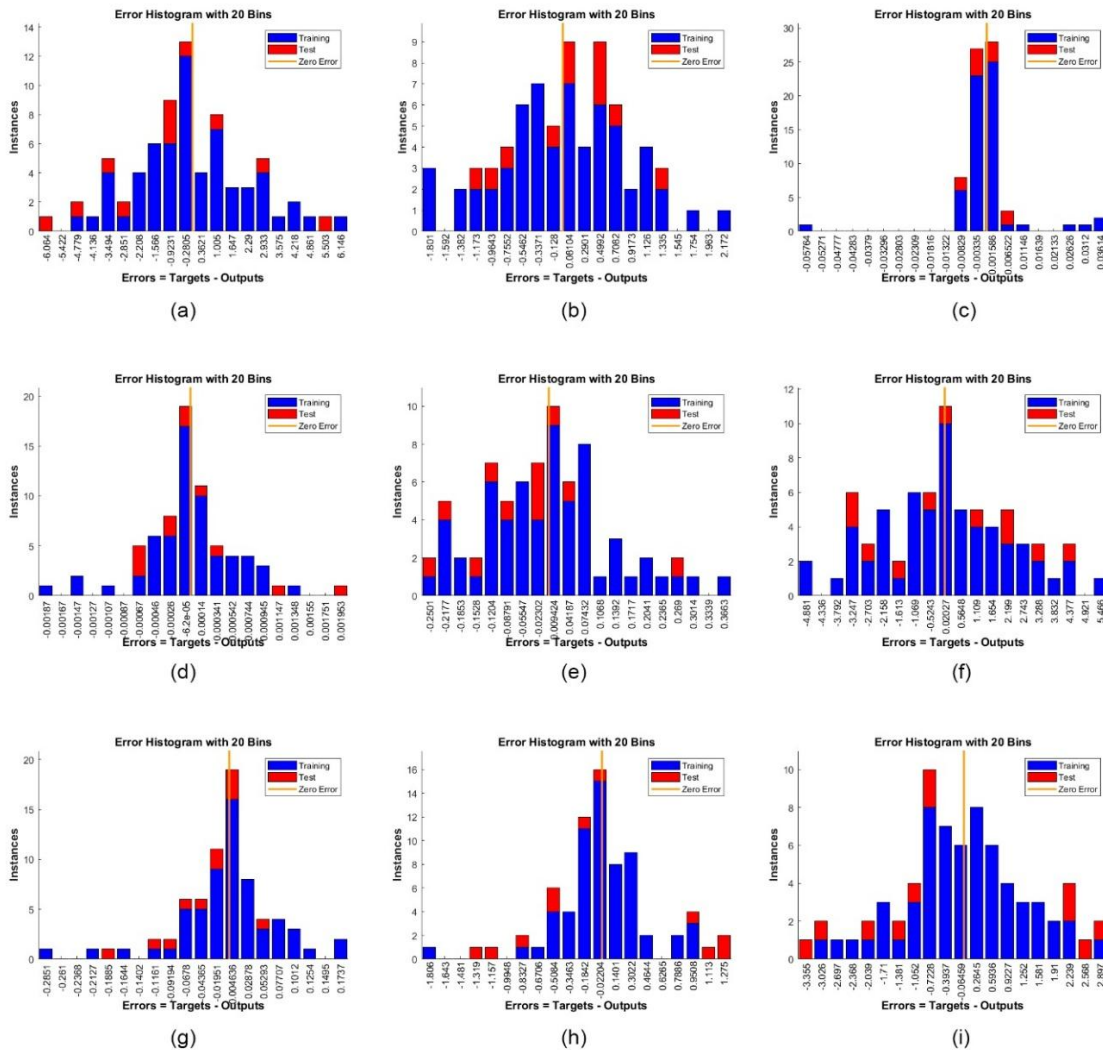


Figura 24. Histogramas de erros dos treinamentos das ANNs: (a) t_{90} ; (b) dureza; (c) densidade; (d) perda por abrasão; (e) densidade de ligações cruzadas; (f) deformação na ruptura; (g) tensão na ruptura; (h) deslocamento no rasgo; (i) força no rasgo.

Fonte: MathWorks, 2025.

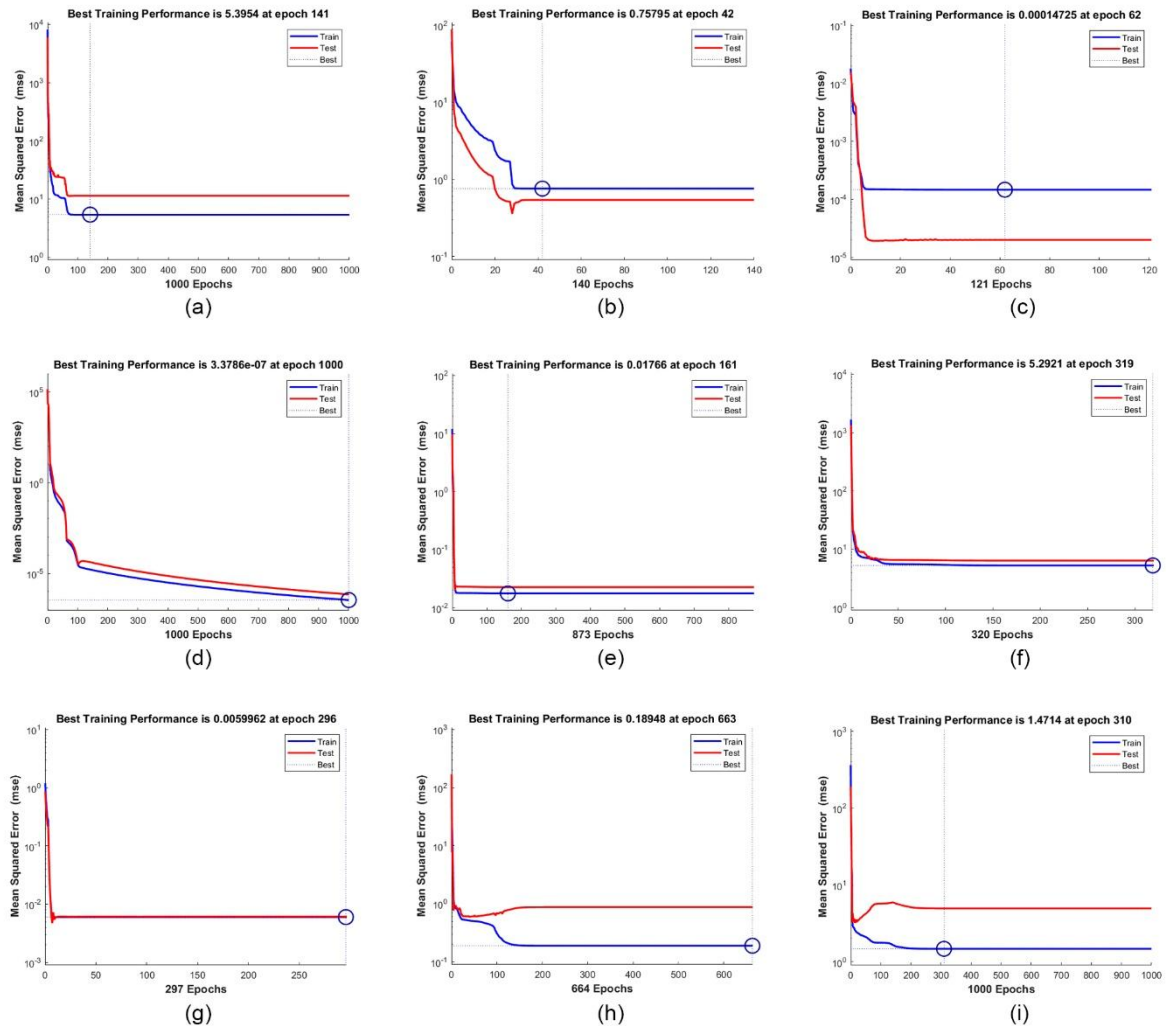


Figura 25. Performances de treinamento das ANNs: (a) t_{90} ; (b) dureza; (c) densidade; (d) perda por abrasão; (e) densidade de ligações cruzadas; (f) deformação de ruptura; (g) tensão de ruptura; (h) deslocamento no rasgo; (i) força no rasgo.

Fonte: MathWorks, 2025.

Com as ANNs previamente treinadas a partir dos dados experimentais, foi proposto um teste adicional de validação da aplicação desenvolvida. Para tanto, definiu-se, de maneira aleatória, um teor de rCB de 23 phr, valor não contemplado nos conjuntos de dados utilizados durante o treinamento das redes. Esse valor foi inserido na aplicação com o objetivo de obter as previsões das propriedades mecânicas dos compósitos modeladas pelas ANNs.

Conforme descrito nos procedimentos experimentais, cada ANN foi estruturada para calcular uma única propriedade, necessitando, portanto, de valores de entrada correspondentes às demais propriedades do compósito. Para gerar essas entradas, utilizou-se uma estimativa inicial obtida por média ponderada, conforme

detalhado na Equação (8). Como exemplo da aplicação desse procedimento, a Tabela 6 apresenta os valores de entrada utilizados para a predição do tempo ótimo de vulcanização (t_{90}) dos compósitos de BR contendo 23 phr de rCB. A Figura 26 ilustra a interface da aplicação durante a execução da ANN para a predição do t_{90} , evidenciando a operacionalidade do sistema e a forma como os dados experimentais são integrados às predições computacionais.

Tabela 6. Valores de entrada e de saída da ANN de predição do t_{90} .

Propriedade	Valor de entrada	Descrição do valor de entrada	Valor de saída
Quantidade de rCB (phr)	23	Arbitrário	
Tempo ótimo de vulcaniz. t_{90} (s)	Não fornecido	A ser predito pela ANN	256.9302
Dureza (Shore A)	65.732	Calculado pela Equação (10)	
Densidade(g/cm ³)	1.0447	Calculado pela Equação (10)	
Perda por abrasão (mm ³ /40m)	223.1649	Calculado pela Equação (10)	
DLC (10 ⁻⁴ mol/cm ³)	6.1717	Calculado pela Equação (10)	
Deformação na ruptura (%)	57.3177	Calculado pela Equação (10)	
Tensão na ruptura (MPa)	1.2504	Calculado pela Equação (10)	
Deslocamento no rasgo (mm)	18.3072	Calculado pela Equação (10)	
Força no rasgo (N)	18.6075	Calculado pela Equação (10)	

Fonte: Autoria própria, 2025.

```
>>load('C:\...\4.PESQUISA\RNA\TrainedRNAs\02.RNA_PredT90-02_-6.0_6.1_10c')
net([23; 65.732; 1.04477835315838; 223.164961127296; 6.1717563330657; 57.31771;
1.25041; 18.30723; 18.60753])
ans = 256.9302
```

Figura 26. Exemplo de execução da predição do t_{90} pela rede neural correspondente.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Para cada propriedade mecânica, foi necessário desenvolver uma rede neural específica, de modo que as nove ANNs fossem executadas individualmente para a predição de cada propriedade dos compósitos de BR com rCB, considerando a mesma quantidade de carga. Com o intuito de aprimorar a interface com o usuário e tornar o uso do software mais ágil, as redes foram integradas em uma única aplicação, na qual é necessário fornecer apenas o valor de rCB em phr. A partir desse valor, a aplicação realiza automaticamente a execução das nove ANNs, gerando uma matriz de dados contendo as predições correspondentes a cada propriedade mecânica avaliada. A Figura 27 ilustra a interface do sistema e apresenta a disposição dos resultados obtidos para as nove propriedades do compósito.

```

Enter the PHR for which you want to calculate the rheometric and mechanical properties: 23

avgParameters =

23      261.57   65.732   1.0448   223.165   6.1718   57.3177   1.2504   18.3072   18.6075

predictedParameters =

```

Figura 27. Exemplo de execução da aplicação desenvolvida com a integração das ANNs treinadas.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Como descrito anteriormente, o valor de 23 phr de rCB foi selecionado como teste adicional da aplicação desenvolvida. Esse valor foi fornecido ao sistema, conforme ilustrado na Figura 27, e os valores preditos para cada propriedade foram organizados na Tabela 7.

Tabela 7. Predições das ANNs para formulações com 23 phr de rCB.

Propriedade	Predições das ANNs	
Quantidade de rCB (phr)	23	Valor arbitrário, fornecido pelo usuário
Tempo ótimo de vulcaniz. t_{90} (s)	256.9302	Valor calculado pela ANN t_{90}
Dureza (Shore A)	65.8556	Valor calculado pela ANN Dureza
Densidade(g/cm ³)	1.0411	Valor calculado pela ANN Densidade
Perda por abrasão (mm ³ /40m)	223.1663	Valor calculado pela ANN Abrasão
DLC (10 ⁻⁴ mol/cm ³)	6.1955	Valor calculado pela ANN DLC
Deformação de ruptura (%)	58.3108	Valor calculado pela ANN Deformação
Tensão de ruptura (MPa)	1.246	Valor calculado pela ANN Tensão
Deslocamento no rasgo (mm)	18.127	Valor calculado pela ANN Deslocamento
Força no rasgo (N)	18.6638	Valor calculado pela ANN Força

Fonte: Autoria própria, 2025.

Para validar a confiabilidade das predições, foram realizados ensaios laboratoriais em quintuplicata para o compósito com 23 phr de rCB. Os resultados obtidos experimentalmente, assim como as predições geradas pelas ANNs, estão apresentados na Tabela 8.

Tabela 8. Resultados dos ensaios laboratoriais para formulações com 23 phr de rCB.

Propriedade	Resultados Experimentais	Predições das ANNs
Quantidade de rCB (phr)	23	23
Tempo ótimo de vulcaniz. t_{90} (s)	270.67	256.9302
Dureza (Shore A)	63.17	65.8556
Densidade(g/cm ³)	1.0207	1.0411
Perda por abrasão (mm ³ /40m)	228.20	223.1663
DLC (10 ⁻⁴ mol/cm ³)	5.732	6.1955
Deformação de ruptura (%)	60.09	58.3108
Tensão de ruptura (MPa)	1.19	1.246
Deslocamento no rasgo (mm)	18.21	18.127
Força no rasgo (N)	18.44	18.6638

Fonte: Autoria própria, 2025.

A comparação entre os valores preditos pelas ANNs e os obtidos experimentalmente evidencia que os erros encontrados variaram entre -5,08% e 8,09%, conforme ilustrado na Figura 28. Tais discrepâncias podem ser atribuídas à utilização de rCB, que, ao contrário do CB, apresenta variações em sua composição química devido à diversidade de materiais reciclados empregados em sua produção.

Embora a utilização de uma única fonte de rCB (PX-300) configure uma limitação no que se refere à generalização do modelo, o objetivo deste estudo concentra-se na aplicação de redes neurais artificiais como ferramenta preditiva para formulações específicas de elastômeros contendo um tipo definido de rCB, e não no desenvolvimento de um modelo generalista aplicável a múltiplas origens desse material recuperado.

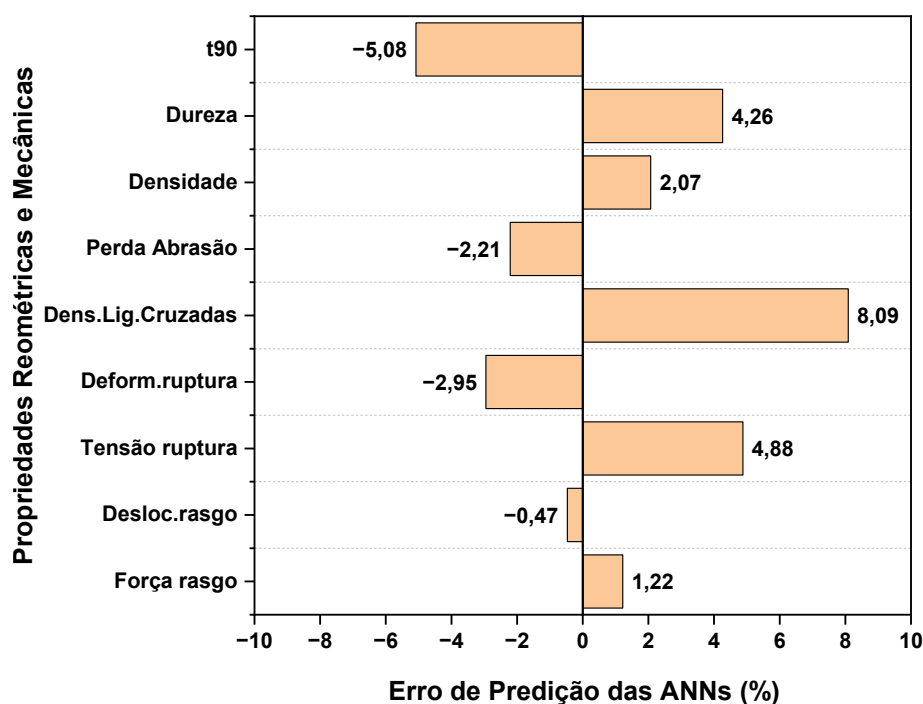


Figura 28. Erro relativo da predição em relação aos resultados dos ensaios laboratoriais.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Uma análise detalhada dos erros de predição fornece informações adicionais sobre a sensibilidade dos modelos em relação às diferentes propriedades dos compósitos. A maior discrepância foi observada na predição da densidade de ligações cruzadas, com um erro absoluto de aproximadamente 8,09%. Essa propriedade é fortemente influenciada por fatores estruturais em nível molecular, tais como o grau de insaturação da borracha base, a presença de resíduos polares no rCB

e a eficiência do processo de vulcanização, variáveis que podem apresentar flutuações difíceis de capturar apenas por meio dos dados de entrada disponíveis. Adicionalmente, a determinação da densidade de ligações cruzadas por meio de ensaios de inchamento envolve medições indiretas e pressupostos teóricos, como a Teoria de Flory-Rehner, os quais podem introduzir incertezas adicionais ao conjunto de dados.

Em contrapartida, a menor discrepância foi observada no deslocamento até o rasgo, com erro absoluto de apenas 0,47%, possivelmente devido à sua maior correlação com propriedades mecânicas mais diretamente influenciadas pela matriz polimérica e pela distribuição do rCB. Essa propriedade tende a apresentar menor variabilidade experimental e maior estabilidade diante de pequenas flutuações nas formulações, favorecendo a aprendizagem e a predição pelo modelo.

De modo geral, propriedades que estão diretamente relacionadas à microestrutura tridimensional do compósito, como densidade de ligações cruzadas e resistência à ruptura, apresentam maior complexidade para modelagem, enquanto propriedades mais macroscópicas e integrativas, como deslocamento e densidade, demonstram maior previsibilidade. Esses resultados evidenciam a importância de compreender a natureza física e química subjacente a cada propriedade ao se aplicar modelos baseados em aprendizado de máquina.

Considerando a origem do rCB, proveniente de uma variedade de formulações de borracha vulcanizada, ajustadas para aplicações e fabricantes distintos, as diferenças observadas entre as predições e os ensaios laboratoriais de confirmação são aceitáveis. Por exemplo, Dwivedi [125], relatou que a utilização de rCB reduziu o t_{90} , aumentou a resistência à tração e o alongamento na ruptura, mas diminuiu o módulo de tração em deformação por compressão e a resistência ao rasgo em comparação à borracha sem carga. O autor atribuiu tais efeitos à redução das interações entre partículas e cadeias poliméricas devido ao bloqueio de sítios ativos superficiais por resíduos carbonáceos. De maneira similar, Norris [126], apontou que a presença de carbono residual na superfície do rCB é frequentemente relatada, mas sua influência específica no reforço mecânico não pode ser quantificada ou isolada, em virtude da heterogeneidade das matérias-primas provenientes de pneus usados.

A Figura 29 ilustra a relação entre os valores preditos pelas ANNs e os obtidos nos ensaios laboratoriais, evidenciando que as redes neurais foram capazes de fornecer predições muito próximas aos resultados experimentais de confirmação.

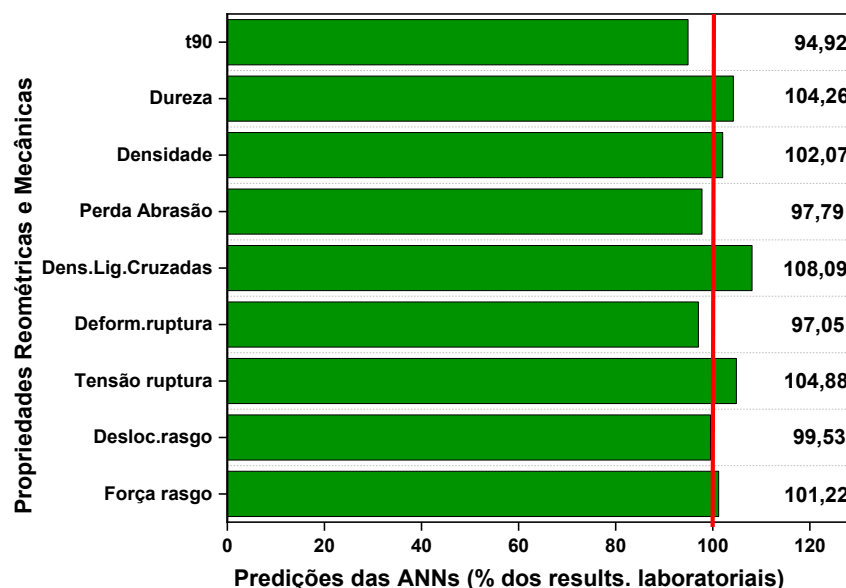


Figura 29. Correlação entre as predições das ANNs e os resultados dos testes em laboratório.

Fonte: Autoria própria, 2025.

De modo geral, o maior erro de predição observado foi de aproximadamente 8%, registrado para a densidade de ligações cruzadas, enquanto o menor erro, inferior a 1%, ocorreu no deslocamento até o rasgo. Essas diferenças refletem a especificidade de cada modelo de ANN, os quais foram estruturados e treinados de forma independente para a predição das distintas propriedades do compósito.

Os resultados obtidos evidenciam as vantagens do emprego de redes neurais artificiais em comparação com estimativas baseadas em médias ponderadas de médias internas. A interpolação tradicional limita-se a valores pontuais correspondentes às formulações experimentais avaliadas (0, 10, 20, 30, 40 e 50 phr de rCB) e é aplicada de forma isolada para cada propriedade, sem garantir coerência multivariada entre os resultados. Em contrapartida, as ANNs, treinadas com o mesmo conjunto de dados experimentais, permitem realizar predições em concentrações intermediárias (como 3, 5, 7, 13, 15, 17 phr, entre outras), viabilizando a análise contínua do comportamento das propriedades ao longo de toda a faixa de composições estudada.

A relevância desse aspecto reside no fato de que o modelo preditivo desenvolvido não se restringe à análise de pontos discretos, sendo capaz de estimar de maneira consistente as tendências das propriedades ao longo de toda a faixa experimental. A Figura 30 ilustra essa capacidade, evidenciando que, para 23 phr de

rCB, ambos os métodos apresentam desvios relativamente pequenos em relação aos valores obtidos em laboratório. No entanto, observa-se que as redes neurais artificiais proporcionam maior acurácia em propriedades críticas, como o t_{90} e a deformação na ruptura, as quais são altamente dependentes do processamento e exercem influência direta no desempenho final do compósito. Dessa forma, enquanto a interpolação fornece apenas uma estimativa inicial pontual, as ANNs apresentam-se como ferramentas preditivas mais robustas e confiáveis, capazes de aprimoramento contínuo mediante a inclusão de novos dados experimentais, além de viabilizarem a previsão de propriedades em formulações ainda não testadas, ampliando a aplicabilidade prática do modelo no desenvolvimento de compósitos de borracha com rCB.

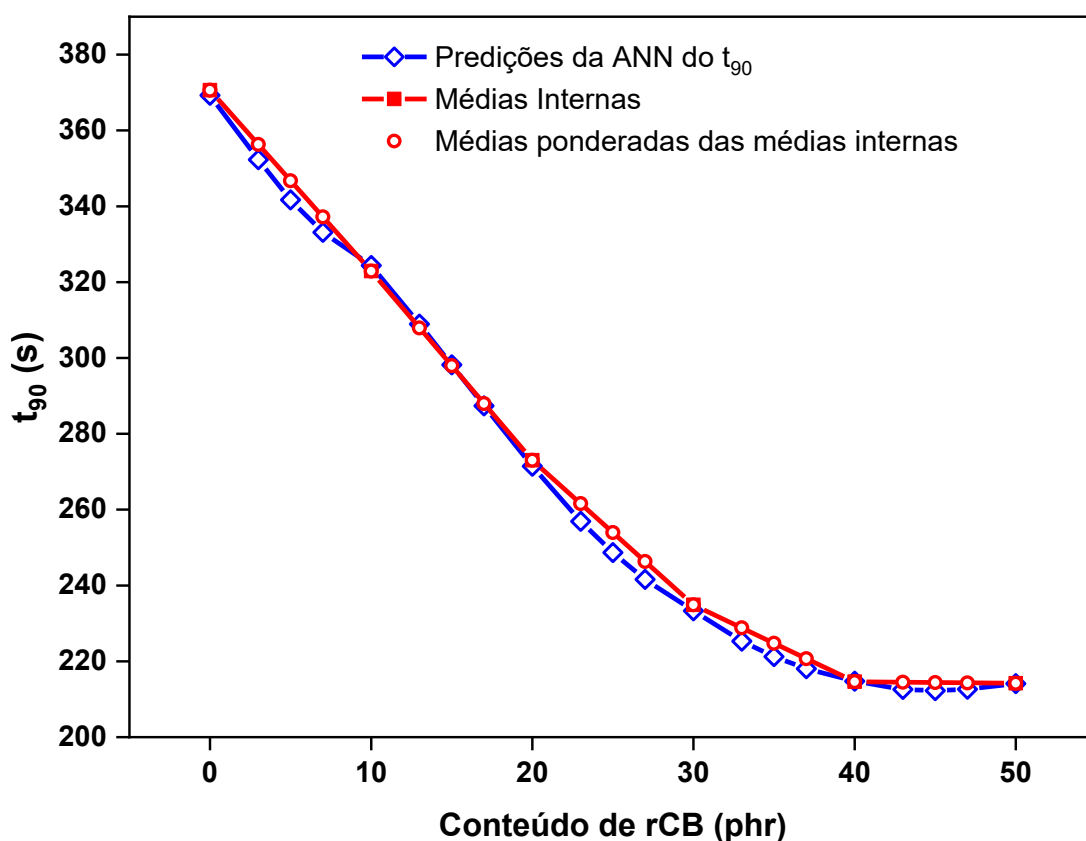


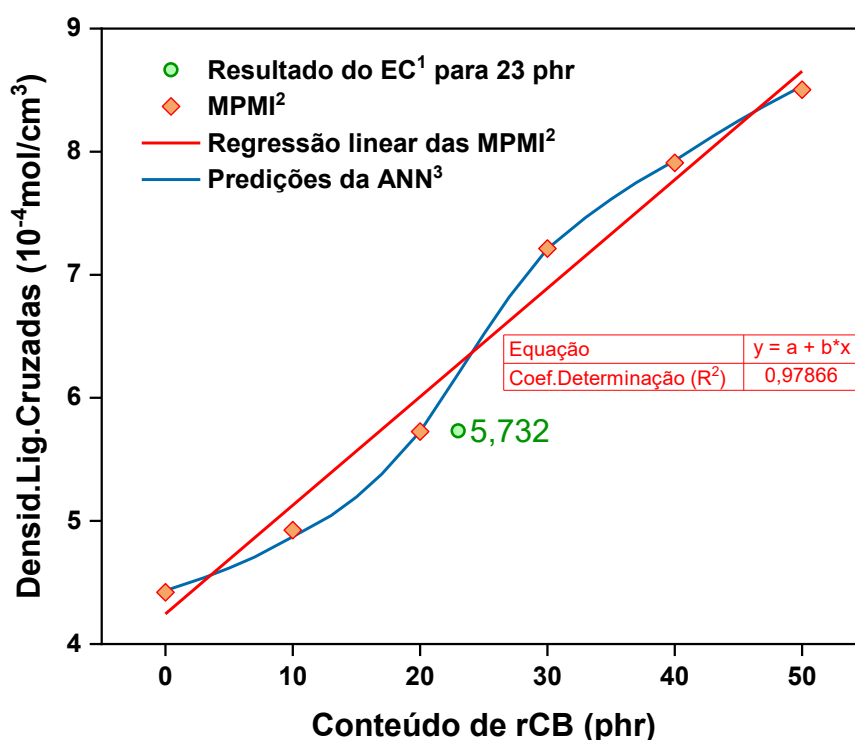
Figura 30. Comparação de previsões das ANNs com as estimativas por médias ponderadas de médias internas para o t_{90} .

Fonte: Autoria própria, 2025.

Na Figura 30, observa-se que as previsões das ANNs resultam em uma curva mais suave e condizente com o comportamento esperado de compósitos elastoméricos, enquanto a interpolação direta por médias internas gera apenas segmentos lineares entre os pontos discretos.

Com a aplicação de regressão linear às estimativas obtidas por médias ponderadas de médias internas, a discrepância observada torna-se ainda mais evidente. A escolha pelas ANNs justifica-se pela complexidade físico-química dos compósitos analisados, nos quais interações não lineares entre a matriz polimérica, o rCB e os demais aditivos exercem influência significativa sobre as propriedades mecânicas e reométricas. Modelos lineares ou baseados em árvores, embora relevantes em determinados contextos, não apresentam vantagem clara em termos de capacidade preditiva para o conjunto de dados considerado e poderiam exigir esforço computacional e de parametrização comparável ao das ANNs, sem garantir ganho adicional na acurácia.

A Figura 31 e a Figura 32 apresentam a comparação entre as previsões obtidas pelo sistema desenvolvido e os resultados provenientes da regressão linear, evidenciando que as ANNs proporcionam um ajuste mais consistente e fiel aos dados experimentais.



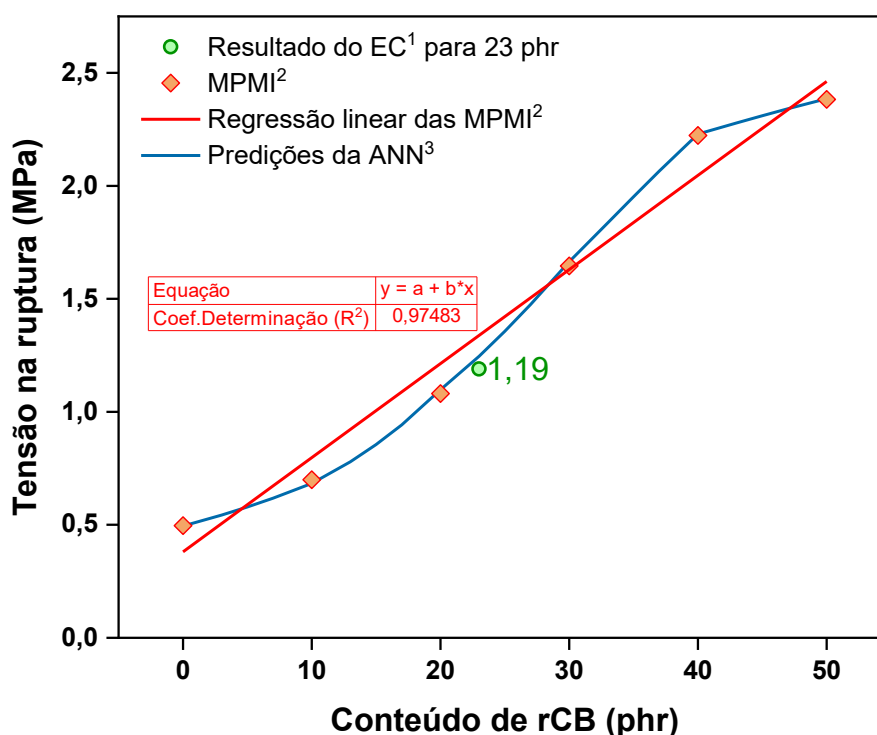
¹ EC: ensaio no laboratório para validação das previsões da rede neural artificial

² MPMI: médias ponderadas das médias internas

³ ANN: previsões da rede neural artificial

Figura 31. Comparação entre as previsões das ANNs e as estimativas por médias ponderadas de médias internas para a deformação na ruptura.

Fonte: Autoria própria, 2025.



¹ EC: ensaio no laboratório para validação das previsões da rede neural artificial

² MPMI: médias ponderadas das médias internas

³ ANN: previsões da rede neural artificial

Figura 32. Comparação entre as previsões das ANNs e as estimativas por médias ponderadas de médias internas para a tensão na ruptura.

Fonte: Autoria própria, 2025.

Embora a presente pesquisa tenha se concentrado exclusivamente na aplicação de ANNs para a predição das propriedades mecânicas de compósitos elastoméricos contendo rCB PX-300 como única carga de reforço, reconhece-se que a inclusão de formulações com negro de carbono virgem ou outros tipos de rCB permitiria uma comparação direta entre diferentes fontes de carga. Tal análise acrescentaria valor ao estudo ao possibilitar uma avaliação mais detalhada do efeito da variabilidade composicional do rCB sobre o desempenho dos compósitos.

A delimitação intencional do escopo visou testar o potencial preditivo das redes neurais em um contexto que já era tecnicamente desafiador, marcado pela heterogeneidade do rCB obtido por pirólise de pneus inservíveis. Apesar dessa variabilidade, os modelos desenvolvidos apresentaram desempenho consistente. Como exemplo, a propriedade de densidade exibiu baixo MARE (0,004977) e MSE (0,000130), mesmo com um R^2 ligeiramente inferior (0,962889), evidenciando que a rede neural foi capaz de captar padrões relevantes nos dados, mesmo diante das características complexas da carga utilizada.

Nesse sentido, trabalhos futuros podem expandir o estudo incorporando formulações com CB virgem como referência, possibilitando análises comparativas mais abrangentes e contribuindo para uma compreensão aprofundada do comportamento de cargas convencionais em comparação com alternativas sustentáveis, como o rCB.

6. CONCLUSÃO

O rCB, mesmo sendo um material de origem secundária, demonstrou-se altamente eficiente como agente de reforço nos compósitos elastoméricos de BR analisados. O incremento da sua concentração foi diretamente associado ao aumento da dureza, da densidade de ligações cruzadas e da resistência à abrasão, indicando que o rCB atua por meio de interações superficiais com as cadeias poliméricas e pela formação de uma rede estrutural de reforço. Essas interações também resultaram em melhor desempenho mecânico, refletido no aumento da resistência à tração, ao rasgo e na rigidez geral dos compósitos, reforçando a efetividade do rCB como alternativa sustentável ao CB.

A aplicação de ANNs mostrou-se uma ferramenta preditiva robusta e confiável, capaz de modelar com alta precisão as propriedades reométricas e mecânicas do conjunto de dados experimental, incluindo formulações não utilizadas no treinamento das ANNs, como o caso do teste com 23 phr de rCB. As métricas de desempenho (MSE, MARE e R^2) evidenciaram ajustes excelentes para a maioria das propriedades, mesmo considerando a variabilidade intrínseca do rCB, que se deve à heterogeneidade química e estrutural resultante da pirólise de pneus inservíveis.

A comparação entre previsões por médias ponderadas de médias internas e os modelos baseados em ANNs destacou a superioridade destes últimos. As ANNs foram capazes de estimar tendências contínuas ao longo da faixa de formulações, oferecendo consistência multivariada e capacidade de generalização, enquanto a interpolação linear apresentava limitações em termos de coerência entre propriedades e de previsão de concentrações intermediárias. Essa capacidade de modelagem contínua reforça o potencial das ANNs como ferramentas de apoio à formulação de compósitos elastoméricos, permitindo reduzir experimentações laboratoriais, otimizar o consumo de insumos e acelerar o desenvolvimento de produtos com propriedades-alvo.

Além disso, a análise detalhada das discrepâncias de predição evidenciou que propriedades fortemente dependentes da microestrutura tridimensional do compósito, como a densidade de ligações cruzadas e a resistência à ruptura, apresentam maior complexidade de modelagem, enquanto propriedades mais macroscópicas, como deslocamento até o rasgo e densidade, mostraram-se mais estáveis e previsíveis. Esses achados reforçam a importância de se considerar a natureza física e química de cada propriedade ao se aplicar modelos baseados em aprendizado de máquina.

Este estudo também demonstra que, mesmo com um conjunto de dados relativamente limitado, as ANNs podem capturar padrões complexos de interação carga-matriz, oferecendo previsões confiáveis e um modelo de engenharia preditiva aplicável a compósitos com rCB. A abordagem adotada constitui uma base metodológica para pesquisas futuras, que poderão incorporar diferentes tipos de cargas, borrachas, agentes de vulcanização e aditivos, permitindo a avaliação comparativa entre materiais convencionais e alternativas sustentáveis, além de ampliar a generalização dos modelos preditivos.

Em síntese, os resultados deste trabalho evidenciam o potencial do rCB como carga de reforço sustentável e das redes neurais artificiais como instrumento de modelagem preditiva de propriedades mecânicas e reométricas, promovendo eficiência, confiabilidade e sustentabilidade no desenvolvimento de compósitos elastoméricos, consolidando a inteligência artificial como recurso promissor para a engenharia de materiais.

REFERÊNCIAS

- [1] SMITHERS. Tire industry rebounds to reach \$264.0 billion in 2021, and \$325.6 billion in 2026 according to latest Smithers research. [S. l.], 2021. Disponível em: [https://www.smithers.com/resources/2021/november/tire-industry-rebounds-to-\\$264-billion-in-2021](https://www.smithers.com/resources/2021/november/tire-industry-rebounds-to-$264-billion-in-2021). Acesso em: 28 dez. 2024.
- [2] ARAUJO-MORERA, J.; CASTRO-FRESNO, D.; RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, J.; GÓMEZ-GIL, J. Sustainable mobility: the route of tires through the circular economy model. *Waste Management*, v. 126, p. 309–322, 2021. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/350469247_Sustainable_mobility_The_route_of_tires_through_the_circular_economy_model. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2021.03.025>.
- [3] ALVAREZ, J.; LOPEZ, G.; AMUTIO, M.; ARTETXE, M.; BILBAO, J.; OLAZAR, M. Evaluation of the properties of tyre pyrolysis oils obtained in a conical spouted bed reactor. *Energy*, v. 128, p. 463–474, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.03.163>.
- [4] LOPEZ, G.; ARTETXE, M.; AMUTIO, M.; BILBAO, J.; OLAZAR, M. Waste truck-tyre processing by flash pyrolysis in a conical spouted bed reactor. *Energy Conversion and Management*, v. 142, p. 523–532, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.03.051>.
- [5] ANTONIOU, N.; ZABANIOTOU, A. Re-designing a viable ELTs depolymerization in circular economy: pyrolysis prototype demonstration at TRL 7, with energy optimization and carbonaceous materials production. *Journal of Cleaner Production*, v. 174, p. 74–86, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2017.10.319>.
- [6] BUSS, A. H. Reciclagem de pneus em fim de vida visando a fácil transferência de tecnologia. 2021. Tese (Doutorado em Engenharia) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, 2021. Disponível em: <https://repositorio.utfpr.edu.br/jspui/bitstream/1/25062/1/reciclagempneustransferenciategnologia.pdf>. Acesso em: 3 jan. 2025.
- [7] LANDI, D.; VITALI, S.; GERMANI, M. Environmental analysis of different end of life scenarios of tires textile fibers. *Procedia CIRP*, v. 48, p. 508–513, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.procir.2016.03.141>.
- [8] MARTÍNEZ, J. D. et al. Waste tyre pyrolysis – a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 23, p. 179–213, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.02.038>.

- [9] SONG, Z. et al. Gaseous products evolution during microwave pyrolysis of tire powders. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 42, n. 29, p. 18209–18215, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.04.169>.
- [10] ZHANG, Y. et al. High-value resource recovery products from waste tyres. *Proceedings of the Institution of Civil Engineers – Waste and Resource Management*, v. 169, n. 3, p. 137–145, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1680/jwarm.16.00001>.
- [11] HOSSAIN, M. S. et al. Biofuel from co-pyrolysis of solid tire waste and rice husk. *Energy Procedia*, v. 110, p. 453–458, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.168>.
- [12] VALENTE, M. et al. Composite alkali-activated materials with waste tire rubber designed for additive manufacturing: an eco-sustainable and energy saving approach. *Journal of Materials Research and Technology*, v. 24, p. 3098–3117, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.03.213>.
- [13] ANTONIOU, N.; ZABANIOTOU, A. Experimental proof of concept for a sustainable End of Life Tyres pyrolysis with energy and porous materials production. *Journal of Cleaner Production*, v. 101, p. 323–336, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2015.03.101>.
- [14] GOMES, M. M. Borracha de polibutadieno (BR). Rubberpedia, portal da indústria da borracha. [S. l.], [s. d.]. Disponível em: <http://www.rubberpedia.com/borrachas/borracha-polibutadieno.php>. Acesso em: 4 jan. 2025.
- [15] FLECK, L.; WOMMER, G.; VENTURA, M. Redes neurais artificiais: princípios básicos. *Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia*, v. 1, n. 13, p. 47–57, 2016. DOI: <https://doi.org/10.3895/recit.v7.n15.4330>.
- [16] HAYKIN, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*. 2. ed. New York: Prentice Hall, 1995. ISBN 978-0132733502.
- [17] RUSSELL, S.; NORVIG, P. *Artificial intelligence: a modern approach*. 3. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2010. ISBN 978-0-13-604259-4.
- [18] RUMELHART, D.; HINTON, G.; WILLIAMS, R. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, v. 323, p. 533–536, 1986. DOI: <https://doi.org/10.1038/323533a0>.
- [19] MEIRELES, M. R.; ALMEIDA, P. E.; SIMÕES, M. G. A comprehensive review for industrial applicability of artificial neural networks. *IEEE Transactions on Industrial*

Electronics, v. 50, n. 3, p. 484–601, 2003. DOI:

<https://doi.org/10.1109/TIE.2003.812470>.

[20] ŘEHÁČKOVÁ, L. et al. On rheological properties of environmentally friendly inorganic systems and their modeling by artificial neural networks. *Journal of Materials Research and Technology*, v. 22, p. 1410–1422, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.12.014>.

[21] XIANG, K. L.; XIANG, P. Y.; WU, Y. P. Prediction of the fatigue life of natural rubber composites by artificial neural network approaches. *Materials and Design*, v. 57, p. 180–185, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.12.044>.

[22] MARIN, B. Aplicação de redes neurais artificiais na modelagem matemática do comportamento dinâmico de um isolador viscoelástico. 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, 2018. Disponível em: <https://repositorio.utfpr.edu.br/jspui/handle/1/3828>. Acesso em: 8 jan. 2025.

[23] CALLISTER, W. D.; RETHWISCH, D. G. *Materials Science and Engineering: An Introduction*. 10. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2020. ISBN 978-1-119-57633-6.

[24] BILLMEYER, F. W. *Textbook of Polymer Science*. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1984. ISBN 978-0-471-06296-9.

[25] FERRY, J. D. *Viscoelastic Properties of Polymers*. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1980. ISBN 978-0-471-04894-9.

[26] MEIER, J. G.; WARD, I. M. *Introduction to the Mechanical Properties of Solid Polymers*. 2. ed. Hoboken: Wiley, 2015. ISBN 978-1-118-46568-4.

[27] RABELLO, M. S. *Aditivação de Polímeros*. 3. ed. São Paulo: Artliber, 2019. ISBN 978-85-87616-76-7.

[28] MARK, J. E.; ERMAN, B.; ROLAND, C. M. *The Science and Technology of Rubber*. 4. ed. Amsterdam: Elsevier, 2013. ISBN 978-0-12-394584-6.

[29] KARGER-KOCSIS, J. *Polymer Toughening*. Dordrecht: Springer, 1996. ISBN 978-94-010-6616-8.

[30] BROSTOW, W. et al. *Modification of Polymers: Properties and Applications*. New York: Nova Science Publishers, 2010. ISBN 978-1-60876-509-8.

[31] BRITANNICA. Butadiene rubber | Synthetic Rubber, Properties, Uses. *Britannica Online Encyclopedia*, s. l., s. n., 2024. Disponível em:

<https://www.britannica.com/technology/butadiene-rubber>. Acessado em: 11 mai. 2025.

[32] SARRIETTI, A. R. et al. Synthesis and utilization of epoxidized polybutadiene rubber as an alternate compatibilizer in green-tire composites. *International Journal of Industrial Chemistry*, v. 8, p. 411-424, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1007/s40090-017-0130-3>

[33] BRYDSON, J. A. *Plastics Materials*. 7. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1999. ISBN 978-0-7506-4132-6.

[34] RABELLO, M. S. *Aditivação de Polímeros*. 3. ed. São Paulo: Artliber, 2019. ISBN 9788587616767.

[35] CAETANO, M.J.L. *Ciência e Tecnologia da Borracha. Borracha de polibutadieno (BR)*. Portugal: 2023. Disponível em: <https://www.ctborracha.com/borracha-sintese-historica/materias-primas/borrachas/borrachas-sinteticas/borracha-de-polibutadieno-br/>. Acessado em: 23 jun.2024.

[36] ROVERE, J.; CORREA, C.A.; GRASSI, V.G.; DAL PIZZOL, M.F. Caracterização morfológica do poliestireno de alto impacto (HIPS). *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v.18, n.1, p.12-19, 2008. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/po/a/qV6WkNm54bRNjLw5RKNXMNy/?format=pdf&lang=pt>. Acessado em: 30 ago. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0104-14282008000100007>.

[37] SHORT, J. N.; KRAUS, G.; ZELINSKI, R. P.; NAYLOR, F. E. Polybutadienes of controlled cis, trans and vinyl structures. *Rubber Chemistry and Technology*, v. 32, n. 2, p. 614-627, 1959. DOI: <https://doi.org/10.5254/1.3542428>.

[38] COUTINHO, F.M.B.; GUIMARÃES, M.J.O.C.; SOARES, B.G. Estudo comparativo de diferentes tipos de polibutadieno na tenacificação de poliestireno. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, vol. 17, n.4, p.318-324, 2007. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0104-14282007000400011&lng=pt&tlng=pt. Acessado em: 25 jul. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0104-14282007000400011>.

[39] NUNES, D.S.S.; COUTINHO, F.M.B.; MELLO, I.L. Principais Aspectos da Polimerização do 1,3-Butadieno. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, vol. 15, n.4, p. 296-305, 2005. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/po/a/RwZCTx6mQcvnLNgMH8fxmyf/>. Acessado em: 20 set.2024. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0104-14282005000400015>.

- [40] FRANTA, I. Elastomers and rubber compounding materials. Amsterdam: Elsevier, 1989. ISBN 978-0-444-87348-0.
- [41] PIRES, N.M.T.; COSTA, M.A.S.; COUTINHO, F.M.B. Polimerização 1,4 - cis de Butadieno com o Sistema Catalítico Tetracloreto de Titânio/Triisobutilalumínio/Iodo. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v.10, n.4, p.230-237, 2000. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/po/a/Jt8ChB4XR6sbPsZHs4LNrQH/#:~:text=A%20massa%20molar%20do%20polibutadieno,na%20faixa%20de%20temperatura%20estudada>. Acessado em: 15 dez. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0104-14282000000400011>.
- [42] AVATEC Laudos e Perícias Técnicas. Negro de Fumo. Perícias técnicas. Boletim técnico -93. São Paulo: 2024. Disponível em: <https://avatec.com.br/negro-de-fumo/index.htm>. Acessado em: 15 set.2024.
- [43] PENTA CARBON. Carbon black. Haltern am See, Germany: s2025. Disponível em: <https://pentacarbon.de/wiki/>. Acessado em: 10 dez. 2024.
- [44] GOMES, M.M. Negro de carbono. Rubberpedia: all about rubber! Portal da indústria da borracha, 2023. Disponível em: <https://www.rubberpedia.com/negro-carbono.php#top>. Acessado em: 20 jun. 2024.
- [45] EVONIK INDUSTRIES. Carbon blacks – history and market. [S.l.]: Evonik Industries, 2022. Disponível em: <https://history.evonik.com/en/inventions/carbon-blacks>. Acessado em: 24 fev. 2025.
- [46] ASTM 3265-24a, Standard Test Method for Carbon Black – Tint Strength. ASTM - American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2024.
- [47] BIRLA CARBON. Negro de fumo 101. [S.l.]: Birla Carbon, 2025. Disponível em: <https://www.birlacarbon.com/pt-br/em-alta/negro-de-fumo-101/>. Acessado em: 23 jan. 2025.
- [48] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D1510-24b: Standard Test Method for Carbon Black—Iodine Adsorption Number. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2007. Disponível em: <https://compass.astm.org/content-access?contentCode=ASTM%7CD1510-24B%7Cen-US>. Acesso em: 22 dez. 2024.
- [49] ASTM 6556-21, Standard test method for carbon black – Total and external surface area by nitrogen adsorption. ASTM – American Society for Testing and Materials. West Conshohocken, PA, 2021. Disponível em: <https://compass.astm.org/content-access?contentCode=ASTM%7CD6556-21%7Cen-US>. Acesso em: 21 dez.2024.

- [50] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D2414-23a: Standard Test Method for Carbon Black—Oil Absorption Number (OAN). West Conshohocken, PA: ASTM International, 2007. Disponível em: <https://compass.astm.org/content-access?contentCode=ASTM%7CD2414-23A%7Cen-US>. Acesso em: 05 out. 2024.
- [51] CARDONA-URIBE, N.; BETANCUR, M.; MARTÍNEZ, J.D. Towards the chemical upgrading of the recovered carbon black derived from pyrolysis of end-of-life tires. *Sustainable Materials and Technologies*, v.28, 2021. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214993721000427>. Acessado em: 14 nov. 2024.
- [52] HOANG, A.T. et al. Perspective review on Municipal Solid Waste-to-energy route: Characteristics, management strategy, and role in circular economy. *Journal of Cleaner Production*, v.359, 2022. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652622015074/pdf?md5=987332cd736a8308af30381a35882a1d&pid=1-s2.0-S0959652622015074-main.pdf>. Acessado em: 27 dez. 2024.
- [53] YANG, F. et al. Upgrading the Pyrolysis Carbon Black from Waste Tire byHybridization with Cellulose. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v.61, p.6512-6520, 2022. Disponível em: https://pubs.acs.org/doi/epdf/10.1021/acs.iecr.2c00601?ref=article_openPDF. Acessado em: 11 nov.2024.
- [54] COSTA, H.M.; VISCONTE, L.L.Y.; NUNES, R.C.R; FURTADO, C.R.G. Aspectos históricos da vulcanização. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v.13, n.2, p.125-129, 2003. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/po/a/Czm3H6S7XGjNvwg3VXhNgPN/?lang=pt> Acesso em: 19 jul. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0104-14282003000200011>.
- [55] CORAN, A. Y.; MARK, J. E. Vulcanization. In: MARK, J. E.; ERMAN, B.; ROLAND, C. M. (eds.). *The Science and Technology of Rubber*. 4. ed. Amsterdam: Elsevier, 2013. p. 337-381. ISBN 978-0-12-394584-6.
- [56] GOMES, M.M. Introdução à vulcanização. *Rubberpedia: all about rubber! Portal da indústria da borracha*. Disponível em: <https://www.rubberpedia.com/vulcanizacao/vulcanizacao.php>. Acessado em: 20 jun. 2024.
- [57] HIRANOBE, C. T. Reciclagem de resíduo de poliuretano proveniente da indústria de refrigeradores como carga em compósitos de borrachas SBR/BN para aplicação industrial. Rosana, 2023. Tese de Doutorado. Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais. Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”. Disponível em:

<https://repositorio.unesp.br/entities/publication/0baa9928-410c-4709-85b2-25c41266e8ed>. Acesso em: 18 fev. 2024.

[58] HEIBER, G. R.; COOKE, R. F. Vulcanization in Elastomers. 1. ed. New York: Elsevier, 2005. ISBN 9780444518234.

[59] TAYLOR, P. R.; CLEWETT, R. A. A.; RODRIGUEZ, N. Kinetics and Mechanisms of Vulcanization in Sulfur-Cured Butadiene Rubber. Rubber Chemistry and Technology, v. 93, n. 4, p. 554-567, out./dez. 2020. DOI: <https://doi.org/10.5254/rct.20.80443>.

[60] LIU, Y.; ZHANG, X.; LI, B. Influence of Accelerator Type on the Cure Behavior and Crosslink Network of High-cis Polybutadiene Rubber. Polymer Testing, v. 82, artigo 106267, jun. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2020.106267>.

[61] SANTOS, Renivaldo José. Obtenção de compósitos de borracha natural com resíduo industrial de couro reticulados com diferentes peróxidos. Tese de Doutorado. Faculdade de Ciências, Bauru, 2014. Disponível em: <https://repositorio.unesp.br/entities/publication/64c82eca-eb2d-43fe-af09-f13d366312dd>. Acessado em: 13 mai. 2023.

[62] LARPKASEMSEK, A.; RAKSAKSRI, L.; CHUAYJULJIT, S.; CHAIWUTTHINAN, P.; BOONMAHITHTHISUD, A. Effects of sulfur vulcanization system on cure characteristics, physical properties and thermal aging of epoxidized natural rubber. Journal of Metals, Materials and Minerals, v.29, n.1, 2019. DOI: <https://doi.org/10.14456/jmmm.2019.8>.

[63] The Influence of Curing Systems on the Cure Characteristics and Physical Properties of Styrene–Butadiene Elastomer. Materials, v. 13, n. 23, art. 5329, 2020. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma13235329>.

[64] *A chemical interpretation for the post-reversion upturn in the natural rubber/accelerated sulfur system based on the viscoelastic properties and cross-link density measurements*. Polymer Bulletin, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00289-024-05292-z>.

[65] Rubber Vulcanization. Learnbin. S.I., [s. n.], 2021. Disponível em: <https://learnbin.net/rubber-vulcanization/>. Acesso em: 10 out. 2024.

[66] HAMED, G. R. The Science and Technology of Rubber. 3. ed. New York: Academic Press, 2000. ISBN 978-0124647860.

- [67] BLOW, C. M.; HEPBURN, C. Rubber Technology and Manufacture. 2. ed. London: Butterworths, 2009. ISBN 978-0408002101.
- [68] MARK, J. E.; ERMAN, B.; EIRICH, F. R. Science and Technology of Rubber. 4. ed. Amsterdam: Elsevier, 2013. ISBN 978-0123945844.
- [69] XU, M. et al. Synergistic effect by polyethylene glycol as interfacial modifier in green-tire tread composites. *Polymers*, v. 13, n. 5, art. 788, 2021. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym13050788>.
- [70] KRUŽELÁK, J. et al. Influence of plasticizers on cross-linking process of rubber compounds. *Polymers*, v. 17, n. 3, art. 393, 2025. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym17030393>.
- [71] WU, C. *et al.* Study on mechanical properties and failure mechanisms of highly filled HTPB propellant with PEG plasticizer. *Polymers*, v. 15, n. 19, art. 3869, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym15193869>.
- [72] ROJAS, R. Neural networks: a systematic introduction. Berlin: Springer-Verlag, 1996. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-61068-4>.
- [73] SILVA, I. N.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A.; LIBONI, L. H. B. Artificial neural networks: a practical course. Cham: Springer, 2017.
- [74] XIAO, S.; LI, J.; BORDAS, S. P. A.; KIM, T. Y. Artificial neural networks and their applications in computational materials science: a review and a case study. *Advances in Applied Mechanics*, v. 57, p. 1–68, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.aams.2023.09.001>.
- [75] HAYKIN, S. Neural networks and learning machines. 3. ed. Upper Saddle River: Pearson Education, 2009. ISBN 9780131471399.
- [76] IBM. O que é uma rede neural? Disponível em: <https://www.ibm.com/br-pt/topics/neural-networks>. Acessado em: 20 jan 2025.
- [77] KANDEL, E. R.; SCHWARTZ, J. H.; JESSELL, T. M.; SIEGELBAUM, S. A.; HUDSPETH, A. J. Principles of neural science. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2013. ISBN 9780071810012.
- [78] BEAR, M. F.; CONNORS, B. W.; PARADISO, M. A. Neurociências: desvendando o sistema nervoso. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2017. ISBN 978-85-8271-353-6.

- [79] BRUCEBLAUS. Multipolar neuron. 2014. Imagem digital. Disponível em: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/10/Blausen_0657_MultipolarNeuron.png. Acesso em: 30 mar. 2025.
- [80] COLLMAN, Forrest; ALLEN INSTITUTE; ASSOCIATED PRESS. A digital representation of neurons in a section of a mouse's brain. In: THE GUARDIAN. US scientists create most comprehensive circuit diagram of mammalian brain. Londres: The Guardian, 9 abr. 2025. Imagem digital. Disponível em: <https://www.theguardian.com/science/2025/apr/09/us-scientists-create-most-comprehensive-circuit-diagram-of-mammalian-brain>. Acesso em: 30 mar. 2025.
- [81] RIBEIRO, T. R.; OLIVEIRA, F. H. L. Development of friction coefficient prediction models for Brazilian runways using Artificial Neural Networks. TRANSPORTES, v. 31, n. 2, e2792, ago. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.58922/transportes.v31i2.2792>. Acesso em: 3 jun. 2025.
- [82] AGGARWAL, C. C. Neural networks and deep learning: a textbook. Cham: Springer, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-94463-0>.
- [83] GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. Deep learning. Cambridge, MA: MIT Press, 2017. ISBN 9780262035613.
- [84] BISHOP, C. M. Neural networks for pattern recognition. Oxford: Oxford University Press, 1995. DOI: <https://doi.org/10.1093/oso/9780198538493.001.0001>.
- [85] ZHANG, Q.; YANG, L. T.; CHEN, Z.; LI, P. A survey on deep learning for big data. Information Fusion, v. 42, p. 146–157, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.inffus.2017.10.006>.
- [86] HAYKIN, S. Neural Networks and Learning Machines. 3rd ed. Upper Saddle River: Pearson Education, 2009. ISBN 978-0131471399.
- [87] RUSSELL, S. J.; NORVIG, P. Artificial Intelligence: A Modern Approach. 4th ed. Hoboken: Pearson, 2021. ISBN 978-0134610993.
- [88] LIPTON, Z. C.; BERKOWITZ, J.; ELKAN, C. A Critical Review of Recurrent Neural Networks for Sequence Learning. arXiv preprint, arXiv:1506.00019, 2015. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1506.00019>.
- [89] LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. Deep learning. Nature, v. 521, p. 436–444, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature14539>.

- [90] BEJANI, M. M. A systematic review on over-fitting control in shallow and deep neural networks. *Artificial Intelligence Review*, v. 54, n. 9, p. 7141-7177, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10462-021-09975-1>.
- [91] SRIIVASTAVA, N.; HINTON, G.; KRIZHEVSKY, A.; SUTSKEVER, I.; SALAKHUTDINOV, R. Dropout: A simple way to prevent neural networks from over-fitting. *Journal of Machine Learning Research*, v. 15, p. 1929-1958, 2014. DOI: <https://doi.org/10.5555/2627435.2670313>.
- [92] KAYRI, M. Predictive abilities of Bayesian Regularization and Levenberg–Marquardt algorithms in artificial neural networks: a comparative empirical study on social data. *Mathematical and Computational Applications*, v. 21, p. 20, 2016. DOI: <https://doi.org/10.3390/mca21020020>.
- [93] THE MATHWORKS INC. MATLAB R2024b Documentation. 2024. Disponível em: https://www.mathworks.com/help/index.html?s_tid=CRUX_lftnav. Acesso em: 15 fev. 2025.
- [94] BARBOSA, D. A. M.; FERREIRA, V. H. Inferência bayesiana aplicada a MLPs para previsão probabilística de carga semanal. *Anais do Simpósio Brasileiro de Sistemas Elétricos*, v. 1, n. 1, 2020. DOI: <https://doi.org/10.48011/sbse.v1i1.2260>.
- [95] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D1646-19a: Standard Test Methods for Rubber – Viscosity, Stress Relaxation, and Pre-Vulcanization Characteristics (Mooney Viscometer). West Conshohocken, PA: ASTM International, 2019. Disponível em: <https://compass.astm.org/content-access?contentCode=ASTM%7CD1646-19A%7Cen-US>. Acesso em: 12 dez. 2024.
- [96] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D5667-21: Standard Test Method for Rubber From Synthetic Sources—Total and Water Soluble Ash. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2021. Disponível em: <https://compass.astm.org/content-access?contentCode=ASTM%7CD5667-21%7Cen-US>. Acesso em: 14 dez. 2024.
- [97] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D1513-05(2023): Standard Test Method for Carbon Black, Pelleted – Pour Density. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2007. Disponível em: <https://compass.astm.org/content-access?contentCode=ASTM%7CD1513-05R23%7Cen-US>. Acesso em: 26 ago. 2024.
- [98] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D3182-21a: Standard practice for rubber – materials, equipment, and procedures for mixing standard compounds and preparing standard vulcanized sheets. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2007. Disponível em:

<https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD3182-21A%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.

[99] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D412-16 (2021): Standard test methods for vulcanized rubber and thermoplastic elastomers – tension. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2021. Disponível em: <https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD0412-16R21%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.

[100] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D624-00 (2020): Standard test method for tear strength of conventional vulcanized rubber and thermoplastic elastomers. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2020. Disponível em: <https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD0624-00R20%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.

[101] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D2084-19a: Standard test method for rubber property – vulcanization using oscillating disk cure meter. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2019. Disponível em: <https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD2084-19A%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.

[102] LEE, B. L. Reinforcement of uncured and cured rubber composites and its relationship to dispersive mixing: an interpretation of cure meter rheographs of carbon black loaded SBR and cis-polybutadiene compounds. Rubber Chemistry and Technology, v. 52, n. 5, p. 1019–1029, 1979. DOI: <https://doi.org/10.5254/1.3535250>.

[103] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D297-21: Standard test methods for rubber products – chemical analysis. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2021. Disponível em: <https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD0297-21%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.

[104] TODOROVA, N. et al. Zinc resinate's influence on the properties of silica filled composites based on natural rubber. Journal of Chemical Technology and Metallurgy, v. 49, n. 3, p. 213–219, 2014. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/280774526_Zinc_resinate's_influence_on_the_properties_of_silica_filled_composites_based_on_natural_rubber. Acesso em: 18 set. 2024.

[105] MAZORCA, A. J.; GARRAZA, A. L. R.; MANSILLA, M. A. Evaluation of the polymer–solvent interaction parameter χ for the system cured polybutadiene rubber and toluene. Polymer Testing, v. 29, p. 119–126, 2010. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.polymertesting.2009.09.013>.

- [106] ASTM INTERNATIONAL. ASTM D2240-15 (2021): Standard test method for rubber property – durometer hardness. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2021. Disponível em: <https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD2240-15R21%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.
- [107] FRÖHLICH, J.; NIEDERMEIER, W.; LUGINSLAND, H.-D. The effect of filler–filler and filler–elastomer interaction on rubber reinforcement. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, v. 36, n. 4, p. 449–460, 2005. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compositesa.2004.10.004>.
- [108] ASTM INTERNATIONAL. ASTM 5963-22: Standard test method for rubber property – abrasion resistance (rotary drum abrader). West Conshohocken, PA: ASTM International, 2022. Disponível em: <https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CD5963-22%7Cen-US>. Acesso em: 30 out. 2024.
- [109] TITO, E. A. H. Aprendizado bayesiano para redes neurais. 2009. Tese (Doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009. Disponível em: https://bdtd.ibict.br/vufind/Record/PUC_RIO-1_4624b3900f55363cffd586979deb7a90. Acesso em: 11 fev. 2024.
- [110] MADHIARASAN, M.; LOUZAZNI, M. Analysis of artificial neural network: architecture, types, and forecasting applications. *Journal of Electrical and Computer Engineering*, v. 2022, p. 5416722, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1155/2022/5416722>.
- [111] PADMAVATHI, G.; MANDAN, M. G.; MITRA, S. P.; CHAUDHURI, K. K. Neural modelling of Mooney viscosity of polybutadiene rubber. *Computers & Chemical Engineering*, v. 29, n. 7, p. 1677–1685, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2005.02.028>.
- [112] ABDOLLAHZADEH, A.; MUKHLISIN, M.; EL SHAFIE, A. Predict soil erosion with artificial neural network in Tanakami (Japan). *WSEAS Transactions on Computers*, v. 10, n. 2, p. 51–60, 2011. Disponível em: https://www.researchgate.net/profile/Muhammad-Mukhlisin/publication/262393610_Predict_soil_erosion_with_artificial_neural_network_in_Tanakami_Japan/links/55cb063908aea2d9bdcc1538/Predict-soil-erosion-with-artificial-neural-network-in-Tanakami-Japan.pdf. Acesso em: 18 fev. 2025.
- [113] ALMALIKI, S.; ALIMARDANI, R.; OMID, M. Artificial neural network based modeling of tractor performance at different field conditions. *CIGR Journal*, v. 18, n. 4, p. 262–274, 2016. Disponível em: <https://cigrjournal.org/index.php/Ejournal/article/view/3880>. Acesso em: 18 fev. 2025.

- [114] REZAZADEH EIDGAHEE, D.; HADDAD, A.; NADERPOUR, H. Evaluation of shear strength parameters of granulated waste rubber using artificial neural networks and group method of data handling. *Scientia Iranica*, v. 26, n. 6, p. 3233–3244, 2019. DOI: <https://doi.org/10.24200/sci.2018.5663.1408>.
- [115] ONOJI, S. E. et al. Hevea brasiliensis (rubber seed) oil: modeling and optimization of extraction process parameters using response surface methodology and artificial neural network techniques. *Biofuels*, v. 10, n. 6, p. 677–691, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1080/17597269.2017.1338122>.
- [116] ABDELKAREEM, M. A. et al. Progress of artificial neural networks applications in hydrogen production. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 182, p. 66–86, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.03.030>.
- [117] ABDELSALAM, A. A. et al. Effect of carbon black loading on mechanical and rheological properties of natural rubber/styrene-butadiene rubber/nitrile butadiene rubber blends. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, v. 34, n. 4, p. 490–507, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1177/0892705719844556>.
- [118] WETCHAKAMA, P. et al. Characterization and utilization of cacao shell powder as a biofiller in natural rubber composite. *Journal of Materials Research and Technology*, v. 30, p. 9130–9139, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.06.005>.
- [119] AHMED, N. M.; EL-SABBAGH, S. H. The influence of kaolin and calcined kaolin on SBR composite properties. *Polymer Composites*, v. 35, n. 3, p. 37–43, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1002/pc.22697>.
- [120] DIJKHUIS, K. A. J.; NOORDERMEER, J. W. M.; DIERKES, W. K. The relationship between crosslink system, network structure and material properties of carbon black reinforced EPDM. *European Polymer Journal*, v. 45, n. 11, p. 3302–3312, 2009. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2009.06.029>.
- [121] KIM, D. Y. et al. Correlation between the crosslink characteristics and mechanical properties of natural rubber compound via accelerators and reinforcement. *Polymers*, v. 12, p. 2020, 2020. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym12092020>.
- [122] CRUZ, M. A. G. et al. Artificial neural network modeling for predicting the carbon black content derived from unserviceable tires for elastomeric composite production. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 141, n. 37, e55951, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1002/app.55951>.
- [123] RIBEIRO, G. D. et al. Sustainable construction materials for low-cost housing: thermal insulation potential of expanded SBR composites with leather waste. *Journal*

of Materials Research and Technology, v. 30, p. 5590–5604, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.04.234>.

[124] PHOMRAK, S. et al. Natural rubber latex foam reinforced with micro- and nanofibrillated cellulose via dunlop method. *Polymers*, v. 12, p. 1959, 2020. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym12091959>.

[125] DWIVEDI, C.; MANJARE, S.; RAJAN, S. K. Recycling of waste tire by pyrolysis to recover carbon black: alternative & environment-friendly reinforcing filler for natural rubber compounds. *Composites Part B: Engineering*, v. 200, 108346, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.108346>.

[126] NORRIS, C. J.; LÓPEZ CERDÁN, A.; TER HAAR, P. Understanding recovered carbon black. *Rubber Chemistry and Technology*, v. 96, n. 2, p. 196–213, 2023. DOI: <https://doi.org/10.5254/rct.23.76956>.

ANEXOS

ANEXO I – TRABALHOS PUBLICADOS NO PERÍODO

MUKUNO, Jeferson Shiguemi; DOS SANTOS, Marcos Alves; RIBEIRO, Gabriel Deltrejo; SOUZA, Dener da Silva; SILVA, Erivaldo Antônio; PINTO, Leandro Ferreira; CARDIM, Henrique Pina; DA SILVA, Michael Jones; CABRERA, Flávio Camargo; CARDIM, Guilherme Pina; HIRANOBE, Carlos Toshiyuki; DOS SANTOS, Renivaldo José. Application of artificial neural networks in the development of elastomeric composite formulations with recovered carbon black from end-of-life tires. Journal of Materials Research and Technology, v.39, 2025, p.5922-5936. ISSN 2238-7854. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.10.196>.

RIBEIRO, G. D.; HIRANOBE, C. T.; ARAÚJO, S. S.; FILGUEIRA, M. S.; ROCHA, J. A.; MUKUNO, Jefferson S.; SALMAZO, L.O.; GOMES, A. SS.; TOLOSA, G. R.; GENNARO, E. M.; JOB, A. EE.; RODRÍGUEZ PÉREZ, M.A.; SANTOS, R. J. Sustainable construction materials for low-cost housing: thermal insulation potential of expanded SBR composites with leather waste. Journal of Materials Research and Technology-JMR&T, v. 1, p. 5590-5604, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.04.234>.

BIGOLOTI, P. R. M.; BALDO, T. A.; GENNARO, E. M.; HIRANOBE, C. T.; MUKUNO, J. S.; CARDIM, H. P.; KAWALL, S. A.; HIRANOBE, M. F.; SOUZA, D. S.; SOUZA, G. H. B.; SILVA, M. J.; CARDIM, G. P.; CABRERA, F. C.; SILVA, E. A.; SANTOS, R. J. Integrating CLSP and GLSP models for optimizing production batch sizes in vulcanized component manufacturing. Delos: Desarrollo Local Sostenible, v. 17, p. e2282, 2024. DOI: <https://doi.org/10.55905/rdelosv17.n60-085>.

ROCHA, J. A.; HIRANOBE, C. T.; HIRANOBE, M. F.; ARAÚJO, S. S.; FILGUEIRA, M. S.; RIBEIRO, G. D.; CARDIM, H. P.; MUKUNO, J. S.; SILVA, J. F. R.; ANDOLFATO, R. P.; CAMACHO, J. S.; SANTOS, R. J. Strategic diagnosis for improvements in the execution of structural masonry. Journal of Engineering Research, v. 4, p. 1-16, 2024. DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.3174132429043>.

ANEXO II – PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS NO PERÍODO

MUKUNO, J. S.; CARDIM, H. P.; PAIM, L. L.; SILVA, M. J.; CARDIM, G. P.; CABRERA, F. C.; SANTOS, R. J. Rheometric and mechanical characterization of polybutadiene and unusable truck tires recovered carbon black composites. XXII BMR-S (Brazilian Materials Research Society) Meeting. Santos, 2024. (Pôster).

MUKUNO, J. S.; CARDIM, H. P.; SOUZA, D. S.; DA SILVA, M. J.; CABRERA, F. C.; CARDIM, G. P.; HIRANOBE, C. T.; DOS SANTOS, R. J. Predictive modeling of mechanical and rheological properties of polybutadiene with recovered carbon black using artificial neural networks. 18º. CBPol Congresso Brasileiro de Polímeros – 18th Brazilian Polymer Conference. Campos do Jordão, 2025. (Pôster).





BRAZILIAN POLYMER CONFERENCE

Campos do Jordão/SP - Brazil
October 19th to 23rd
2025



Certificate

This is to certify that

Jeferson Shiguemi Mukuno

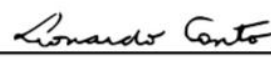
has delivered a **Pôster (Abstract)** presentation of the work titled **PREDICTIVE MODELING OF MECHANICAL AND RHEOLOGICAL PROPERTIES OF POLYBUTADIENE WITH RECOVERED CARBON BLACK USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS**, authored by **Jeferson Shiguemi Mukuno, Henrique Pina Cardim, Michael Jones da Silva, Flávio Camargo Cabrera, Guilherme Pina Cardim, Carlos Toshiyuki Hiranobe, Dener da Silva Souza and Renivaldo José dos Santos**, at the 18th Brazilian Polymer Conference (CBPol), held in Campos do Jordão, São Paulo, Brazil, from October 19 to 23, 2025.



Prof. Guilhermino J. M. Fechine
Chair



Prof. Denise F. S. Petri
Scientific Coordinator



Prof. Leonardo B. Canto
President of ABPol

ANEXO III – PREMIAÇÃO OBTIDA NO PERÍODO

MUKUNO, J. S.; CARDIM, H. P.; SOUZA, D. S.; DA SILVA, M. J.; CABRERA, F. C.; CARDIM, G. P.; HIRANOBE, C. T.; DOS SANTOS, R. J. *Predictive modeling of mechanical and rheological properties of polybutadiene with recovered carbon black using artificial neural networks*. 18°. CBPol (Congresso Brasileiro de Polímeros - Brazilian Polymer Conference). Campos do Jordão, 2025. (Pôster). Menção honrosa.

