



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

ENGENHARIA DE MATERIAIS

**AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO MECÂNICO DE NANOCOMPÓSITOS
EXTRUDADOS DE POLI (ÁCIDO LÁTICO) /NANOCRISTAIS DE CELULOSE
USANDO MODELO PREDITIVO BASEADO EM REDE NEURAS ARTIFICIAIS**

JORGE HERNANDO TOBÓN LÓPEZ

Foz do Iguaçu
2024



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

ENGENHARIA DE MATERIAIS

**AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO MECÂNICO DE NANOCOMPÓSITOS
EXTRUDADOS DE POLI (ÁCIDO LÁTICO) /NANOCRISTAIS DE CELULOSE
USANDO MODELO PREDITIVO BASEADO EM REDE NEURAIS ARTIFICIAIS**

JORGE HERNANDO TOBÓN LÓPEZ

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Materiais.

Orientador: Prof. Dra. Liliane Cristina Battirola

Coorientador: Prof. Dr. Joylan Nunes Maciel

Foz do Iguaçu
2024

JORGE HERNANDO TOBÓN LÓPEZ

**AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO MECÂNICO DE NANOCOMPÓSITOS
EXTRUDADOS DE POLI (ÁCIDO LÁCTICO) /NANOCRISTAIS DE CELULOSE
USANDO MODELO PREDITIVO BASEADO EM REDE NEURAIAS ARTIFICIAIS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Materiais.

BANCA EXAMINADORA

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Cristina Battirola
UNILA

Coorientador: Prof. Dr. Joylan Nunes Maciel
UNILA

Profa. Dra. Priscila Lemes
UNILA

Prof. Dr. Willian Zalewski
UNILA

Foz do Iguaçu, 18 de dezembro de 2024.

TERMO DE SUBMISSÃO DE TRABALHOS ACADÊMICOS

Nome completo do autor: Jorge Hernando Tobón López

Curso: Engenharia de Materiais

Tipo de Documento

graduação

artigo

especialização

trabalho de conclusão de curso

mestrado

monografia

doutorado

dissertação

tese

CD/DVD – obras audiovisuais

Título do trabalho acadêmico: **AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO MECÂNICO DE NANOCOMPÓSITOS EXTRUDADOS DE POLI (ÁCIDO LÁTICO)/NANOCRISTAIS DE CELULOSE USANDO MODELO PREDITIVO BASEADO EM REDE NEURAS ARTIFICIAIS**

Nome da orientadora: Liliane Cristina Battirola

Nome da Coorientador: Joylan Nunes Maciel

Data da Defesa: 18/12/2024

Licença não-exclusiva de Distribuição

O referido autor(a):

(a) Declara que o documento entregue é seu trabalho original, e que o detém o direito de conceder os direitos contidos nesta licença. Declara também que a entrega do documento não infringe, tanto quanto lhe é possível saber, os direitos de qualquer outra pessoa ou entidade.

(b) Se o documento entregue contém material do qual não detém os direitos de autor, declara que obteve autorização do detentor dos direitos de autor para conceder à UNILA – Universidade Federal da Integração Latino- Americana os direitos requeridos por esta licença, e que esse material cujos direitos são de terceiros está claramente identificado e reconhecido no texto ou conteúdo do documento entregue.

Se o documento entregue é baseado em trabalho financiado ou apoiado por outra instituição que não a Universidade Federal da Integração Latino-Americana, declara que cumpriu quaisquer obrigações exigidas pelo respectivo contrato ou acordo.

Na qualidade de titular dos direitos do conteúdo supracitado, o autor autoriza a Biblioteca Latino- Americana – BIUNILA a disponibilizar a obra, gratuitamente e de acordo com a licença pública *Creative Commons Licença 3.0 Unported*.

Foz do Iguaçu, 18 de dezembro de 2024.

Assinatura do Responsável

Dedico este trabalho ao meu pai, HERNANDO, que dedicou a sua vida para que eu pudesse estar aqui e a minha mãe, LÚCIA, que nunca me permitiu desistir dos meus sonhos.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a minha família, por acreditarem no meu potencial e pelos gestos que sem dúvidas fizeram a diferença para mim e me ajudaram a seguir adiante.

Agradeço aos meus professores e orientadores pelos conselhos e contribuições ao meu desenvolvimento acadêmico. Em especial, agradeço à Profa. Dr. Liliane Cristina Battirola e, o Prof. Dr. Joylan Nunes Maciel por toda a ajuda, disponibilidade, confiança e palavras de apoio que fizeram possível realização desse trabalho.

Agradeço a banca presente pelo tempo disponibilizado para as devidas correções e dicas que com certeza irão enriquecer o meu trabalho.

Agradeço as pessoas mais próximas a mim, que me acompanharam durante todo o processo, dentro e fora da faculdade. Também aos colegas de curso que de forma direta ou indireta contribuíram para que eu pudesse chegar até aqui.

Gratidão a UNILA pela oportunidade de ensino de qualidade sem fronteiras, por nos permitir crescer não só como discentes, mas também como humanos.

RESUMO

A crescente demanda por materiais sustentáveis e de alto desempenho tem impulsionado o interesse no uso de ferramentas avançadas, como Redes Neurais Artificiais (RNAs), no desenvolvimento de biocompósitos. Essas ferramentas permitem prever as propriedades dos materiais, como aqueles que combinam o Poli(ácido láctico) (PLA), um polímero biodegradável amplamente utilizado em diferentes campos da engenharia, e nanocristais de celulose (NCC), um reforço renovável com propriedades relevantes. O objetivo foi explorar o uso de Redes Neurais Artificiais (RNAs) para prever o comportamento e as propriedades mecânicas de nanocompósitos de PLA/NCC, preparados por processos de extrusão e injeção. O estudo detalha a preparação de nanocompósitos de PLA reforçados com NCC, seguida de ensaios de tração para avaliar suas propriedades mecânicas, na sequência, modelos matemáticos baseados em RNAs são explorados para previsão do comportamento e das propriedades mecânicas. Os resultados e contribuições indicam que a adição de NCCs, na composição escolhida (1%, 3% e 5% de NCC em massa), impacta negativamente nas propriedades de tração, incluindo o módulo de Young (redução de 25% em média, comparado ao PLA puro), conforme evidenciado pela matriz de correlação de Pearson. Isso sugere que a incorporação de partículas rígidas, abaixo do limite de percolação, reduz a capacidade de deformação do PLA, prejudicando suas propriedades finais. Um modelo preditivo de rede neural foi desenvolvido e aplicado para modelar as curvas tensão-deformação, permitindo a previsão precisa de parâmetros mecânicos como tensão máxima, módulo de Young e alongamento máximo. Os resultados mostram que o modelo de RNA exibiu valores de RMSE (*Root Means Squared Error*) próximo de zero e R^2 de 0,999, demonstrando uma alta correspondência entre valores preditos e experimentais, bem como uma adequada precisão do modelo e a eficiência das RNAs na predição do comportamento e propriedades dos nanocompósitos. Outra contribuição deste estudo foi o desenvolvimento de um software para calcular os parâmetros que caracterizam as propriedades das curvas do ensaio de tração. A aplicação do modelo de RNA e do software desenvolvido, mostrou-se uma alternativa eficiente para reduzir a necessidade de extensos experimentos físicos, economizando tempo, custos e recursos na caracterização destes materiais. Além disso, a abordagem utilizada pode ser empregada em outros tipos de materiais.

Palavras-chave: poli(ácido láctico), nanocristais de celulose, Rede Neural Artificial, comportamento mecânico.

RESUMEN

La creciente demanda de materiales sostenibles y de alto rendimiento ha impulsado el interés en el uso de herramientas avanzadas, como Redes Neuronales Artificiales (RNAs), en el desarrollo de biocompuestos. Estas herramientas permiten predecir las propiedades de los materiales, como aquellos que combinan el Poli(ácido láctico) (PLA), un polímero biodegradable ampliamente utilizado en diferentes campos de la ingeniería, y nanocristales de celulosa (NCC), un refuerzo renovable con propiedades relevantes. El objetivo fue explorar el uso de Redes Neuronales Artificiales (RNAs) para predecir el comportamiento y las propiedades mecánicas de nanocompuestos de PLA/NCC, preparados mediante procesos de extrusión e inyección. El estudio detalla la preparación de nanocompuestos de PLA reforzados con NCC, seguida de ensayos de tracción para evaluar sus propiedades mecánicas. Posteriormente, se exploran modelos matemáticos basados en RNAs para predecir el comportamiento y las propiedades mecánicas. Los resultados y contribuciones indican que la adición de NCCs, en la composición elegida (1%, 3% y 5% en masa de NCC), impacta negativamente las propiedades de tracción, incluyendo el módulo de Young (reducción promedio del 25% en comparación con el PLA puro), como lo evidencia la matriz de correlación de Pearson. Esto sugiere que la incorporación de partículas rígidas, por debajo del límite de percolación, reduce la capacidad de deformación del PLA, perjudicando sus propiedades finales. Se desarrolló y aplicó un modelo predictivo de red neuronal para modelar las curvas tensión-deformación, lo que permitió predecir con precisión parámetros mecánicos como la tensión máxima, el módulo de Young y el alargamiento máximo. Los resultados muestran que el modelo de RNA exhibió valores de RMSE (Root Mean Squared Error) cercanos a cero y un R^2 de 0,999, demostrando una alta correspondencia entre valores predichos y experimentales, así como una adecuada precisión del modelo y la eficiencia de las RNAs en la predicción del comportamiento y propiedades de los nanocompuestos. Otra contribución de este estudio fue el desarrollo de un software para calcular los parámetros que caracterizan las propiedades de las curvas del ensayo de tracción. La aplicación del modelo de RNA y del software desarrollado se mostró como una alternativa eficiente para reducir la necesidad de extensos experimentos físicos, ahorrando tiempo, costos y recursos en la caracterización de estos materiales. Además, el enfoque utilizado puede emplearse en otros tipos de materiales.

Palabras clave: poli(ácido láctico), nanocristales de celulosa, red neuronal artificial, comportamiento mecánico.

ABSTRACT

The growing demand for sustainable and high-performance materials has driven interest in the use of advanced tools, such as Artificial Neural Networks (ANNs), in the development of biocomposites. These tools enable the prediction of material properties, such as those combining Poly(lactic acid) (PLA), a biodegradable polymer widely used in various engineering fields, and cellulose nanocrystals (NCC), a renewable reinforcement with relevant properties. The objective was to explore the use of Artificial Neural Networks (ANNs) to predict the behavior and mechanical properties of PLA/NCC nanocomposites, prepared through extrusion and injection processes. The study details the preparation of PLA nanocomposites reinforced with NCC, followed by tensile tests to evaluate their mechanical properties. Subsequently, mathematical models based on ANNs are explored to predict the behavior and mechanical properties. The results and contributions indicate that the addition of NCCs, in the chosen composition (1%, 3%, and 5% mass of NCC), negatively impacts tensile properties, including the Young's modulus (average reduction of 25% compared to pure PLA), as evidenced by the Pearson correlation matrix. This suggests that incorporating rigid particles below the percolation threshold reduces PLA's deformation capacity, impairing its final properties. A predictive neural network model was developed and applied to model stress-strain curves, enabling the accurate prediction of mechanical parameters such as maximum stress, Young's modulus, and maximum elongation. The results show that the ANN model exhibited RMSE (Root Mean Squared Error) values close to zero and an R^2 of 0.999, demonstrating a high correlation between predicted and experimental values, as well as the model's adequate precision and the efficiency of ANNs in predicting the behavior and properties of nanocomposites. Another contribution of this study was the development of software to calculate the parameters characterizing the properties of the tensile test curves. The application of the ANN model and the developed software proved to be an efficient alternative to reducing the need for extensive physical experiments, saving time, costs, and resources in the characterization of these materials. Moreover, the approach used can be employed in other types of materials.

Keywords: poly(lactic acid), cellulose nanocrystals, Artificial Neural Network, mechanical behavior.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Representação de nanocompósito polimérico com nanopartículas.....	19
Figura 2 - Estrutura do monômero PLA.	21
Figura 3 - (a) Esquema da estrutura cristalina e amorfa da celulose e (b) micrografia de nanocristais de celulose.....	22
Figura 4 - Etapas do processo de extração da (a) fibrilas de celulose e dos (b). nanocristais de celulose.....	23
Figura 5 - Modificação dos NCC: De Hidrofílico a Hidrofóbico por Modificação Química.	24
Figura 6 - Representação de um neurônio artificial.	28
Figura 7 - Fluxograma da avaliação experimental.	31
Figura 8 - Curvas de tensão-deformação experimentais para o PLA puro e os nanocompósitos. Inset apresentando uma curva teórica do perfil de comportamento mecânico de um polímero termoplástico, evidenciando a região elástica e plástica de deformação.....	34
Figura 9 - Fotografias dos corpos de prova do (a) PLA puro, e dos nanocompósitos (b) PLA/NCC1, (c) PLA/NCC3 e (d) PLA/NCC5.....	35
Figura 10 - Matriz de Correlação Pearson entre composição e propriedades mecânicas.	37
Figura 11 - Média e desvio padrão da precisão RMSE para cada tipo de compósito: (a) tensão (MPa) e (b) deformação (%).	40
Figura 12 - Curvas de tensão-deformação experimentais (linha sólida) e previstas (linha pontilhada) dos materiais preparados.....	41
Figura 13 - Erro médio no cálculo dos parâmetros gerados pelo sistema proposto. (a) erros para cada grupo de nanocomposição (b) erro médio geral.	43
Figura 14 – Interface do software desenvolvido para cálculo dos parâmetros mecânicos dos nanocompósitos de PLA/NCCs.....	44
Figura 15 - Amostra de osso de cachorro ASTM D638.....	54

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Ajuste dos hiperparâmetros da rede neural artificial com Random Grid Search (selecionados em negrito).....	31
Tabela 2 - Propriedades mecânicas do PLA e dos nanocompósito PLA/NCC.....	35
Tabela 3 - Acurácia média geral do modelo para todos os nanocompósitos testados.	38
Tabela 4 – Acurácia de cada nanocompósito prevista a partir dos dados de teste.	39
Tabela 5 - Erros de parâmetros reais e gerados pelo modelo com os dados de teste.....	42
Tabela 6 - Código e composição de compósitos PLA/NCC.	53

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Acet	Acetona
Clorof	Clorofórmio
NCC	Nanocristais de celulose
PLA	<i>Poli(lactic acid)</i>
MAE	<i>Mean absolute error</i>
RMSE	<i>Root mean squared error</i>
R ²	<i>Coefficient of determination</i>
RNA	Rede neural artificial
MPa	Mega Pascales
CP	Corpo de prova
rpm	Revoluções por minuto
3CV	validação cruzada 3-fold
RGS	Random Grid Search

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	14
2 OBJETIVO	17
3 EMBASAMENTO TEÓRICO	18
3.1 COMPÓSITOS	18
3.1.1 NANOCOMPÓSITOS	18
3.1.2 BIOCOMPÓSITOS	19
3.2 POLI (ÁCIDO LÁTICO)	20
3.3 NANOCRISTAL DE CELULOSE	21
3.4 PROPRIEDADES MECÂNICAS	24
3.5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS.....	27
4 MATERIAIS E MÉTODOS	30
4.1 MODELO PREDITIVO.....	30
4.2 PARÂMETROS DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS.....	33
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	34
5.1 PROPRIEDADES MECÂNICAS	34
5.2 MODELO PREDITIVO DOS NANOCOMPÓSITOS.....	37
5.3 PARÂMETROS DE CARACTERIZAÇÃO DAS CURVAS.....	41
6 CONCLUSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS	46
REFERÊNCIAS	47
APÊNDICE I	53
I. PREPARAÇÃO NCC.....	53
II. PREPARAÇÃO DA MATRIZ NANOCRISTALINA DE CELULOSE CONCENTRADA	
53	
III. PREPARAÇÃO DE NANOCOMPÓSITO	54
IV. CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS	54

1 INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de compósitos poliméricos ganha destaque como um campo em constante evolução, beneficiando-se das tecnologias emergentes para a compreensão e otimização de suas propriedades. Nos últimos anos, o desenvolvimento de compósitos, tem desempenhado um papel essencial e impactante na transformação de diversas indústrias, especialmente na automotiva e a aeroespacial, onde a eficiência energética e a redução do consumo do combustível são essenciais, introduzindo materiais inovadores em substituição aos tradicionais (REZENDE; BOTELHO, 2000). Neste sentido, a substituição de materiais como madeira e aço tem acontecido pela utilização de materiais avançados com notável resistência específica, e menor densidade, como consequência, o peso total poderá ser reduzido em mais da metade em aeronaves (BEZERRAZ, 2013; BRITO et al., 2007). Desta forma, a compreensão e otimização das propriedades desses compósitos, abordando questões ambientais, buscando benefícios econômicos em diversas indústrias é de suma importância. O mercado global de compósitos poliméricos está em avanço, com uma previsão de crescimento de 11,8% entre 2016 e 2024. A taxa de crescimento prevista para o mercado global de biocompósitos é 9,59%, com uma avaliação alvo de 41 mil milhões de dólares até 2025 (BONNAR ANAK JORES et al., 2023).

A busca por materiais sustentáveis e de alto desempenho tem impulsionado o desenvolvimento de biopolímeros para substituir polímeros tradicionais derivados de fontes não renováveis (FORTUNA, 2020). Entre esses polímeros, o poli(ácido láctico) (do inglês *Poly(lactic acid)* - PLA) se destaca pela sua biodegradabilidade, biocompatibilidade, transparência, alto módulo elástico e resistência, sendo amplamente utilizado em embalagens, dispositivos biomédicos dentre outras aplicações. Entretanto, sua limitada estabilidade térmica, moderada propriedade de barreira a gás, baixa flexibilidade, baixa rigidez, baixa resistência ao impacto, taxa de cristalização lenta, fragilidade e sensibilidade à umidade, podem limitar seu uso para algumas aplicações. Para transpor esses problemas diferentes alternativas têm sido sugeridas, como por exemplo, orientação molecular, preparação de blendas e preparação de compósitos (LI et al., 2017; TAIB et al., 2023).

A preparação de compósitos poliméricos é altamente vantajosa do ponto de vista de ganho de propriedade mecânica e biodegradabilidade, especialmente se o reforço usado apresentar caráter renovável e biodegradável como é o caso dos nanocristais de celulose (NCC). Nos últimos anos, o uso de NCC como agente de reforço tem sido tema de extensa

pesquisa. Os NCCs apresentam elevada área superficial, cristalinidade e transparência ótica, além de propriedades mecânicas, térmicas e de barreira avançadas; sendo capazes de melhorar significativamente as propriedades mecânicas e térmicas dos biocompósitos (RANA; FROLLINI; THAKUR, 2021; VANDERFLEET et al., 2019).

Nesse contexto, foi utilizado um modelo preditivo matemático já que este tipo de sistemas engloba diversas abordagens, com suas vantagens e limitações dependendo da complexidade do sistema. Existem diferentes modelos estatísticos clássicos, como regressão linear e análise de variância, são amplamente utilizados para identificar tendências e relações em dados menos complexos, mas enfrentam dificuldades em sistemas não lineares (MONTGOMERY; RUNGER, 2020). Modelos baseados em física, que utilizam equações diferenciais e leis fundamentais, permitem previsões fundamentadas, porém exigem conhecimento profundo dos sistemas e simplificações que nem sempre capturam a realidade (LIU, 2009). Métodos de aprendizado de máquina, como árvores de decisão, Random Forest e máquinas de vetor de suporte (SVM), oferecem flexibilidade e precisão em problemas não lineares, mas têm limitações em dados multivariados muito complexos (BREIMAN, 2001; VAPNIK, 1995). Nesse cenário, as Redes Neurais Artificiais (RNAs) se destacam pela capacidade de identificar padrões ocultos em grandes volumes de dados experimentais, modelando relações complexas e não lineares. Sua flexibilidade, generalização e integração com big data tornam as RNAs uma ferramenta poderosa para prever propriedades de materiais avançados, como os nanocompósitos, onde interações dinâmicas e multiescalares são predominantes (LECUN; BENGIO; HINTON, 2015).

Um estudo realizado por ZHANG; FRIEDRICH, (2003) demonstrou que as RNAs são particularmente úteis na modelagem de polímeros devido à sua capacidade de aprender com os dados sem depender de suposições como linearidade ou normalidade, que são comuns nas abordagens tradicionais (como antes mencionadas). Estudos recentes demonstram a aplicação das RNAs para prever as propriedades mecânicas de compósitos de polietileno de alta densidade reforçados com fibras de bananeira, alcançando previsões muito precisas do comportamento tensão-deformação e reduzindo a necessidade de testes físicos extensivos (BONNAR ANAK JORES et al., 2023). De modo similar, (PRAMANIK; PRADHAN; KUMAR SAMAL, 2023) empregaram RNAs para prever as propriedades mecânicas de biocompósitos de celulose e poli(álcool vinílico), com modelos apresentando

baixos erros de predição e alta eficiência na simulação de cisalhamento e módulo de volume. Neste estudo, o modelo RNA foi treinado em um conjunto de dados gerado a partir de simulações usando o software BIOVIA, fornecendo um método eficiente e econômico para prever propriedades mecânicas sem a necessidade de testes experimentais.

Apesar do potencial das RNAs, ainda há uma lacuna para prever o comportamento mecânico dos nanocompósitos extrudados de PLA/NCC. Especialmente considerando a variabilidade do material conforme sua aplicação em processos de fabricação como extrusão e injeção. Isso cria a necessidade de um modelo que possa prever com precisão as curvas de tensão *versus* deformação, o que reduziria significativamente o tempo e os custos associados aos experimentos tradicionais. Além disso, o cálculo automatizado dos parâmetros a partir das curvas também dispensaria o uso de equipamentos de ensaios e dos espécimes, facilitando a geração de dados experimentais.

Diante deste contexto, o presente trabalho apresenta o desenvolvimento e a aplicação de um modelo de RNA para a predição do comportamento e das propriedades mecânicas de nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs fabricados por extrusão e injeção. A metodologia adotada envolve a produção de uma matriz concentrada de PLA/NCC, seguida da mistura com PLA puro, seguida da preparação dos corpos de prova. Os dados experimentais obtidos foram usados no treinamento e avaliação de um modelo de rede neural artificial aplicado à predição do comportamento mecânico dos nanocompósitos. Posteriormente, um sistema computacional foi desenvolvido para calcular, automaticamente, os diversos parâmetros que caracterizam propriedades mecânicas dos nanocompósitos de PLA.

2 OBJETIVO

O objetivo geral do presente estudo é avaliar o comportamento das propriedades mecânicas de nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs, fabricados por extrusão e injeção, através de ensaios experimentais e desenvolver um modelo preditivo, baseado em RNA, que possa prever o comportamento das curvas de tensão-deformação destes nanocompósitos, incluindo um sistema computacional que calcula as propriedades mecânicas experimentais.

Objetivos específicos:

- a) Estudar o comportamento mecânico dos nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs, a partir da literatura científica e dos dados experimentais obtidos;
- b) Estudar e avaliar modelos preditivos, baseados em aprendizado de máquina, especialmente redes neurais artificiais, que sejam adequados aos dados existentes;
- c) Projetar, desenvolver e avaliar um modelo de rede neural artificial para realizar previsões da curva tensão-deformação dos ensaios de tração de nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs;
- d) Implementar e avaliar um sistema computacional para cálculo dos parâmetros relativos as propriedades mecânicas dos nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs.

3 EMBASAMENTO TEÓRICO

3.1 COMPÓSITOS

É importante distinguir o significado dos termos composição ("*compound*") e compósito ("*composite*"). O termo composição é amplo e geral, e se aplica a quaisquer misturas, poliméricas ou não. O termo compósito se refere a materiais heterogêneos, multifásicos, podendo ser ou não poliméricos, em que um dos componentes é descontínuo (componente estrutural ou reforço) e fornece resistência ao esforço, enquanto o outro componente é contínuo (componente matricial ou matriz) e representa o meio de transferência desse esforço. Esses componentes não se dissolvem nem se descaracterizam completamente. No desenvolvimento de compósitos o objetivo é a obtenção de um novo material, onde as propriedades do conjunto são superiores às de cada componente individual, para uma determinada aplicação (MANO; MENDES, 1999).

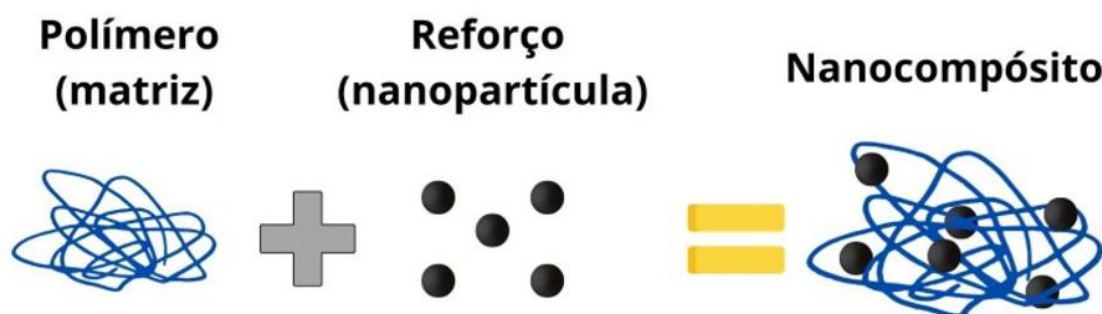
Os compósitos podem conter interações e materiais amplamente diferentes entre si, o que possibilita a geração de materiais com propriedades diferenciadas e controladas. Suas principais limitações estão relacionadas a obtenção de uma interface ótima entre os componentes, além de custo, de reciclagem e de moldagem, no entanto, essas limitações são frequentemente compensadas por ganhos no desempenho do material (ALINE, 2016).

3.1.1 NANOCOMPÓSITOS

De acordo com PAUL; ROBESON, (2008) um nanocompósito polimérico é um material composto por uma matriz polimérica que é reforçada com partículas, fibras ou placas de dimensões nanométricas (tipicamente menores que 100 nanômetros), em pelo menos uma de suas dimensões. Esses materiais diferem significativamente dos compósitos convencionais devido ao tamanho extremamente pequeno das fases dispersas, que resulta em uma área superficial muito maior e em interações mais intensas entre a matriz e o reforço. Consequentemente, o uso da fase dispersa em escala nanométricas, traz melhorias drásticas em várias propriedades, como: resistência mecânica, rigidez, resistência térmica, barreiras a gases, condutividade elétrica, entre outras. Entretanto, para atingir ganhos significativos em propriedades é importante ter um controle rigoroso da dispersão e distribuição das partículas, para garantir uma boa interface entre a matriz e o reforço.

A Figura 1 representa o processo de formação de um nanocompósito polimérico, ou seja, a combinação de uma matriz polimérica com nanopartículas, resultando em um material com propriedades superiores.

Figura 1- Representação de nanocompósito polimérico com nanopartículas.



Fonte: (SALAZAR K, 2023).

Nanocompósitos baseados em polímeros, especialmente aqueles que incorporam nanotubos de carbono, estão ganhando destaque em aplicações eletrônicas e optoeletrônicas avançadas devido à sua capacidade de operar na nanoescala. Esses materiais são amplamente aplicáveis em dispositivos como células fotovoltaicas, diodos emissores de luz, fotodiodos, supercapacitores, sensores, condutores imprimíveis e transistores. A integração de nanotubos de carbono em matrizes poliméricas isolantes é particularmente interessante para aplicações que exigem condutividade elétrica, como blindagem de interferência eletromagnética, revestimentos condutores transparentes, dissipação eletrostática e eletrodos. Notavelmente, o limiar de percolação para condutividade é significativamente baixo em compósitos epóxi com nanotubos de carbono de paredes múltiplas e nanotubos de carbono de paredes simples, alcançando valores em frações de massa e volume bem inferiores aos alcançados com negro de fumo. Para dispositivos como células fotovoltaicas e diodos emissores de luz orgânicos, os nanocompósitos são cruciais em camadas como ânodo, injeção de furos, emissão de luz e coleta de luz, além de possibilitar substratos flexíveis e barreiras contra oxigênio e água (PAUL; ROBESON, 2008).

3.1.2 BIOCAMPÓSITOS

Os biocompósitos, podem ser definidos como materiais que possuam todos os componentes derivados de fontes biológicas. Já os “compósitos de base biológica” ou ainda “compósitos baseados em biocomponentes” são definidos como: (i) aqueles preparados a

partir de partículas renováveis (por exemplo, nanocristais/fibras de celulose, sílica, argila lamelar) e polímeros derivados do petróleo como poli(propileno) - PP, poli(etileno) - PE, e epóxis; ou ainda (ii) compósitos derivados de biopolímeros (por exemplo, poli(ácido lático) - PLA e poli (hidroxobutirato) - PHA) e cargas sintéticas ou inorgânicas (por exemplo, nanotubos de carbono e fibras de vidro), ou seja, por definição, são materiais compósitos em que a fase contínua ou a fase dispersa são de fontes renováveis, diferindo desta forma dos biocompósitos (REDDY et al., 2013; ROACH et al., 2007).

No desenvolvimento de biocompósitos, a promoção de uma interface de qualidade entre os componentes do nanocompósito requer um entendimento equilibrado entre química, física, visando maximizar as propriedades mecânicas, como resistência à tração, módulo de elasticidade e tenacidade. Quando a interação entre a matriz e as fibras/partículas é inadequada, observa-se uma diminuição significativa na resistência e na rigidez do material, comprometendo seu desempenho estrutural. Para superar esse desafio, as fases dispersas naturais frequentemente passam por tratamentos de superfície como alcalinização, acetilação, silanização, entre outros métodos químicos, com o objetivo de aumentar a compatibilidade entre as fibras e a matriz polimérica. Esses tratamentos promovem uma melhor transferência de energia entre as fases do material, resultando em um desempenho mecânico superior.

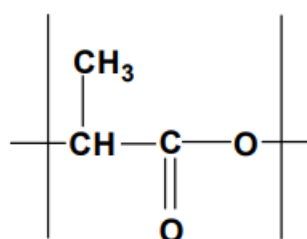
Além disso, o tratamento das fibras/partículas não apenas melhora a adesão interfacial, mas também pode reduzir a absorção de umidade, um dos principais desafios dos biocompósitos reforçados com componentes naturais, especialmente em aplicações sujeitas a condições ambientais úmidas. Dessa forma, o tratamento de fibras é essencial para garantir a durabilidade e a eficiência desses materiais em diversas aplicações (ŠIRVAITIENE et al., 2013).

3.2 POLI (ÁCIDO LÁTICO)

Um material é considerado biodegradável quando micro-organismos, como bactérias, fungos e algas, conseguem decompor os componentes de um material e utilizá-los como nutrientes. Para isso, os micro-organismos produzem enzimas que quebram as ligações químicas do material, processo que requer condições específicas de temperatura, umidade, oxigênio e pH. A biodegradação pode ocorrer na presença de oxigênio (aeróbica) ou na sua ausência (anaeróbica). Um exemplo de polímero biodegradável é o PLA, que pertence à família dos poliésteres alifáticos termoplásticos e é obtido de monômeros de

ácido láctico produzido a partir da fermentação do trigo, milho, batata, sacarose ou lactose. Este polímero, além de ser derivado de recurso renovável, é biocompatível, reciclável e compostável. Sua produção também consome dióxido de carbono, o que o torna sustentável e ambientalmente correto (SANTOS, 2016). A sua estrutura está representada na Figura 2.

Figura 2 - Estrutura do monômero PLA.



Fonte: (SANTOS, 2016).

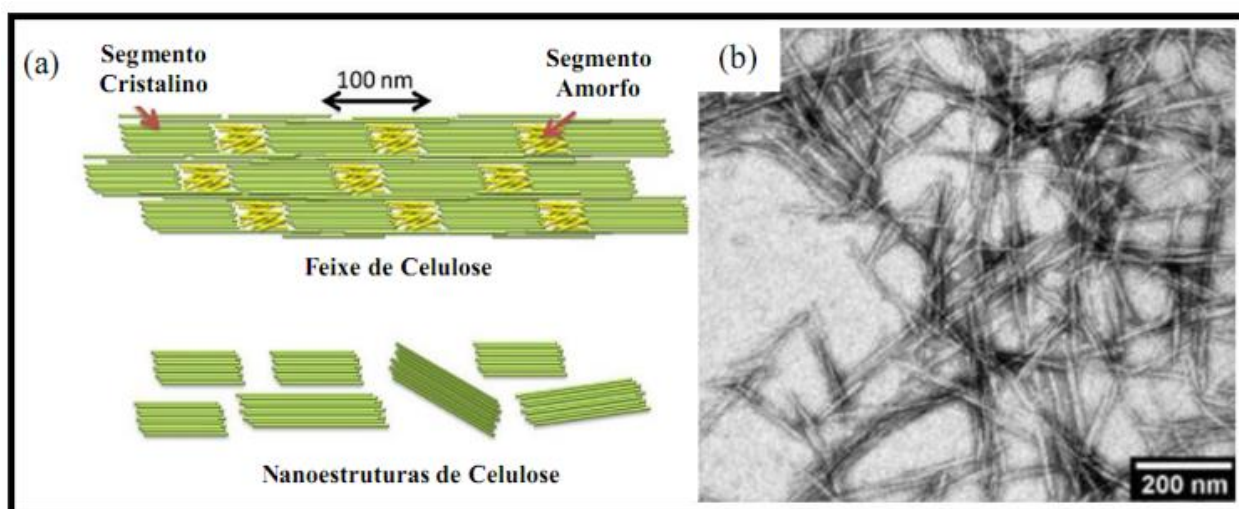
Esse polímero possui propriedades mecânicas comparadas às do poliestireno, entretanto, problemas como dificuldade no processamento e alto custo ainda limitam sua aplicação. Suas propriedades mecânicas podem variar bastante, desde plásticos macios e elásticos até materiais rígidos e de alta resistência. Por exemplo, o PLA semicristalino tem um módulo de tração aproximado de 3 GPa, resistência à tração de 50-70 MPa, módulo de flexão de 5 GPa, resistência à flexão de 100 MPa e um alongamento na ruptura de cerca de 4%, sendo portanto, aplicado quando uma maior resistência mecânica é necessária (FARAH; ANDERSON; LANGER, 2016).

3.3 NANOCRISTAL DE CELULOSE

As partículas de celulose estão inseridas, basicamente, em duas famílias. A primeira consiste em nanocristais (também conhecidos como *whiskers*) de celulose (NCC) e a segunda é a celulose microfibrilada (MFC). As fibras de celulose e as microfibrilas não exibem uma superfície regular, indicando a presença de domínios cristalinos e amorfos. Estas regiões amorfas são orientadas em um arranjo tipo espaguete, o qual conduz a uma densidade mais baixa em comparação às regiões cristalinas, Figura.3-a. Entretanto, em condições controladas, as regiões amorfas são susceptíveis ao ataque ácido - hidrólise ácida - onde os íons hidroxônio (H_3O^+) podem penetrar nestes domínios amorfos,

promovendo a clivagem hidrolítica das ligações glicosídicas e liberando os cristais de celulose individuais. Estas regiões cristalinas, em nanoescala, são conhecidas como nanocristais de celulose ou NCC, a Figura 3-b apresenta uma imagem de microscopia de transmissão destes NCC, os quais vêm chamando a atenção como potencial reforço para compósitos, devido à combinação de elevada área superficial e elevada razão de aspecto da partícula (BATTIROLA; GONÇALVES, 2013).

Figura 3 - (a) Esquema da estrutura cristalina e amorfa da celulose e (b) micrografia de nanocristais de celulose.

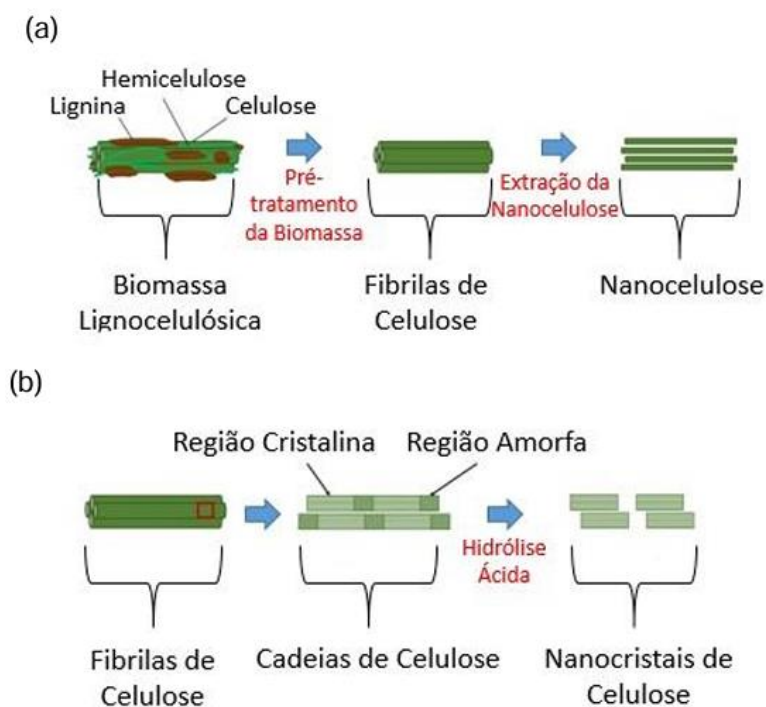


Fonte: Adaptado de (TAIPINA, 2012).

Entretanto, as características geométricas (tamanho, forma e dimensões) dos NCC podem variar dependendo da natureza da fonte de celulose (celulose bacteriana, algas, algodão, sisal, açúcar de beterraba, madeira, entre outras) e das condições de hidrólise (tempo, temperatura, tratamento em ultra-som e pureza) aplicadas para obtenção do NCC. Sendo que as dimensões típicas encontradas para os NCC estão em torno de 5-10 nm de diâmetro e de 100-500 nm de comprimento e módulos de elasticidade entre 130 GPa e 250 GPa, enquanto o módulo de estiramento foi avaliado como sendo da ordem de 10 GPa, densidade (cerca de 1,6 g/cm³), ampla área superficial, biodegradabilidade e grupos hidroxila que permitem modificações na superfície (MOON et al., 2011). Geralmente a extração da nanocelulose é feita em duas etapas. A primeira envolve pré-tratamentos (branqueamento e tratamento alcalino) realizados com o objetivo de remover os componentes não celulósicos, como ceras, hemicelulose, ligninas, entre outros (Figura 4a).

A segunda etapa está relacionada com o tipo do material celulósico, onde fibras ou fibrilas de celulose, de cristalinidade intermediária, são submetidas à processos mecânicos ou químicos (hidrólise enzimática e hidrólise ácida) para obtenção de partículas de celulose altamente cristalinas de dimensões nanométricas, os NCCs (Figura 4b). Esses tratamentos podem ser utilizados separadamente, ou podem ser combinados para obter partículas com características apropriadas (BARROS, 2020).

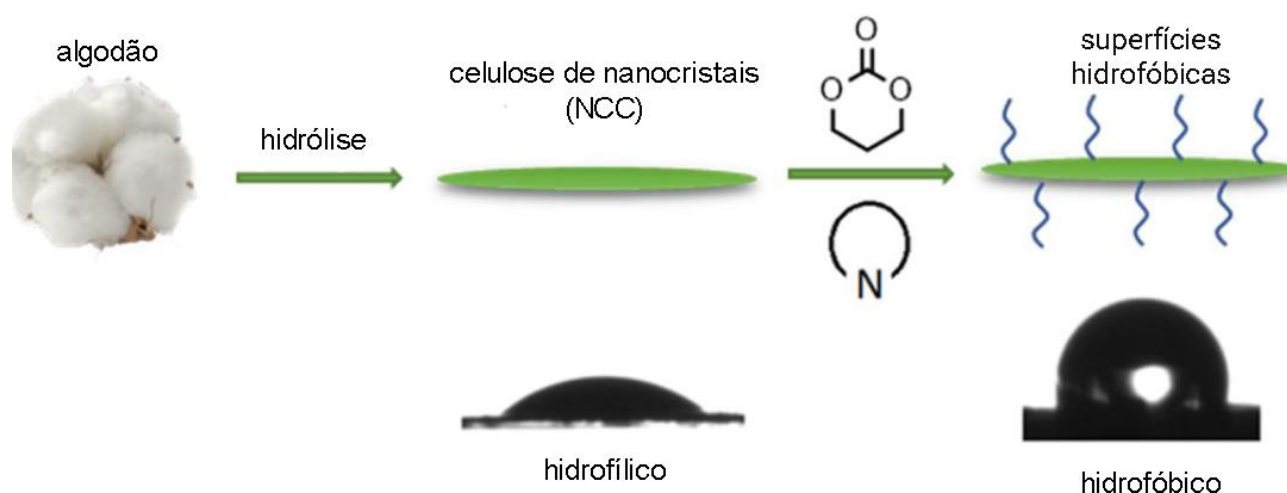
Figura 4 - Etapas do processo de extração da (a) fibrilas de celulose e dos (b) nanocristais de celulose.



Fonte: (BARROS, 2020).

No entanto, os NCCs são altamente hidrofílicos o que leva a limitações em algumas aplicações mais exigentes. A Figura 5, mostra a conversão de algodão hidrofílico em NCCs por hidrólise, seguida de uma modificação química, transformando os NCCs de hidrofílicos para hidrofóbicos. Essa mudança é ilustrada pela alteração no comportamento das gotas de água, com os NCC modificados exibindo maior repelência à água e ampliando suas aplicações em compósitos e revestimentos.

Figura 5 - Modificação dos NCC: De Hidrofílico a Hidrofóbico por Modificação Química.



Fonte: Adaptado de (LALANNE-TISNÉ et al., 2022).

Nanocompósitos poliméricos reforçados com NCC, em matrizes de PLA, apresentam alta rigidez, leveza e biodegradabilidade, melhorando a resistência mecânica. Esses materiais são promissores para aplicações sustentáveis, embora enfrentem desafios na dispersão uniforme e prevenção de aglomerações, exigindo avanços em técnicas de processamento (SILVA et al., 2009).

Em seu estudo, MIAO; HAMAD, (2019) demonstraram o potencial dos NCCs como reforço sustentável em polímeros, oferecendo alta rigidez (100-140 GPa), leveza e biodegradabilidade. Os NCCs melhoram as propriedades mecânicas e térmicas dos nanocompósitos graças à sua alta área superficial e forte adesão à matriz polimérica, tornando-os ideais para aplicações leves em setores como automotivo. Apesar de desafios como a dispersão homogênea e a tendência de aglomeração, técnicas de funcionalização podem otimizar seu uso, promovendo materiais mais eficientes e de alto desempenho. Além disso, sua aplicação em embalagens pode melhorar as propriedades de barreira contra gases e vapores, reduzindo o impacto ambiental (DUFRESNE, 2017).

3.4 PROPRIEDADES MECÂNICAS

As propriedades mecânicas são parâmetros muito importantes no desenvolvimento de compósitos. O aumento de uma determinada propriedade pode significar a redução de outra, por exemplo, aumentar a resistência à tração de um material por meio de processos

como endurecimento pode reduzir sua ductilidade. Similarmente, a rigidez está inversamente relacionada à flexibilidade. Essas variações em ganho e perda de propriedades mecânicas devem ser consideradas cuidadosamente durante o desenvolvimento e seleção de materiais, especialmente para aplicações críticas (CALLISTER; RETHWISCH, 2012). Compreender as propriedades mecânicas é essencial para projetar materiais que atendam a aplicações específicas. Em materiais avançados, como nanocompósitos e ligas de alta entropia, o limite de percolação representa a concentração crítica de partículas necessária para formar uma rede interconectada na matriz, resultando em melhorias significativas nas propriedades mecânicas, térmicas ou elétricas. Abaixo desse limite, as partículas permanecem isoladas, limitando seu impacto. Acima dele, ocorre maior interação e transferência de carga, aprimorando propriedades como resistência à tração, módulo elástico e tenacidade (BARANAUSKAITE et al., 2019; BAUHOFER; KOVACS, 2009). Fatores como forma, tamanho, dispersão das partículas e interação com a matriz são determinantes. Em nanocompósitos PLA/CNC, redes interconectadas de nanocristais de celulose elevam o desempenho mecânico, enquanto concentrações insuficientes podem comprometer as propriedades devido à dispersão inadequada ou à rigidez localizada (LEITE et al., 2016).

As propriedades mecânicas são elementos cruciais na seleção e aplicação de materiais em engenharia e ciência dos materiais, desempenhando papel determinante no desempenho e na segurança de estruturas e produtos. Dentre essas propriedades, destacam-se a resistência à tração, tenacidade, rigidez, ductilidade entre outros, as quais são determinadas por ensaios laboratoriais e influenciam diretamente as escolhas de design e fabricação.

A resistência à tração refere-se à capacidade de um material suportar tensões axiais antes de sofrer fratura. Determinada por ensaios de tração, essa propriedade mede a força máxima que um material pode suportar sob carga crescente. Essa característica é essencial para aplicações estruturais que demandam alta durabilidade, como pontes, edifícios e aeronaves. Materiais com alta resistência à tração, como aços de alta resistência e compósitos reforçados, são amplamente utilizados em virtude de suas vantagens únicas. Compósitos, em particular, apresentam elevada relação resistência/peso, o que os torna ideais para aplicações onde a redução de peso é crítica, como na indústria aeroespacial e automotiva. Além disso, eles oferecem resistência à corrosão, maior flexibilidade no design

e podem ser personalizados para atender a demandas específicas de desempenho, combinando diferentes tipos de reforços e matrizes. No entanto, fatores que influenciam diretamente a resistência dos materiais incluem a composição química, a microestrutura e os processos de fabricação, como tratamentos térmicos, deformação plástica e a orientação das fibras no caso dos compósitos. Por exemplo, a inclusão de nanomateriais como nanocristais de celulose (NCC) em matrizes poliméricas pode melhorar a resistência mecânica e a tenacidade, ao mesmo tempo em que mantém a leveza do material (CALLISTER; RETHWISCH, 2012). Esses avanços tornam os compósitos uma escolha estratégica para aplicações que exigem alta resistência mecânica combinada a outras propriedades desejáveis, como leveza e durabilidade.

O módulo de Young, que mede a rigidez e a capacidade de um material resistir à deformação elástica quando submetido a cargas, é uma propriedade fundamental na engenharia. Esse módulo, também conhecido como módulo de Elasticidade, é uma constante que reflete a resistência intrínseca do material à deformação. A rigidez é essencial em aplicações que exigem estabilidade dimensional, como componentes estruturais, instrumentos ópticos e dispositivos eletrônicos. Metais como alumínio e titânio são amplamente utilizados devido à sua combinação de leveza e rigidez (BUDYNAS; NISBETT, 2020).

A ductilidade, em compósitos, refere-se à capacidade de deformação plástica antes da fratura, frequentemente medida pelo alongamento percentual na ruptura. Materiais dúcteis, como certos termoplásticos, são valorizados em aplicações que demandam flexibilidade e resistência ao impacto, como embalagens, componentes automotivos e dispositivos médicos. A ductilidade desses materiais é influenciada pela estrutura molecular, presença de reforços, temperatura e taxa de deformação; polímeros geralmente exibem maior ductilidade em temperaturas acima de sua temperatura de transição vítrea (T_g), enquanto temperaturas muito baixas tendem a aumentar a fragilidade (CALLISTER; RETHWISCH, 2012). Em compósitos, a interação matriz-reforço pode melhorar ou restringir a ductilidade, dependendo da compatibilidade entre os componentes e do nível de reforço empregado.

A tenacidade dos materiais compósitos, que combina resistência à tração e ductilidade, é crucial em aplicações sujeitas a impactos e vibrações, como na indústria aeroespacial e automotiva. A inclusão de reforços, como fibras ou nanopartículas, aumenta

a capacidade de dissipação de energia, enquanto a customização estrutural possibilita otimizações para usos específicos. No entanto, defeitos internos, como porosidade e delaminações, e fatores externos, como temperatura operacional, podem comprometer o desempenho. Apesar dessas limitações, sua alta resistência, leveza e capacidade de dissipar energia os tornam indispensáveis para aplicações críticas, desde que os processos de fabricação sejam rigorosamente controlados (ASHBY, 2005).

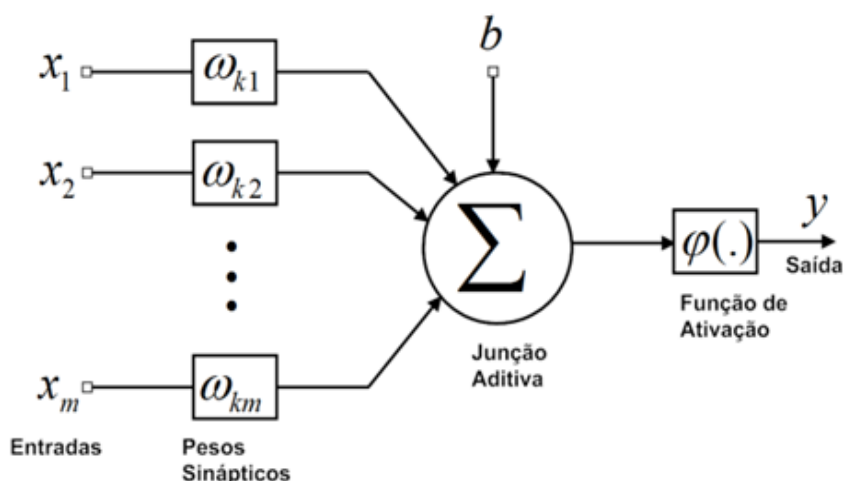
3.5 REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS

O avanço científico e tecnológico tem proporcionado transformações significativas em diversas áreas do conhecimento, muitas delas impulsionadas pela integração entre ciência da computação, física e engenharia. Em 2024, o Prêmio Nobel de Física foi concedido a John Hopfield e Geoffrey Hinton, conforme relatado por (PEIXOTO, 2024), reconhecendo suas contribuições fundamentais para o desenvolvimento de Redes Neurais Artificiais (RNAs), sistemas inspirados no funcionamento do cérebro humano. Hopfield revolucionou o campo com sua rede associativa, capaz de armazenar e recuperar padrões de forma eficiente, enquanto Hinton introduziu as Máquinas de Boltzmann, que aplicam conceitos de física estatística na identificação de padrões em grandes volumes de dados. Essas inovações são hoje pilares da inteligência artificial e do aprendizado de máquina, técnicas amplamente utilizadas em diferentes áreas da física, química e engenharia, incluindo a otimização e a criação de novos materiais avançados.

As RNAs são sistemas computacionais inspirados na estrutura e funcionamento do cérebro humano. Compostas por unidades de processamento chamadas neurônios artificiais, tal como os neurônios biológicos, as RNAs são organizadas em camadas interconectadas que trabalham em conjunto para adquirir e processar informações (RUSSELL; NORVING, 2015). Essas redes são amplamente utilizadas no campo do Aprendizado de Máquina (*Machine Learning*) e desempenham funções como classificação, regressão, reconhecimento de padrões, previsão e processamento de sinais (LANDAU; TAYLOR, 1998). Uma RNA é projetada para resolver uma variedade de problemas em diferentes áreas, dependendo de sua configuração e do modo de treinamento. O funcionamento da RNA baseia-se na interação entre neurônios interligados, que ajustam seus pesos sinápticos durante o processo de treinamento. Esses ajustes permitem que a rede aprenda a partir de exemplos e generalize esse aprendizado para realizar previsões ou classificações em novos dados (HAYKIN, 1999).

O neurônio artificial é a unidade básica de uma RNA, e sua estrutura é mostrada na Figura 6, sendo composta por variáveis de entrada com múltiplos valores ($x_1 \dots x_M$), os pesos ($w_{k1} \dots w_{kM}$), que são coeficientes que indicam a importância relativa de cada entrada no processamento do neurônio; o viés b , ou *bias*, que permite ao modelo se adaptar melhor a diferentes conjuntos de entrada e; a saída y , que é o resultado da soma ponderada das entradas e do viés (desvios), após passar por uma função φ de ativação (HAYKIN, 1999). As funções de ativação φ introduzem a não linearidade ao sistema, sendo a linear, *ReLU* e *tanh* as mais usadas, cada uma tendo características diferentes (REZENDE, 2005). A relação matemática que descreve o neurônio artificial é dada pela Equação 1.

Figura 6 - Representação de um neurônio artificial.



Fonte: Adaptado de (HAYKIN, 1999).

A Equação 1 que é uma combinação não linear dos pesos sinápticos w_{ki} com a entrada x_i , que é denominada pré-sináptica, é dada por:

$$y = \varphi \left(\sum_{i=1}^N \omega_{ki} x_i + b \right) \quad (1)$$

O processo de treinamento de uma rede neural envolve a otimização iterativa dos pesos sinápticos para minimizar o erro entre as previsões da rede e os valores reais. Inicialmente, os pesos são aleatórios, sendo ajustados durante o treinamento com base na diferença entre os valores verdadeiros e preditos. Para isto é utilizada uma função de perda (*loss*) (SHCHERBAKOV et al., 2013). Com os algoritmos de gradiente descendente e o

processo de *backpropagation*, os pesos são atualizados para reduzir o erro, permitindo à rede aprender e generalizar padrões para novos dados (HAYKIN, 1999).

A aplicação de RNAs para prever propriedades mecânicas em compósitos poliméricos tem ganhado destaque devido ao seu potencial de oferecer previsões com precisão e otimizar processos de desenvolvimento de materiais. Conforme destaca DINIZ (2017), as RNAs não apenas preveem o comportamento mecânico com precisão, mas também automatizam a otimização das orientações das camadas, aprendendo padrões complexos a partir de dados simulados. Além disso, sua capacidade de projetar novos designs reduz a necessidade de simulações e experimentos repetitivos, tornando o processo mais eficiente e menos custoso.

Estudos recentes reforçam a relevância das técnicas de aprendizado de máquina na engenharia de materiais, como evidenciado por ARRUDA, (2021). Esse estudo comparou três metodologias para prever a resistência à compressão do concreto aos 28 dias: Redes Neurais Artificiais (RNA), Regressão Linear Múltipla (RLM) e Máquina de Vetor de Suporte (SVM). Os resultados destacaram que as RNA apresentaram um bom desempenho, superando os métodos tradicionais em termos de melhor precisão e capacidade preditiva. Com alta consistência em relação à literatura, o estudo evidencia o potencial das RNA como ferramentas robustas e eficazes na previsão de propriedades mecânicas de materiais, reforçando sua aplicabilidade em contextos de engenharia avançada.

Vale destacar que, a partir dos recentes estudos da literatura científica, não foram observados trabalhos aplicando RNAs para a predição das curvas tensão-deformação de nanocompósitos de PLA reforçados com diferentes concentrações de NCC.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Esta seção descreve os materiais, as ferramentas, tecnologias e o método utilizado no desenvolvimento deste estudo. As etapas que abrangem a preparação de NCCs, matrizes concentradas de nanocristais de celulose, fabricação de nanocompósitos poliméricos e caracterização de materiais, encontram-se detalhadas no Apêndice I. Essas etapas foram executadas em uma fase anterior do desenvolvimento deste estudo, na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) no grupo de pesquisa da Profa. Dra. Maria do Carmo Gonçalves.

Nesta seção, o foco será a descrição do modelo de Rede Neural Artificial (RNA) utilizado para análise preditiva. O objetivo principal é detalhar os processos a projeto, implementação, treinamento e avaliação do modelo de RNA, bem como a abordagem adotada para otimizar seu desempenho preditivo.

4.1 MODELO PREDITIVO

O modelo de RNA adotado é do tipo *MultiLayer Perceptron* (RUSSELL; NORVING, 2015) e empregou como parâmetros de entrada o tipo do compósito, força e deslocamento. Os parâmetros de saída foram a tensão e deformação. Para alcançar uma otimização eficiente da RNA, foi necessária uma seleção cuidadosa de aspectos como algoritmo de treinamento, arquitetura de rede e função de ativação. O desenho experimental conduzido neste estudo é mostrado em Figura 7. Após dividir o conjunto de dados em conjuntos de treinamento, validação e teste, a RNA foi implementada usando a abordagem *Random Grid Search* para identificar a melhor combinação de hiperparâmetros e otimizar a acurácia do modelo (YANG; SHAMI, 2020).

O conjunto de dados utilizado inclui dados de 48 corpos de prova, totalizando 40.405 registros, cuja composição está detalhada na Tabela 1. Para cada tipo de material PLA/NCC, 70% dos dados (corpos de prova) foram utilizados para treinamento e 30% para teste da RNA. Portanto, foram utilizados um total de 33 corpos de prova para treinamento e 15 corpos de prova para teste. Durante o treinamento, foi aplicada a técnica de *3-fold cross-validation* o que ajuda a prevenir o problema de *overfitting* do modelo. Além disso, os dados de entrada e saída da RNA foram normalizados para acelerar o treinamento e melhorar o desempenho do modelo (HAYKIN, 1999).

Figura 7 - Fluxograma da avaliação experimental.

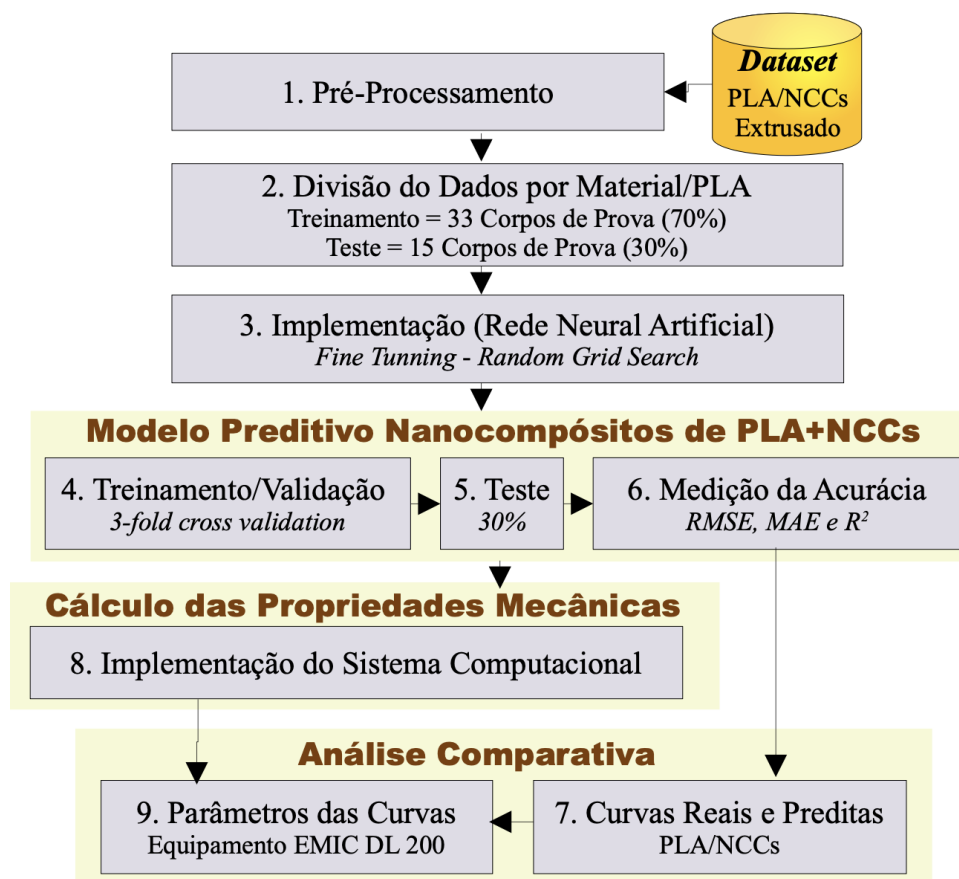


Tabela 1 - Ajuste dos hiperparâmetros da rede neural artificial com Random Grid Search (selecionados em negrito).

Camadas ocultas: [1, 2 e 3]	Taxa de aprendizado: [0,01 e 0,001]
Neurônios por camada oculta: [25, 50 e 100]	Entradas (X) = 3 Neurônios (Compósito, força e deslocamento)
Função de Ativação: [ReLU e tanh]	Saídas (y) = 2 Neurônios (Tensão e deformação)
Otimizador: [Adam e rmsprop]	Total de neurônios = 205
<i>Batch Size</i> = [32, 64 e 128]	
epocas = [100 e 200]	

No método de validação cruzada 3-fold (3CV), o conjunto de dados foi dividido em três partes iguais, onde, a cada iteração, dois folds foram usados para treinar o modelo, enquanto o fold restante foi utilizado para validação, garantindo que todos os dados fossem empregados em ambas as etapas. O desempenho médio e o desvio padrão das métricas foram calculados ao final para avaliar a generalização do modelo. Para a otimização dos hiperparâmetros, foi aplicado o Random Grid Search, que define um espaço de busca

contendo intervalos ou valores possíveis para os parâmetros e seleciona aleatoriamente combinações para serem testadas. Cada configuração de hiperparâmetros foi avaliada com validação cruzada 3CV, permitindo identificar o conjunto que apresentou o melhor desempenho médio, reduzindo custos computacionais em comparação ao Grid Search tradicional, mas mantendo alta eficiência (BERGSTRA; BENGIO, 2012; BISHOP, 2006; GÉRON, 2019).

Por fim, o desempenho preditivo do modelo foi analisado utilizando o seguinte conjunto de métricas: Erro Médio Absoluto (*MAE*), Raiz do Erro Quadrático Médio (*RMSE*) e o Coeficiente de Determinação (R^2) (SHCHERBAKOV et al., 2013), definido nas Equações 2, 3 e 4, respectivamente.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (o_i - p_i)}{\sum_{i=1}^N (o_i - \mu)^2} \quad (2)$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (o_i - p_i) \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (o_i - \mu)^2} \quad (4)$$

Aqui, N representa o número total de pontos de dados, μ refere-se à média da distribuição observada, p_i denota o i -ésimo ponto previsto, e o_i representa o i -ésimo ponto observado. A métrica *MAE* quantifica a magnitude média dos erros e depende da escala. O *RMSE* é amplamente utilizado em problemas de regressão e sensível a grandes erros individuais. Estas duas métricas (*MAE* e *RMSE*), quanto mais próximo de zero, melhor será o desempenho. O R^2 reflete a qualidade e precisão dos dados preditos em relação aos originais; quanto mais próximo de 1, melhor será a qualidade da predição (SHCHERBAKOV et al., 2013). Cada métrica *RMSE*, *MAE* e R^2 representa diferentes características relacionadas à distribuição dos erros de predição e, juntas, fornecem uma compreensão mais abrangente da precisão preditiva do modelo (BOTCHKAREV, 2019).

Por fim, para a construção dos modelos preditivos utilizados neste estudo foram utilizadas as seguintes tecnologias e ferramentas *open-source*: linguagem de programação Python 3.10, pacotes TensorFlow e Keras (MINING, 2019), Scikit-learn, Pandas e Matplotlib, além de o ambiente de desenvolvimento Google Colaboratory (BISONG, 2019), onde foi utilizada uma Unidade Gráfica de Processamento Nvidia T4 durante o treinamento

da RNA.

4.2 PARÂMETROS DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS

A partir da curva prevista para o ensaio de tração, é necessário calcular os parâmetros que caracterizam as propriedades mecânicas do corpo de prova. Portanto, foi desenvolvido um software para calcular os seguintes parâmetros a partir das curvas tensão-deformação.

- i. **Força Máxima:** Obtida pela multiplicação da tensão máxima pela área da seção transversal do corpo de prova, identificando o ponto de maior resistência durante o ensaio;
- ii. **Tensão na Força Máxima (MPa):** É a razão entre a força máxima e a área da seção transversal, quantificando a tensão no ponto de maior resistência do material;
- iii. **Alongamento Máximo (%):** Extraído diretamente da curva tensão-deformação e corresponde ao maior valor de deformação medido durante o ensaio, refletindo a ductilidade do material;
- iv. **Tensão Máxima (%):** É a maior tensão que um material suporta durante um ensaio de tração antes de começar a sofrer deformação permanente ou antes de atingir a fratura;
- v. **Módulo de Young (MPa):** Determinado a partir da região linear inicial da curva tensão deformação por meio de regressão linear. Este parâmetro indica a rigidez do material na fase elástica do ensaio;
- vi. **Tensão de fratura (MPa):** É a tensão registrada no momento em que o material realmente se rompe ou fratura.

Conjuntamente, todos estes parâmetros permitem caracterizar o comportamento mecânico dos nanocompósito, fornecendo informações sobre sua resistência, elasticidade e ductilidade ao longo do ensaio.

Por fim, o software que computa os parâmetros das curvas foi desenvolvido com a linguagem Python, ambiente de programação PyCharm e biblioteca de interface gráfica PyQt5, além de outras bibliotecas internas da linguagem.

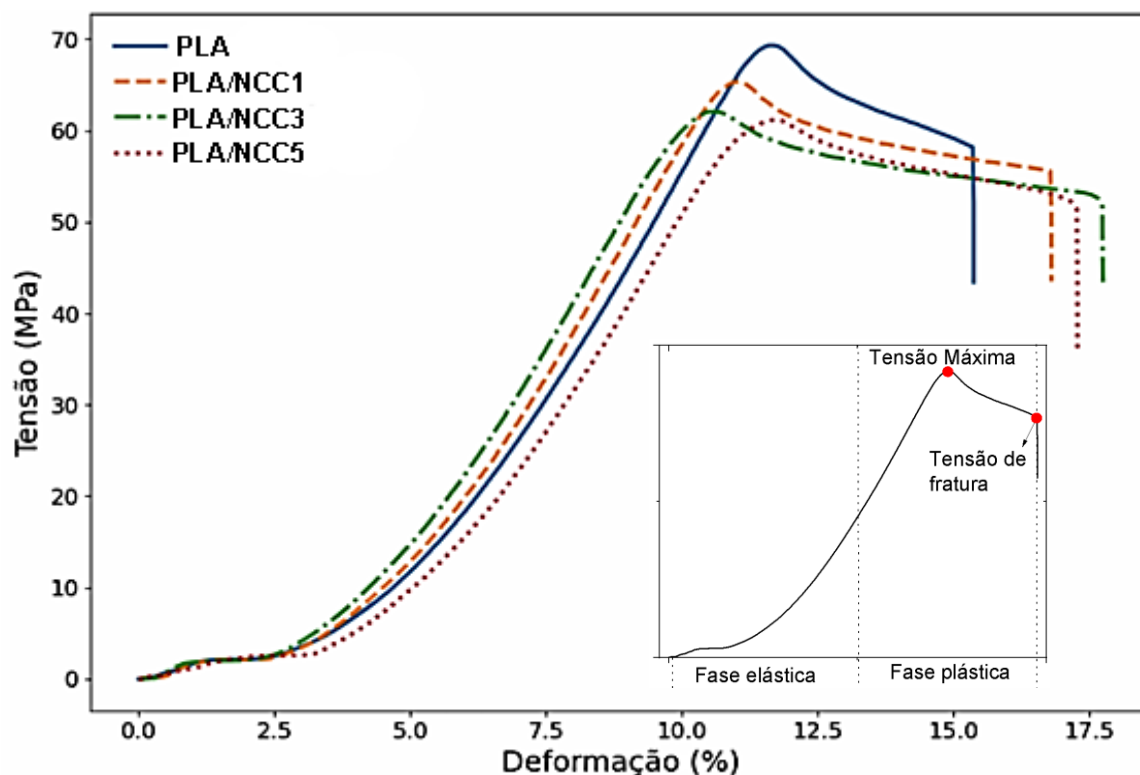
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Esta seção aborda os resultados e discussões sobre as propriedades mecânicas dos nanocompósitos reforçados com NCCs, a acurácia de predição do modelo de RNA desenvolvido e do sistema computacional que realiza os cálculos dos parâmetros relativos as propriedades dos ensaios com nanocompósitos.

5.1 PROPRIEDADES MECÂNICAS

As curvas tensão-deformação representativas das amostras estão exibidas na Figura 8. É possível observar nas curvas tensão-deformação um perfil de comportamento característico de materiais termoplásticos dúcteis, conforme esperado para o PLA.

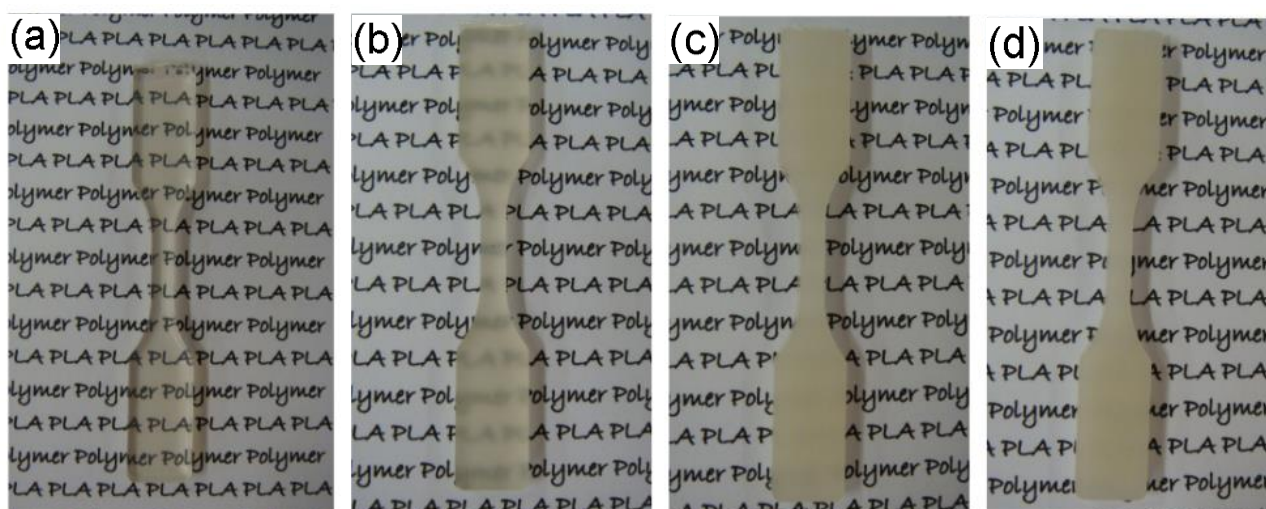
Figura 8 - Curvas de tensão-deformação experimentais para o PLA puro e os nanocompósitos. *Inset* apresentando uma curva teórica do perfil de comportamento mecânico de um polímero termoplástico, evidenciando a região elástica e plástica de deformação.



Na Figura 9, são representadas as respectivas fotografias dos corpos de prova que exibe a transparência óptica para a amostra de PLA extrudada. Para os nanocompósito, a

adição de NCC induz opacidade nas amostras, provavelmente devido à presença de agregados de NCC. Não foram observadas manchas pretas ou coloração amarelada nos corpos de prova dos materiais preparados, indicando ausência de degradação térmica dos nanocristais e/ou da matriz polimérica na temperatura de processamento. Essa característica é resultado da maior resistência térmica dos NCCs utilizados, conforme evidenciado por (ESPINOSA et al., 2013).

Figura 9 - Fotografias dos corpos de prova do (a) PLA puro, e dos nanocompósitos (b) PLA/NCC1, (c) PLA/NCC3 e (d) PLA/NCC5.



As propriedades mecânicas dos materiais preparados são apresentadas na Tabela 2. Pode-se observar que, para todas as composições testadas, o limite de resistência à tração diminuiu. Este resultado é consequência da adição de partículas de alta rigidez à matriz polimérica (BORGES et al., 2020; GONÇALVES, 2022). Por outro lado, o alongamento na ruptura aumentou com a adição de NCC. É perceptível que a adição de NCC diminui o módulo de Young; entretanto, um aumento progressivo é observado à medida que a concentração de NCC na amostra aumenta.

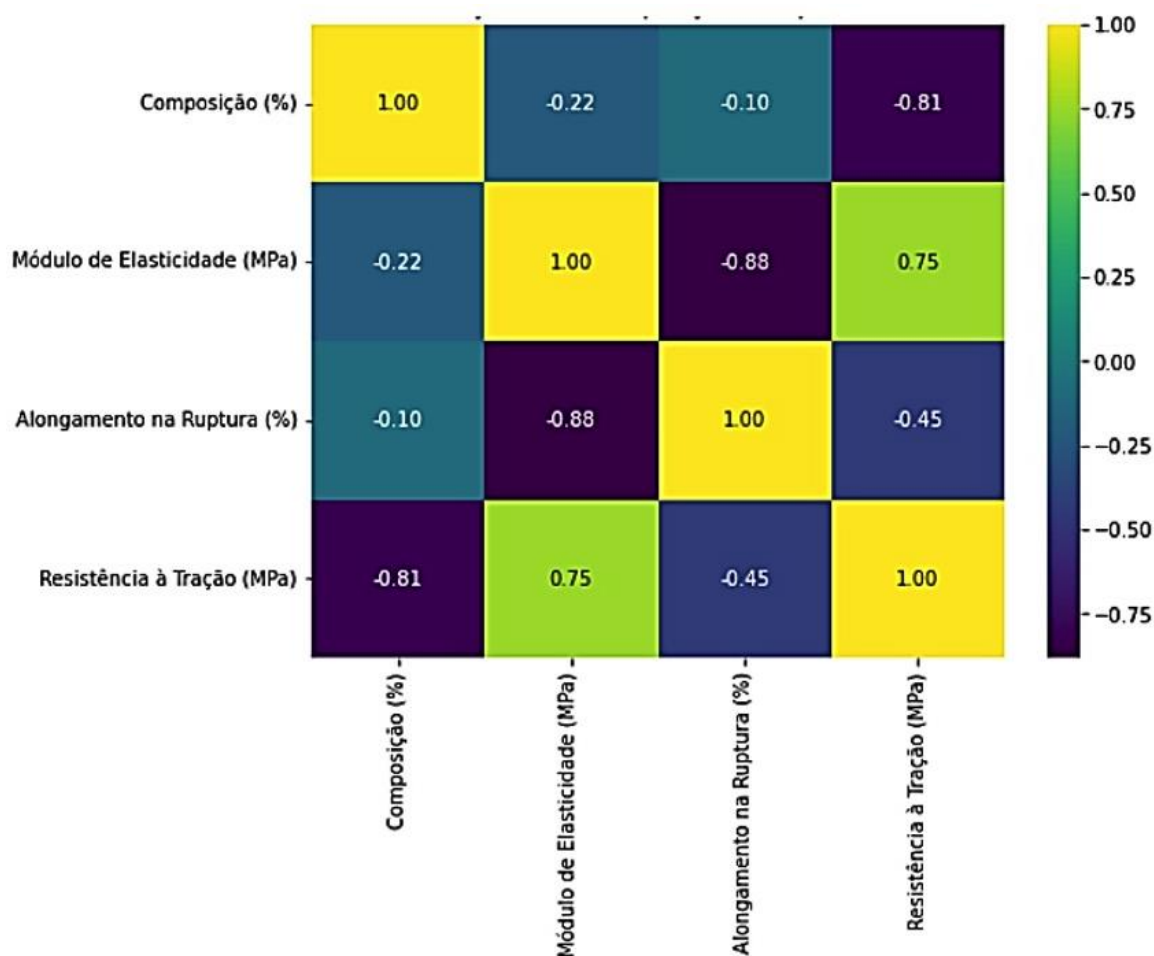
Tabela 2 - Propriedades mecânicas do PLA e dos nanocompósito PLA/NCC.

Amostras	Resistência à tração (MPa)	Alongamento na ruptura (%)	Módulo de Elasticidade (MPa)
PLA	69,25 ± 0,62	15,58 ± 0,87	493,31 ± 9,24
PLA/NCC1	64,27 ± 0,63	16,48 ± 1,41	462,21 ± 27,04
PLA/NCC3	62,81 ± 0,99	16,78 ± 1,93	463,30 ± 43,51
PLA/NCC5	62,73 ± 0,90	15,50 ± 0,44	479,47 ± 15,26

Apesar do grande desvio padrão calculado, dentre os nanocompósito, a composição com 5% de NCC apresentou os maiores valores de módulo de tração; entretanto, estes ainda estavam abaixo dos valores de módulo de Young encontrados para PLA puro. Esse comportamento é explicado pela composição do nanocompósito, que está abaixo do limiar de percolação do material. Para esta partícula, o limiar de percolação é de aproximadamente 5,24% em peso. Para o cálculo do limiar de percolação foram considerados parâmetros dimensionais da partícula obtida por microscopia eletrônica de transmissão, com comprimento médio (L) de 231 ± 28 nm e diâmetro (d) de 14 ± 3 nm, obtendo-se uma razão de aspecto média (L/d) de cerca de 16. Adicionalmente, foram consideradas densidades de $1,2 \text{ g cm}^{-3}$ para PLA e $1,5 \text{ g cm}^{-3}$ para NCC (LEITE et al., 2016).

Os resultados das propriedades mecânicas apresentados na Tabela 2 mostram que a adição de NCC, nas composições estudadas neste trabalho, afeta negativamente a resistência à deformação e o módulo de Young dos nanocompósitos, enquanto o alongamento na ruptura apresenta uma relação inversa. Para reforçar estas observações, foi calculada uma matriz de correlação de Pearson (Figura 10). A matriz confirma uma correlação negativa significativa entre composição e resistência à tração (-0,81), bem como entre módulo de Young e alongamento à ruptura (-0,88). Estas relações indicam que a adição de NCC abaixo do limiar de percolação reduz a resistência à deformação do PLA. Este comportamento explica o impacto da adição de partículas rígidas nas propriedades mecânicas das matrizes poliméricas.

Figura 10 - Matriz de Correlação Pearson entre composição e propriedades mecânicas.



5.2 MODELO PREDITIVO DOS NANOCOMPÓSITOS

A avaliação da acurácia do modelo preditivo é essencial para garantir a confiabilidade dos resultados em aplicações práticas, especialmente na previsão das propriedades mecânicas dos materiais, como a tensão e a deformação dos nanocompósitos de PLA avaliados neste estudo. Portanto, é crucial utilizar métricas de desempenho robustas, como RMSE, MAE e R^2 , que fornecem uma visão abrangente da precisão e capacidade de generalização do modelo. Além disso, essas métricas oferecem uma compreensão clara do desempenho do modelo preditivo com as diferentes composições de nanocompósito avaliadas, auxiliando na identificação de áreas para melhoria e refinamento dos modelos. Para cada corpo de prova são relatados os valores de precisão da curva prevista, tanto para previsão de tensão, que indica a resistência mecânica dos materiais, quanto para deformação, que reflete sua capacidade de alongamento.

A Tabela 3 apresenta a acurácia média geral do modelo para todos os nanocompósitos testados. As estatísticas de desempenho revelam uma boa precisão do modelo, evidenciada pelos baixos erros de predição e pela boa correlação entre os valores previstos e reais, destacando sua eficácia na estimativa das propriedades dos nanocompósitos.

Tabela 3 - Acurácia média geral do modelo para todos os nanocompósitos testados.

Métrica de Erro	Tensão (MPa)	Deformação (%)
RMSE	0,634	0,173
MAE	0,402	0,113
R ²	0,999	0,998

As análises de desempenho do modelo preditivo para todos os nanocompósitos avaliados indicam uma boa acurácia com base nas análises de RMSE, MAE e R². O RMSE reflete a magnitude média dos erros entre os valores previstos e reais, com maior ênfase nos erros maiores devido à sua natureza quadrática. Os valores de RMSE obtidos para tensão e deformação foram 0,634 MPa e 0,173%, respectivamente, proporcionando razoável acurácia para as previsões do modelo. O MAE, que mede a magnitude média dos erros de forma mais intuitiva e sem a influência exagerada de grandes erros, apresentou valores de 0,402 MPa para tensão e 0,113% para deformação, reforçando a boa capacidade preditiva do modelo. Por fim, os valores de R² foram elevados, 0,999 para tensão e 0,998 para deformação, indicando que o modelo preditivo foi capaz de capturar quase toda a variabilidade presente nos dados experimentais. Estes resultados demonstram que o modelo utilizado apresentou uma boa acurácia na previsão das propriedades mecânicas dos nanocompósitos analisados.

A Tabela 4 apresenta acurácia de cada nanocompósito prevista a partir dos dados de teste; baseados em RMSE, MAE e análises R² para tensão e deformação. É importante notar que os dados do teste não foram apresentados ao modelo durante o processo de treinamento. Os resultados indicam que, para os dois parâmetros avaliados (tensão e deformação), o PLA puro exibiu maiores valores de RMSE e MAE em comparação aos nanocompósitos analisados, refletindo maior inconsistência nas previsões. Por outro lado, os nanocompósitos PLA/NCC1, PLA/NCC3 e PLA/NCC5 mostraram variações nos valores das métricas de acurácia devido à incorporação de NCCs. No entanto, o modelo de rede

neural artificial demonstrou uma alta acurácia, destacando seu potencial como uma ferramenta promissora para prever comportamento mecânico e desenvolvimento de nanocompósitos mais eficientes.

Tabela 4 – Acurácia de cada nanocompósito prevista a partir dos dados de teste.

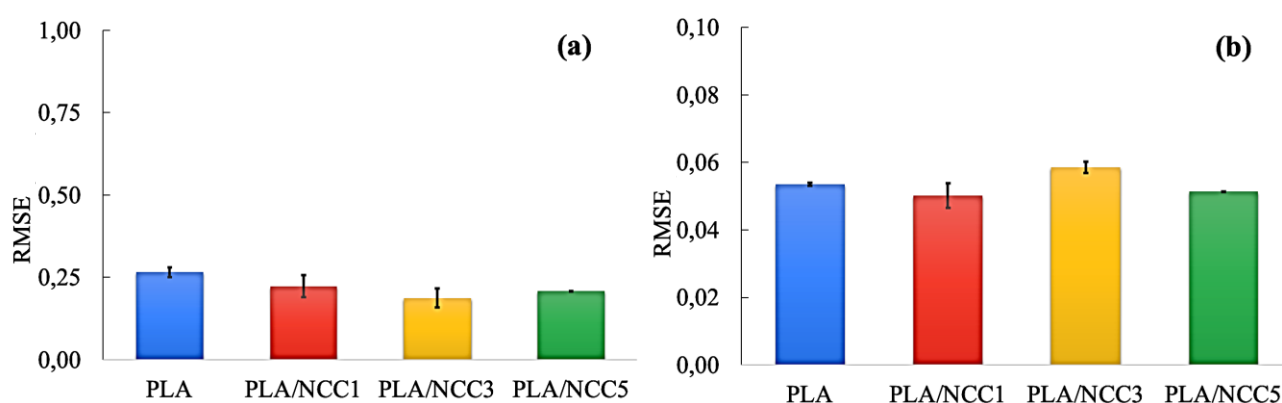
Amostra	Corpo de Prova (CP)	Tensão (MPa)			Deformação (%)		
		RMSE	MAE	R ²	RMSE	MAE	R ²
PLA	CP5	0,2590	0,1942	0,9998	0,0527	0,0370	0,9998
	CP4	0,2725	0,1958	0,9998	0,0542	0,0381	0,9998
PLA/NCC1	CP12	0,2159	0,1504	0,9999	0,0501	0,0325	0,9998
	CP13	0,2428	0,1885	0,9998	0,0501	0,0354	0,9998
	CP14	0,2233	0,1716	0,9999	0,0462	0,0325	0,9998
	CP15	0,2295	0,1697	0,9998	0,0488	0,0334	0,9998
	CP16	0,2052	0,1389	0,9999	0,0558	0,0361	0,9998
PLA/NCC3	CP12	0,1799	0,1295	0,9999	0,0553	0,0354	0,9998
	CP13	0,2204	0,1419	0,9999	0,0805	0,0434	0,9997
	CP14	0,1719	0,1207	0,9999	0,0591	0,0354	0,9998
	CP15	0,1623	0,1138	0,9999	0,0536	0,0335	0,9998
	CP16	0,2031	0,1332	0,9999	0,0442	0,0283	0,9998
PLA/NCC5	CP8	0,2177	0,1650	0,9998	0,0543	0,0364	0,9998
	CP9	0,2062	0,1389	0,9999	0,0487	0,0316	0,9998
	CP10	0,1998	0,1327	0,9999	0,0519	0,0338	0,9998
	CP11	0,2115	0,1585	0,9999	0,0506	0,0340	0,9998

Conforme observado na Tabela 4, os menores valores de RMSE e MAE foram obtidos para o composto PLA/NCC3, indicando uma redução significativa no erro e maior acurácia de previsão para este material. Além disso, os valores de R² para todos os nanocompósitos foram próximos de 1, demonstrando um excelente ajuste do modelo preditivo, com alta correspondência entre os valores reais e os previstos.

Os resultados obtidos neste estudo mostram que a incorporação de 3% em peso de NCC no PLA resultou em uma melhoria significativa na precisão preditiva tanto para tensão quanto para deformação em comparação com os outros compósitos. O nanocompósito PLA/NCC3 exibiu a menor taxa de erro para ambas as métricas (RMSE e MAE), destacando-se como a combinação mais eficaz para uma redução de erro e ajuste do modelo.

A Figura 11 mostra a média e o desvio padrão dos valores de RMSE para a precisão preditiva de tensão e deformação em nanocompósitos de PLA puro e PLA/NCC. No gráfico da Figura 11(a), relacionado à tensão (MPa), observa-se que o PLA puro apresentou o maior valor de RMSE, indicando um maior erro na previsão na tensão pelo modelo preditivo. Em contraste, o compósito PLA/NCC mostraram uma redução significativa no RMSE, com PLA/NCC3 exibindo o menor erro preditivo, sugerindo que esta concentração NCC é a mais eficaz na melhoria da precisão da previsão de tensão.

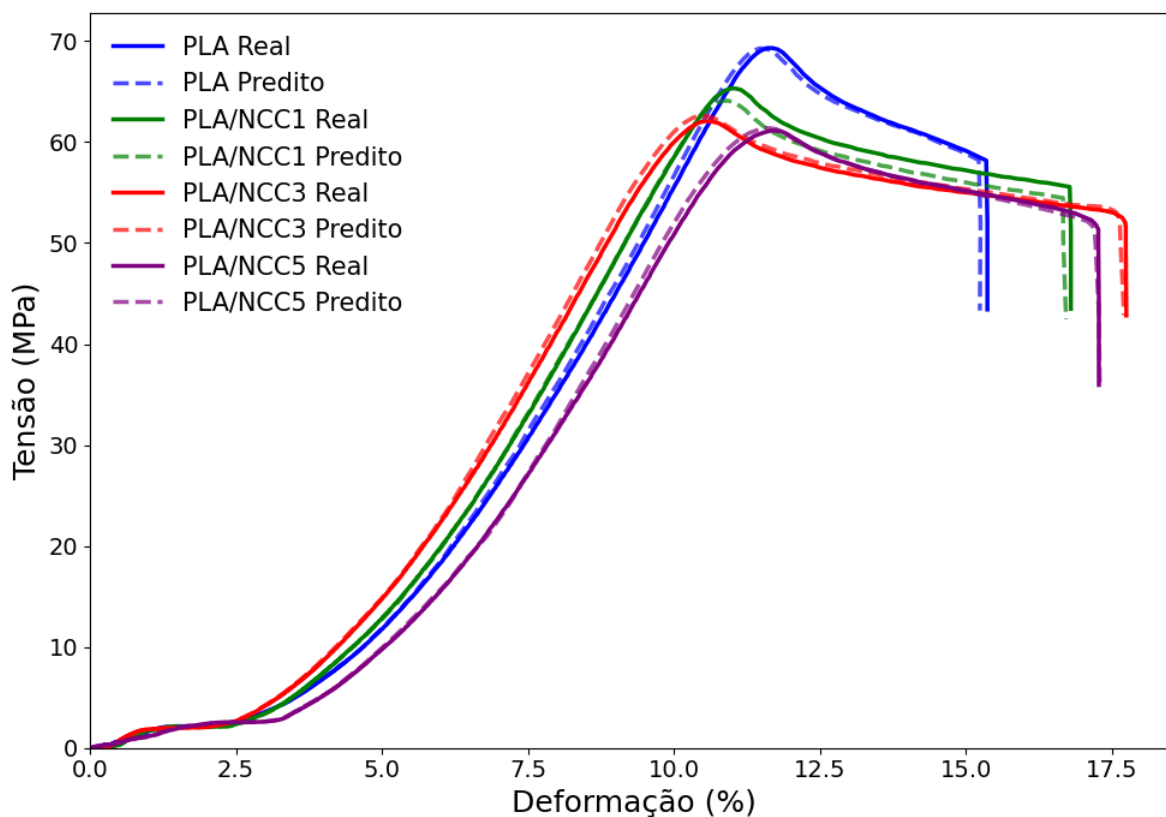
Figura 11 - Média e desvio padrão da precisão RMSE para cada tipo de compósito: (a) tensão (MPa) e (b) deformação (%).



No gráfico da Figura 11(b), relativo à deformação (%), os compósitos PLA/NCC também apresentaram menores valores de RMSE comparados ao PLA puro, indicando maior precisão na previsão de deformação. Embora a diferença entre os compósitos PLA/NCC1 e PLA/NCC3 é menos pronunciada neste caso, a adição do NCC resultou em uma amostra com comportamento mecânico que melhor se adequou ao modelo, melhorando a precisão preditiva em comparação com PLA puro para ambos os parâmetros, melhorando assim a confiabilidade do modelo preditivo na previsão das propriedades mecânicas dos nanocompósitos.

. A Figura 12 mostra exemplos de ensaios experimental de teste de tração (linhas sólidas) e as curvas previstas (linhas pontilhadas) pelo modelo RNA.

Figura 12 - Curvas de tensão-deformação experimentais (linha sólida) e previstas (linha pontilhada) dos materiais preparados.



Observa-se que a comparação dos dados experimentais com as previsões do modelo mostra que o modelo desenvolvido reproduz com uma alta precisão o comportamento mecânico dos nanocompósitos. O modelo proposto gerou previsões que seguem de perto as curvas reais, demonstrando a robustez do modelo RNA na captura das propriedades mecânicas destes materiais. Portanto, se evidencia uma alta correspondência dos valores reais aos preditos.

5.3 PARÂMETROS DE CARACTERIZAÇÃO DAS CURVAS

Após as previsões bem-sucedidas de tensão e deformação, a próxima seção detalha os resultados, demonstrando a eficácia do modelo. Todos os corpos de prova usados como dados de teste foram considerados. A Tabela 5 apresenta os valores dos parâmetros reais e aqueles calculados a partir do curvas sintéticas geradas pelo modelo preditivo.

Tabela 5 - Erros de parâmetros reais e gerados pelo modelo com os dados de teste.

Amostra	Força Máxima (N)		Tensão na Força Máxima (MPa)		Alongamento Máximo (%)		Módulo de Young (MPa)		Fratura (MPa)	
	Real	Modelo	Real	Modelo	Real	Modelo	Real	Modelo	Real	Modelo
PLA	735,06	734,53	69,17	69,12	15,06	15,83	500,46	497,99	59,05	54,14
	723,02	734,55	68,25	69,33	17,05	15,36	479,82	503,86	56,58	51,34
PLA/NCC1	681,31	683,67	65,11	65,34	18,22	16,78	451,38	506,83	54,30	50,51
	673,63	681,51	64,57	65,32	17,91	15,48	460,35	502,24	54,33	52,08
	686,20	682,20	65,98	65,59	17,97	15,11	460,03	526,04	55,24	53,98
	688,29	688,36	65,17	65,17	17,43	15,70	467,12	505,57	55,12	52,56
	677,82	689,78	65,17	66,32	16,66	17,50	475,94	527,67	54,17	53,46
PLA/NCC3	670,84	658,42	63,32	62,15	18,79	17,72	412,89	518,26	46,98	48,69
	646,23	664,16	62,52	64,86	14,77	18,76	510,10	550,55	53,61	44,87
	655,48	649,45	63,42	62,84	16,63	18,89	473,92	524,54	52,07	49,10
	671,54	651,48	64,77	62,84	21,14	18,89	385,16	524,54	52,58	49,10
	663,86	646,45	64,23	62,54	15,70	14,79	493,39	541,03	53,15	48,69
PLA/NCC5	661,76	631,94	64,03	61,14	16,21	17,26	478,25	441,46	52,27	49,13
	656,18	666,97	62,90	63,93	16,13	15,37	453,97	535,59	52,99	50,06
	660,37	662,24	63,30	63,48	15,39	16,21	487,10	526,44	50,85	49,44
	645,71	656,24	61,89	62,90	17,27	16,13	426,09	468,72	51,99	49,49
<i>Média</i>	<i>674,83</i>	<i>673,87</i>	<i>64,61</i>	<i>64,55</i>	<i>17,02</i>	<i>16,61</i>	<i>463,50</i>	<i>512,58</i>	<i>53,46</i>	<i>50,42</i>
<i>Desvio Padrão</i>	<i>24,80</i>	<i>28,85</i>	<i>1,94</i>	<i>2,33</i>	<i>1,60</i>	<i>1,40</i>	<i>32,77</i>	<i>27,28</i>	<i>2,64</i>	<i>2,42</i>

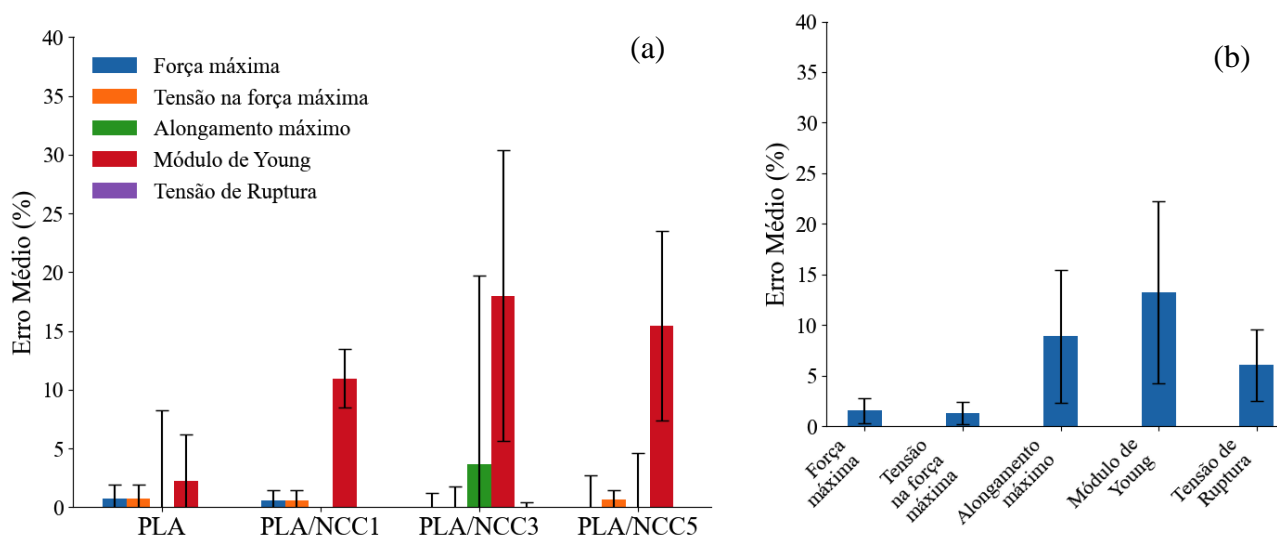
O modelo preditivo baseado em RNA demonstrou excelente desempenho na previsão de propriedades de resistência e deformação de nanocompósitos PLA/NCC, mostrando uma alta correlação entre valores experimentais e as previsões. A maior discrepância foi observada na previsão do módulo de Young, sugerindo que melhorias no processo de treinamento do modelo poderia aumentar sua precisão na captura dessas propriedades mecânicas. Mesmo assim, os resultados indicam que as RNAs são uma ferramenta promissora para estimar as propriedades mecânicas de materiais compósitos, reduzindo a necessidade de testes experimentais e impulsionando o desenvolvimento de materiais.

Os parâmetros de tensão máxima e a tensão de força máxima geralmente mostram uma tendência em direção a menor erro, indicando que o modelo preditivo demonstrou maior precisão neste parâmetro. Para a tensão de fratura, todos os erros foram negativos, indicando uma superestimação da resistência do material. Esses desvios sugerem que os dados previstos nem sempre estão alinhados com os valores experimentais, o que implica que algumas características de cálculo podem necessitar de melhorias. No entanto, vale

ressaltar que as curvas previstas demonstram uma acurácia amplamente semelhantes e aceitáveis em relação aos dados experimentais, conforme mostrado na Tabela 5.

A Figura 13 fornece uma análise detalhada dos erros percentuais médios dos valores reais e parâmetros mecânicos calculados.

Figura 13 - Erro médio no cálculo dos parâmetros gerados pelo sistema proposto. (a) erros para cada grupo de nanocomposição (b) erro médio geral.

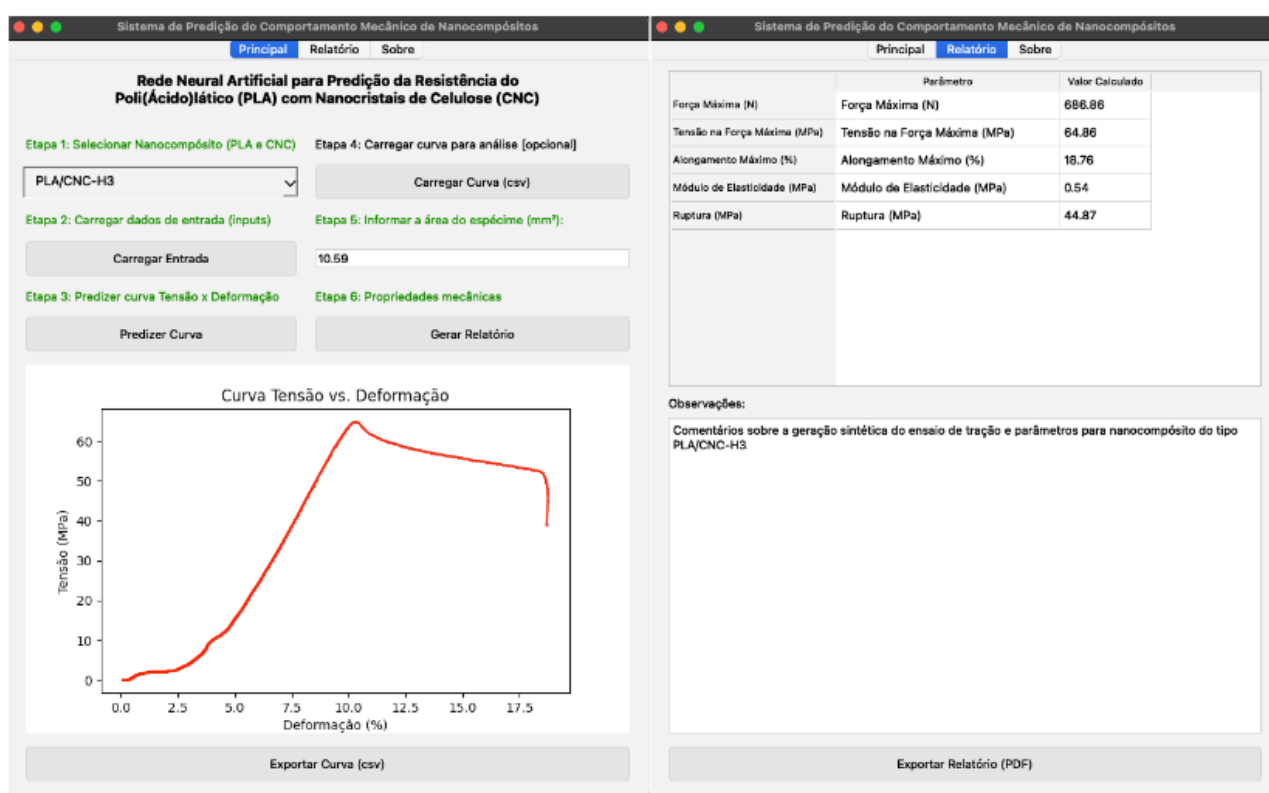


A Figura 13(a) apresenta os erros para cada grupo de nanocompósitos (PLA, PLA/NCC1, PLA/NCC3, PLA/NCC5) em comparação com os dados experimentais. É observado que o erro é mais significativo para o módulo de Young (em vermelho) para o grupo PLA/NCC3, enquanto o alongamento máximo mostra dispersão considerável para alguns compósitos.

Na Figura 13(b), pode-se observar que o erro médio geral foi relativamente baixo, variando entre aproximadamente 5% e 15%, com módulo de Young e alongamento máximo apresentando os maiores desvios. Isto implica que o cálculo foi realizado de forma satisfatória. O erro maior no módulo de Young sugere que o cálculo pode não estar capturando adequadamente a relação linear entre tensão e deformação nos materiais testados. Além disso, existem pontos de dados experimentais que se desviam do padrão, o que pode influenciar a variação nos erros, especialmente no compósito PLA/NCC3, onde uma amostra apresentou valores de propriedades mecânicas discrepantes. Para aprimorar o modelo, ajustes em sua arquitetura ou inclusão de dados experimentais mais variados podem ajudar a aumentar a precisão e generalização dos resultados.

Com erros médios inferiores a 15% nos cálculos dos parâmetros analisados, o sistema proposto pode ser uma solução prática para prever o comportamento mecânico de nanocompósitos, facilitando a análise e documentação de testes de tração com base em previsões precisas. A Figura 14 mostra a interface gráfica do software desenvolvido, responsável por gerar curvas de resistência sintética utilizando o modelo de RNA proposto para os quatro tipos de nanocompósitos de PLA/NCC (PLA, PLA/NCC1, PLA/NCC3 e PLA/NCC5).

Figura 14 – Interface do software desenvolvido para cálculo dos parâmetros mecânicos dos nanocompósitos de PLA/NCCs.



A partir do sistema computacional desenvolvido, o usuário fornece o arquivo de entrada (*input*), contendo informações do tipo de nanocompósito (Etapa 1), X Y, e o sistema prediz a curva de tensão x deformação para o nanocompósito selecionado (Etapa 3). Os dados da curva sintética (predita) podem ser exportados para um arquivo no formato *.csv*. Uma vez carregados este arquivo *.csv* da curva predita (Etapa 4), o sistema torna-se apto a calcular as propriedades mecânicas dos nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs

e gerar um relatório com todos os parâmetros calculados, o qual pode ser exportado em formato *.pdf* (Etapa 6).

6 CONCLUSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este estudo desenvolveu e validou um modelo preditivo baseado em RNA com boa acurácia na predição do comportamento mecânico de nanocompósitos de PLA reforçados com NCC, bem como o cálculo das propriedades mecânicas. Uma contribuição significativa deste trabalho é a capacidade de gerar modelos sintéticos utilizando um sistema computacional fundamentado em RNAs, eliminando a necessidade de amostras físicas e de equipamentos especializados para testes de tração. Essa abordagem reduz significativamente os custos e recursos associados a novos procedimentos experimentais. Este avanço representa um avanço substancial ao fornecer uma ferramenta computacional acessível para calcular parâmetros mecânicos pós-experimentais, que tradicionalmente exigiriam configurações de testes físicos dispendiosas.

Conforme mencionado, não se observou na literatura científica modelos preditivos para todos os tipos de nanocompósitos utilizados neste estudo. Além disso, a originalidade do método reside na sua escalabilidade e versatilidade de aplicação em uma variedade de materiais nanocompósitos, tornando-o um ativo valioso para diversas aplicações industriais. Com uma boa capacidade preditiva, este modelo facilita protocolos de otimização de materiais, permitindo uma integração mais eficiente nos processos de fabricação. A abordagem do estudo tem o potencial de agilizar as fases de projeto e teste de novos nanocompósitos, fornecendo um recurso relevante para a inovação da indústria e redução de custos.

As limitações deste estudo consistem na quantidade limitada de predições para os nanocompósitos que foram analisados neste estudo (PLA, PLA/NCC1, PLA/NCC3 e PLA/NCC5). Todavia, o método empregado, contemplando o modelo de predição e o sistema de cálculo dos parâmetros das curvas, permite o desenvolvimento e a agregação de modelos para outros tipos de materiais. Além disso, trabalhos futuros também contemplam a otimização do sistema de cálculo dos parâmetros relativos as propriedades mecânicas dos nanocompósitos de PLA reforçados com NCCs.

REFERÊNCIAS

ALINE ARNDT. **AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DE NANOCOMPÓSITOS DE POLIETILENO LINEAR DE BAIXA DENSIDADE E MONTMORILONITA ORGANOFÍLICA OBTIDOS POR EXTRUSÃO**. 2016. [S. l.], 2016.

ARAKI, J.; WADA, Masahisa; KUGA, Shigenori; OKANO, Takeshi. Flow properties of microcrystalline cellulose suspension prepared by acid treatment of native cellulose. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, [S. l.], v. 142, n. 1, p. 75–82, 1998. DOI: 10.1016/S0927-7757(98)00404-X. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S092777579800404X>.

ARRUDA, V. F. **MODELOS DE REDES NEURAIS, REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA E MÁQUINA DE VETORES DE SUPORTE NA PREVISÃO DA RESISTÊNCIA À COMPRESSÃO DO CONCRETO**. 2021. Pós graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. Belo Horizonte-Br. - orizonte-Br., Belo Horizonte-Br., 2021.

ASHBY, Michael F.; CEBON, D. **Materials selection in mechanical design**. Mrs Bull. [s.l: s.n.]. v. 30

GÉRON, A. **Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems**. [s.l: s.n.]. v. 2ed

BARANAUSKAITE, Valeriia E.; NOVOMLINSKII, Maxim O.; TUMKIN, Ilya I.; KHAIRULLINA, Evgeniia M.; MERESHCHENKO, Andrey S.; BALOVA, Irina A.; PANOV, Maxim S.; KOICHEMIROVSKY, Vladimir A. In situ laser-induced synthesis of gas sensing microcomposites based on molybdenum and its oxides. **Composites Part B: Engineering**, [S. l.], v. 157, p. 322–330, 2019. DOI: 10.1016/j.compositesb.2018.08.008.

BARROS, V. I. **ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DE NANOCRISTAIS DE CELULOSE APÓS REAÇÃO DE OXIDAÇÃO UTILIZANDO N-OXIL-2,2,6,6-TETRAMETILPIPERIDINA (TEMPO)**. 2020. título de Bacharel em Engenharia de Materiais. - Foz do Iguaçu, 2020. Disponível em: <https://dspace.unila.edu.br/server/api/core/bitstreams/0e472424-6e0b-4c60-abfa-b8e548aaf09d/content>. Acesso em: 1 dez. 2024.

BATTIROLA; GONÇALVES. Isocianatos como modificadores químicos de whiskers de celulose para aplicação na síntese de nanocompósitos poliméricos. Campinas, 2013.

BAUHOFER, Wolfgang; KOVACS, Josef Z. A review and analysis of electrical percolation in carbon nanotube polymer composites. **Composites Science and Technology**, [S. l.], v. 69, n. 10, p. 1486–1498, 2009. DOI: 10.1016/j.compscitech.2008.06.018.

BERGSTRA, J.; BENGIO, Y. “Random Search for Hyper-Parameter Optimization.” **Journal of Machine Learning Research**, [S. l.], 2012.

BEZERRAZ, E. N. **MORFOLOGIA E PROPRIEDADES MECÂNICAS DA FIBRA DE SISAL**

UNIDIRECIONAL E EM SOBREPOSIÇÃO DE COMPÓSITO COM RESINA EPÓXI. . 2013. Pos- graduacao - universidade federal do grande rio do norte, Natal - RN, 2013.

BISHOP, C. M. **Pattern Recognition and Machine Learning.** Springer. [s.l: s.n.].

BISONG, Ekaba. Google Colaboratory. *Em: Building Machine Learning and Deep Learning Models on Google Cloud Platform.* Berkeley, CA: Apress, 2019. p. 59–64. DOI: 10.1007/978-1-4842-4470-8_7. Disponível em: http://link.springer.com/10.1007/978-1-4842-4470-8_7.

BONNAR ANAK JORES, Jon; JAYAMANI, Elammaran; SIE MING LAI, Tasha; SUBRAMANIAN, Jeyanthi; REJEESH, C. R. Evaluation of mechanical property of banana HDPE composite through experiment and artificial neural network (ANN). **Materials Today: Proceedings**, [S. l.], 2023. DOI: 10.1016/j.matpr.2023.08.351. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2214785323046321>.

BORGES, F. J. G.; IARA FONTES DEMUNER; JORGE LUIZ COLODETTE; RUBENS CHAVES DE OLIVEIRA. **Produção e Caracterização de Nanofibrilas de Celulose para Manufatura de Papéis de Embalagem Nanoestruturados.** [s.l.]. Atena Editora, 2020. DOI: 10.22533/at.ed.555201908. Disponível em: <https://www.atenaeditora.com.br/post-ebook/3424>.

BOTCHKAREV, Alexei. A New Typology Design of Performance Metrics to Measure Errors in Machine Learning Regression Algorithms. **Interdisciplinary Journal of Information, Knowledge, and Management**, [S. l.], v. 14, p. 045–076, 2019. DOI: 10.28945/4184. Disponível em: <https://www.informingscience.org/Publications/4184>.

BREIMAN, Leo. Random forests. Machine Learning. **Machine Learning**, [S. l.], v. 45, n. 1, p. 5–32, 2001. DOI: 10.1023/A:1010933404324.

BRITO JÚNIOR, C. A. R.; BEZERRA, E. M.; PARDINI, L. C.; ANCELOTTI JÚNIOR, A. C.; PEREIRA, M. S.; DE BARROS, E.; DE CAMARGO, L. R. Redes neurais artificiais aplicadas para a predição do comportamento dinâmico-mecânico de compósitos de matriz epóxi reforçados com fibras de carbono. **Matéria (Rio de Janeiro)**, [S. l.], v. 12, n. 2, p. 346–357, 2007. DOI: 10.1590/S1517-70762007000200013. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1517-70762007000200013&lng=pt&tlng=pt.

BUDYNAS; NISBETT. **Shigley's mechanical engineering design.** 11ed. ed. [s.l: s.n.].

CALLISTER; RETHWISCH. **Ciencia e Engenharia de Meteriais - Uma introdução.** 8ed. ed. [s.l: s.n.].

DINIZ, C. A. **Otimização Estrutural de Elementos em Compósitos Usando Redes Neurais Artificiais.** 2017. Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. - Universidade federal de Itajubá, Itajubá-MG, 2017.

DE OLIVEIRA TAIPINA, M., Nanocristais de celulose: obtenção, caracterização e

modificação de superfície. **2012.**

DUFRESNE, Alain. Cellulose nanomaterial reinforced polymer nanocomposites. **Current Opinion in Colloid & Interface Science**, [S. l.], v. 29, p. 1–8, 2017. DOI: 10.1016/j.cocis.2017.01.004. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1359029416301510>.

ESPINOSA, S. C.; KUHNT, Tobias; FOSTER, E. Johan; WEDER, Christoph. Isolation of Thermally Stable Cellulose Nanocrystals by Phosphoric Acid Hydrolysis. **Biomacromolecules**, [S. l.], v. 14, n. 4, p. 1223–1230, 2013. DOI: 10.1021/bm400219u. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/bm400219u>.

FARAH, Shady; ANDERSON, Daniel G.; LANGER, Robert. Physical and mechanical properties of PLA, and their functions in widespread applications — A comprehensive review. **Advanced Drug Delivery Reviews**, [S. l.], v. 107, p. 367–392, 2016. DOI: 10.1016/j.addr.2016.06.012. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0169409X16302058>.

FORTUNA, A. **Impactos ambientais dos plásticos: biopolímeros como alternativa para a redução do acúmulo de embalagens flexíveis de Polipropileno no meio ambiente 2020.**

GONÇALVES, P. M. Nanocelulose aplicada à área de alimentos. [S. l.], 2022. DOI: <http://hdl.handle.net/11422/16630>.

HAYKIN, S. Neural Networks and Learning Machines. *Em*: 3ed. ed. [s.l: s.n.]. Disponível em: <https://dai.fmph.uniba.sk/courses/NN/haykin.neural-networks.3ed.2009.pdf>. Acesso em: 1 dez. 2024.

LALANNE-TISNÉ, Michael; EYLEY, Samuel; DE WINTER, Julien; FAVRELLE-HURET, Audrey; THIELEMANS, Wim; ZINCK, Philippe. Cellulose nanocrystals modification by grafting from ring opening polymerization of a cyclic carbonate. **Carbohydrate Polymers**, [S. l.], v. 295, p. 119840, 2022. DOI: 10.1016/j.carbpol.2022.119840.

LANDAU, L. J.; TAYLOR, J. G. **Concepts for Neural Networks**. 1st ed ed. [s.l: s.n.]. v. (Vol. 1). Disponível em: <https://www.amazon.com/Concepts-Neural-Networks-Perspectives-Computing/dp/3540761632>. Acesso em: 1 dez. 2024.

LECUN, Yann; BENGIO, Yoshua; HINTON, Geoffrey. Deep learning. **Nature**, [S. l.], v. 521, n. 7553, p. 436–444, 2015. DOI: 10.1038/nature14539.

LEITE, Liliame Samara Ferreira; BATTIROLA, Liliame Cristina; DA SILVA, Laura Caetano Escobar; GONÇALVES, Maria do Carmo. Morphological investigation of cellulose acetate/cellulose nanocrystal composites obtained by melt extrusion. **Journal of Applied Polymer Science**, [S. l.], v. 133, n. 44, 2016. DOI: 10.1002/app.44201. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/app.44201>.

LIU, Gui-Rong. **Métodos sin malla: más allá del método de elementos finitos.** [s.l: s.n.].

LI, Xuan; QI, Chenxi; HAN, Linyuan; CHU, Chenglin; BAI, Jing; GUO, Chao; XUE, Feng; SHEN, Baolong; CHU, Paul K. Influence of dynamic compressive loading on the in vitro degradation behavior of pure PLA and Mg/PLA composite. **Acta Biomaterialia**, [S. l.], v. 64, 2017. DOI: 10.1016/j.actbio.2017.08.004.

MANO, E. B.; MENDES, L. C. Introdução a Polímeros. *Em*: EDITORA EDGARD BLUCHER LTDA (org.). 2. ed. ed. Sao Paulo: Edgard Blucher, 1999.

MIAO, Chuanwei; HAMAD, Wadood Y. Critical insights into the reinforcement potential of cellulose nanocrystals in polymer nanocomposites. **Current Opinion in Solid State and Materials Science**, [S. l.], v. 23, n. 4, p. 100761, 2019. DOI: 10.1016/j.cossms.2019.06.005. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1359028619300798>.

MINING, E. Python Machine Learning: Understand Python Libraries (Keras, NumPy, Scikit-Lear, TensorFlow) for Implementing Machine Learning Models in Order to Build Intelligent Systems. **Amazon Digital Services LLC - KDP Print US.**, [S. l.], 2019. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=qqQdzAEACAAJ>. Acesso em: 1 dez. 2024.

MONTGOMERY, Douglas C.; RUNGER, George C. **Applied Statistics and Probability for Engineers.** 7ed. ed. [s.l: s.n.].

MOON, R. J.; MARTINI, A.; NAIRN, J.; SIMONSEN, J.; YOUNGBLOOD, J., Cellulose nanomaterials review: structure, properties and nanocomposites. *Chemical Society Reviews* **2011**, 40 (7), 3941-3994.

PAUL, D. R.; ROBESON, L. M. Polymer nanotechnology: Nanocomposites. **Polymer**, [S. l.], v. 49, n. 15, p. 3187–3204, 2008. DOI: 10.1016/j.polymer.2008.04.017. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0032386108003157>.

NOBEL DE FÍSICA 2024 VAI PARA DOIS CIENTISTAS COM ESTUDOS SOBRE APRENDIZADO DE MÁQUINA. Direção: R. PEIXOTO. Disponível em: <https://g1.globo.com/ciencia/noticia/2024/10/08/nobel-de-fisica-2024-vai-para-john-hopfield-e-geoffrey-hinton.ghtml>. Acesso em: 1 dez. 2024.

RANA, Ashvinder Kumar; FROLLINI, Elisabete; THAKUR, Vijay Kumar. **Cellulose nanocrystals: Pretreatments, preparation strategies, and surface functionalization.** **International Journal of Biological Macromolecules**, 2021. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2021.05.119.

REDDY, Murali M.; VIVEKANANDHAN, Singaravelu; MISRA, Manjusri; BHATIA, Sujata K.; MOHANTY, Amar K. Biobased plastics and bionanocomposites: Current status and future opportunities. **Progress in Polymer Science**, [S. l.], v. 38, n. 10–11, p. 1653–1689, 2013. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2013.05.006. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0079670013000476>.

REZENDE, Mirabel C.; BOTELHO, Edson C. O uso de compósitos estruturais na indústria aeroespacial. **Polímeros**, [S. l.], v. 10, n. 2, 2000. DOI: 10.1590/s0104-14282000000200003.

REZENDE, S. O. Sistemas inteligentes: fundamentos e aplicações. **Manole.**, [S. l.], 2005.

ROACH, Paul; EGLIN, David; ROHDE, Kirsty; PERRY, Carole C. Modern biomaterials: a review—bulk properties and implications of surface modifications. **Journal of Materials Science: Materials in Medicine**, [S. l.], v. 18, n. 7, p. 1263–1277, 2007. DOI: 10.1007/s10856-006-0064-3. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/s10856-006-0064-3>.

ROCHA, L. P. C. B. **Modificação Superficial do Tecido de Malha de Ácido Polilático (PLA) por Tratamento Plasma**. [s.l.: s.n.].

RUSSELL, S.; NORVING, P. **Artificial Intelligence A Modern Approach Third Edition**. 3ed. Stuart Russell and Peter Norving, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.artint.2011.01.005>. Disponível em: [https://github.com/yanshengjia/ml-road/blob/master/resources/Artificial%20Intelligence%20-%20A%20Modern%20Approach%20\(3rd%20Edition\).pdf](https://github.com/yanshengjia/ml-road/blob/master/resources/Artificial%20Intelligence%20-%20A%20Modern%20Approach%20(3rd%20Edition).pdf). Acesso em: 1 dez. 2024.

SALAZAR K. Nanocompósitos poliméricos e a estabilidade térmica de fluidos de perfuração. [S. l.], n. Doutorado em Química UFES | Pesquisador no PRH-ANP 53.1, 2023. Disponível em: <https://www.linkedin.com/pulse/nanocomp%C3%B3sitos-polim%C3%A9ricos-e-estabilidade-t%C3%A9rmica-de-fluidos-salazar-4pmjf/>. Acesso em: 1 dez. 2024.

SANTOS, CAROLINA. **MODIFICAÇÃO SUPERFICIAL DO POLI (ÁCIDO LÁTICO) POR PLASMA FRIO**. 2016. [S. l.], 2016. Disponível em: <https://repositorio.ufsc.br/xmlui/handle/123456789/171232>. Acesso em: 1 dez. 2024.

SHCHERBAKOV, M. V.; BREBELS, A.; SHCHERBAKOVA, N. L.; TYUKOV, A. P.; JANOVSKY, T. A.; KAMAEV, V. A survey of forecast error measures. **World Applied Sciences Journal**, **24(24)**, 171–176., [S. l.], 2013. DOI: 10.5829/idosi.wasj.2013.24.itmies.80032.

SILVA, Rafael; HARAGUCHI, Shirani K.; MUNIZ, Edvani C.; RUBIRA, Adley F. Aplicações de fibras lignocelulósicas na química de polímeros e em compósitos. **Química Nova**, [S. l.], v. 32, n. 3, p. 661–671, 2009. DOI: 10.1590/S0100-40422009000300010. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422009000300010&lng=pt&nrm=iso&tlng=pt.

ŠIRVAITIENE, Anne; JANKAUSKAITE, Virginija; BEKAMPIENE, Paule; KONDRATAS, Alvydas. Influence of natural fibre treatment on interfacial adhesion in biocomposites. **Fibres and Textiles in Eastern Europe**, [S. l.], v. 100, n. 4, 2013. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/285947930>. Acesso em: 1 dez. 2024.

TAIB, Nur-Azzah Afifah Binti; RAHMAN, Md Rezaur; HUDA, Durul; KUOK, Kuok King; HAMDAN, Sinin; BAKRI, Muhammad Khusairy Bin; JULAIHI, Muhammad Rafiq Mirza Bin; KHAN, Afrasyab. A review on poly lactic acid (PLA) as a biodegradable polymer. **Polymer Bulletin**, [S. l.], v. 80, n. 2, p. 1179–1213, 2023. DOI: 10.1007/s00289-022-04160-y.

TAIPINA, O. M.; FERRAREZI, Marcia Maria Favaro; YOSHIDA, Inez Valéria Pagotto; GONÇALVES, Maria do Carmo. Surface modification of cotton nanocrystals with a silane agent. **Cellulose**, [S. l.], v. 20, n. 1, p. 217–226, 2013. DOI: 10.1007/s10570-012-9820-3.

VANDERFLEET, Oriana M.; REID, Michael S.; BRAS, Julien; HEUX, Laurent; GODOY-VARGAS, Jazmin; PANGA, Mohan K. R.; CRANSTON, Emily D. Insight into thermal stability of cellulose nanocrystals from new hydrolysis methods with acid blends. **Cellulose**, [S. l.], v. 26, n. 1, p. 507–528, 2019. DOI: 10.1007/s10570-018-2175-7. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/s10570-018-2175-7>.

VAPNIK, Vladimir N. **The Nature of Statistical Learning Theory**. New York, NY: Springer New York, 1995. DOI: 10.1007/978-1-4757-2440-0.

YANG, Li; SHAMI, Abdallah. On hyperparameter optimization of machine learning algorithms: Theory and practice. **Neurocomputing**, [S. l.], v. 415, p. 295–316, 2020. DOI: 10.1016/j.neucom.2020.07.061. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0925231220311693>.

ZHANG, Z.; FRIEDRICH, K. Artificial neural networks applied to polymer composites: a review. **Composites Science and Technology**, [S. l.], v. 63, n. 14, p. 2029–2044, 2003. DOI: 10.1016/S0266-3538(03)00106-4. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0266353803001064>.

APÊNDICE I

Procedimento para preparação dos nanocompósitos PLA/NCC.

I. PREPARAÇÃO NCC

Nanocristais de celulose (NCCs) foram preparados a partir de fibras de algodão por meio de hidrólise ácida, conforme descrito em estudos anteriores (ARAKI et al., 1998; TAIPINA et al., 2013). Para isso, 1 g de celulose foi adicionado a 35 mL de uma solução aquosa de HCl (4 mol/L) a 80 °C durante 225 minutos. A hidrólise foi interrompida pela adição de água deionizada gelada. O excesso de ácido foi removido através de ciclos de centrifugação a 12.000 rpm durante 15 minutos cada. Após cada ciclo, o sobrenadante foi substituído por água. Este processo foi repetido pelo menos três vezes. Após a centrifugação, as suspensões de nanocristais foram dialisadas em água até atingir um pH de aproximadamente 7.

II. PREPARAÇÃO DA MATRIZ NANOCRISTALINA DE CELULOSE CONCENTRADA

Foi preparada uma suspensão NCC em uma mistura de acetona e clorofórmio, e as composições dessas matrizes e dos nanocompósito sintetizados estão listadas na Tabela 6.

Tabela 6 - Código e composição de compósitos PLA/NCC.

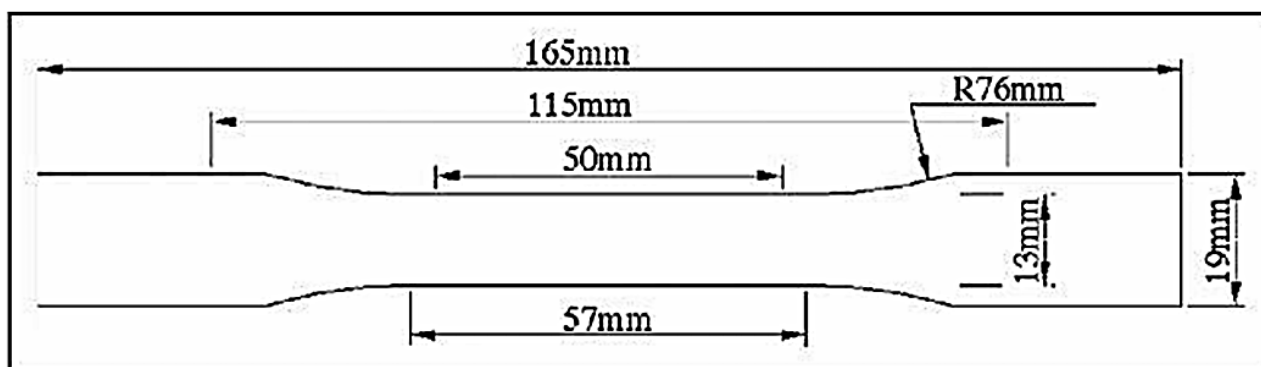
Amostras	Matrix Concentrada (g)			PLA total (g)	Composição Final (%)
	PLA	NCC	Acet/clorof		
PLA	12	0	100/200	88	100
PLA/NCC1	11	1	100/200	88	99/1
PLA/NCC3	9	3	100/200	88	97/3
PLA/NCC5	7	5	100/200	88	95/5

As suspensões de NCC foram adicionadas gota a gota a uma solução de PLA na mesma mistura de solventes a 55 °C e agitadas continuamente durante 1 hora. Após esse período, as soluções foram vertidas em moldes de Teflon® e deixados em temperatura ambiente durante a noite. Assim, os filmes foram colocados em estufa a vácuo por 8 horas a 55 °C para garantir a evaporação completa do solvente e a secagem do filme. Os filmes foram então processados utilizando um misturador Walita RI6780 até a obtenção de um pó.

III. PREPARAÇÃO DE NANOCOMPÓSITO

Os nanocompósito poliméricos foram fabricados de acordo com a norma ASTM D638-10 (Figura 15). Para isso, os materiais foram processados em miniextrusora dupla rosca DSM Xplore a 180 °C e 100 rpm com tempo de residência total de 1 minuto. Quantidades de PLA e uma mistura de PLA com o pó da matriz concentrada foram adicionadas em conjunto à alimentação da extrusora. Posteriormente, esses nanocompósitos foram injetados usando um miniinjetor DSM Xplore para produzir corpos de prova para testes de tração.

Figura 15 - Amostra de osso de cachorro ASTM D638.



Fonte: (BONNAR ANAK JORES et al., 2023).

IV. CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS

As propriedades mecânicas de tração foram obtidas de acordo com a norma ASTM D638-10, utilizando uma máquina de ensaios EMIC DL 200 com célula de carga de 5000 N e velocidade de deslocamento de 5 mm/min. Os testes de tração foram realizados em temperatura ambiente (25 °C) e umidade relativa.