



## ANÁLISE DE EFEITOS VISCOSOS NO ESCOAMENTO DE POLIPROPILENO EM EXTRUSORAS

André Imenes Oliveira de Alencar Fialho

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto  
Carlos Alberto Castor Jr.

Rio de Janeiro

Julho de 2020

ANÁLISE DE EFEITOS VISCOSOS NO ESCOAMENTO DE  
POLIPROPILENO EM EXTRUSORAS

André Imenes Oliveira de Alencar Fialho

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

---

Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto, D.Sc.

---

Dr. Carlos Alberto Castor Jr., D.Sc.

---

Prof. Sebastiao Vicente Canevarolo Jr., D.Sc.

---

Prof. Marcio Nele de Souza, D.Sc.

---

Dr. Thiago de Sá Feital, D.Sc.

---

Dr. Marcio Henrique dos Santos Andrade, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JULHO DE 2020

Fialho, André Imenes Oliveira de Alencar

Análise de Efeitos Viscosos no Escoamento de Polipropileno em Extrusoras/André Imenes Oliveira de Alencar Fialho. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2020.

XX, 158 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto

Carlos Alberto Castor Jr.

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2020.

Referências Bibliográficas: p. 148 – 158.

1. Extrusão. 2. *Polyflow*. 3. Reologia. I. Costa da Silva Pinto, José Carlos *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*”We shall not flag or fail.  
We shall go on to the end  
(...)  
We shall never surrender”  
Winston Churchill*



# Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a minha família e a minha namorada pelo suporte em todos os momentos.

Aos meus orientadores, Zé e Che, pelo suporte e pelos valorosos ensinamentos. As cobranças do Che, sempre me incentivando a ser cada vez melhor, e o otimismo do Zé, sempre dizendo que os resultados estavam ótimos quando nem eu acreditava neles, muito contribuíram para o meu desenvolvimento.

Ao Bruno, que não foi oficialmente meu orientador, mas assim o considerei durante toda a trajetória desse trabalho por toda a ajuda, pelos muitos ensinamentos sobre vários assuntos, pelas conversas nas noites solitárias no I-140 e pela motivação que muitas vezes me faltava.

Ao grupo de trabalho do projeto da extrusora, Zé, Che, Bruno e Tiago.

À Braskem, especialmente à Eliana, pelo suporte e confiança ao longo desse trabalho. Foi um grande desafio, mas que muito contribuiu para a minha formação.

Aos colegas dos laboratórios I-140 e G-130 pela ajuda e pelas conversas.

Ao CNPq e à COPPETEC pelo financiamento durante o desenvolvimento desse trabalho.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## ANÁLISE DE EFEITOS VISCOSOS NO ESCOAMENTO DE POLIPROPILENO EM EXTRUSORAS

André Imenes Oliveira de Alencar Fialho

Julho/2020

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto  
Carlos Alberto Castor Jr.

Programa: Engenharia Química

O polipropileno (PP) é um polímero termoplástico com larga aplicação industrial, sendo a extrusão uma das formas mais comuns de processá-lo. Devido à alta viscosidade do PP, os esforços mecânicos associados à operação da extrusora são muito grandes, podendo causar erosão no parafuso e levar a uma parada da extrusora ou inviabilizando a operação.

No presente trabalho foi ajustado um modelo reológico multivariável baseado no modelo Cross a partir de curvas de viscosidade de *grades* comerciais de PP. O modelo proposto foi incluído no *software* de Fluidodinâmica Computacional *Polyflow* (ANSYS) para avaliar os efeitos viscosos sobre o escoamento de PP em uma extrusora com auxílio de simulações computacionais. Concluiu-se que os efeitos térmicos envolvidos podem ser significativos durante o processo de extrusão. Além disso, a comparação dos resultados de simulação obtidos com dois *grades* que apresentavam massas molares distintas mostrou que a tensão de cisalhamento causada pelo *grade* com maior massa molar média é maior que a causada pelo *grade* com menor massa molar média e que os esforços viscosos são maiores na rosca do parafuso que no corpo cilíndrico. Esses resultados também foram confirmados pelo perfil de temperaturas obtido com base em modelagem matemática a parâmetros concentrados e permitem supor que o *grade* utilizado no processo de extrusão pode afetar o nível de desgaste do equipamento, maior na rosca do parafuso.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

## ANALYSIS OF VISCOUS EFFECTS IN POLYPROPYLENE FLOWS THROUGH EXTRUDERS

André Imenes Oliveira de Alencar Fialho

July/2020

Advisors: José Carlos Costa da Silva Pinto  
Carlos Alberto Castor Jr.

Department: Chemical Engineering

Polypropylene (PP) is a thermoplastic polymer that finds many industrial applications, being extrusion one of the commonest processing techniques. Because of the high viscosity of the PP melt, very high mechanical stresses can be associated with the extruding operation. It can lead to an erosion in the screw and it may be necessary to carry out the maintenance of the screw or the operation may become infeasible.

In the present work a multivariable rheological model based on the Cross equation was initially built and used to represent rheological curves of some commercial PP grades. Then, the proposed model was included in the Computational Fluid Dynamics software Polyflow (ANSYS) in order to evaluate the viscous effects associated with the PP flow in an extruder through simulations. It was concluded that thermal effects can be very significant during the PP extrusion process and that the shear stress profiles can be very sensitive to modification of the molar mass distributions of the analyzed PP grades. As a consequence, the viscous stresses are larger in the screw thread than in its cylindrical body. These results were also confirmed by the temperature profiles achieved through mathematical modeling considering lumped parameters and they suggest that both the operation conditions and the polymer grade can simultaneously affect the level of screw wear in the extruder, which is larger in the screw thread.

# Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática da molécula de polipropileno formada por $n$ moléculas de propileno. Figura extraída de (CRAWFORD e QUINN, 2017). . . . .	1
1.2	Classificação do polipropileno conforme a disposição espacial dos grupos metila. Figura extraída de WIKIPEDIA (2019). . . . .	2
1.3	Consumo de polipropileno em relação a outros termoplásticos. Figura adaptada de MAIER e CALAFUT (1998). . . . .	3
1.4	Componentes principais de uma extrusora monorosca simplificada. Adaptado de LAFLEUR e VERGNES (2014). . . . .	5
2.1	Classificação das patentes identificadas sobre "Extrusão de Polipropileno" . . . . .	9
2.2	Classificação das patentes identificadas sobre "Desgaste de Extrusoras" . . . . .	10
2.3	Classificação das patentes identificadas sobre "Extrusão de Polipropileno" e "Desgaste de Extrusoras" . . . . .	11
2.4	Figura extraída da patente: <i>Device for wear characterisation and extruder assembly</i> (2015). Depositante: Handle GMBH Maschinen und Anlagenbau. . . . .	11
2.5	Figura extraída da patente: <i>Method for determining wear in extrusion machines</i> (2003). Depositante: Battenfeld Extrusionstech. . . . .	12
2.6	Figura extraída da patente: <i>Determination of wear in extruders and injection molding machines involves combining two different materials to obtain third material of first color value, and comparing two color values to obtain difference</i> (1999). Depositante: Chroma Corp. . . . .	12
2.7	Classificação das patentes da propriedade da empresa Coperion GMBH . . . . .	13

2.8	Figura extraída da patente: <i>Measuring device and method for measuring the level of erosion of drill holes for extruder screws</i> (2008) . . .	14
2.9	Classificação das patentes da empresa Japan Steel Works LTD . . . . .	14
2.10	Figura extraída da patente: <i>Extruder has residual lifetime judging unit which determines whether residual lifetime of thrust bearing reaches limit based on acquired rotational speed and thrust-loading</i> (2008)	15
2.11	Efeito da concentração de peróxido no IF da resina produzida. Figura adaptada de AZIZI e GHASEMI (2003). . . . .	18
2.12	Curvas reológicas de polipropileno para diferentes concentrações de iniciador na temperatura de (a) 200°C e (b) 230°C. Figura adaptada de AZIZI e GHASEMI (2003). . . . .	19
2.13	Curva reológica da mistura (a) L-25/LCB-2.5 e (b) L-3.2/LCB-2.5, ambas a $T = 180^{\circ}C$ , para diferentes concentrações de LCB-2.5. Figura adaptada de MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015). . . . .	20
2.14	Forma funcional das viscosidades $\eta_0$ e $\eta_{\infty}$ com a massa molar média. Figura adaptada de DRABEK <i>et al.</i> (2018). . . . .	22
2.15	Sistema estudado por MACAULEY <i>et al.</i> (1998) (adaptado). . . . .	24
2.16	Tempo de residência nas extrusoras analisadas para a mesma taxa de alimentação e mesma velocidade de rotação dos parafusos. Figura adaptada do trabalho de CHANG e WHITE (2003). . . . .	25
2.17	Fluxograma proposto para resolução de problemas de desgaste em extrusoras. Figura extraída de RAUWENDAAL (2016). . . . .	26
2.18	Exemplos de roscas utilizadas para o processamento de polímeros. Figura extraída de MANRICH (2005). . . . .	28
2.19	Representação de uma extrusora como uma série de tanques de mistura.	29
2.20	Discretização da extrusora reportada por EITZLMAYR <i>et al.</i> (2014), sendo que <b>a</b> é a vazão de alimentação, <b>b</b> é a vazão causada pelo movimento do parafuso e <b>c</b> é a vazão causada pela pressão. . . . .	31
2.21	Temperatura do barril, do polímero fundido e do parafuso em cada elemento numérico. Figura adaptada de EITZLMAYR <i>et al.</i> (2014). . .	32
2.22	Exemplo de malha 2D estruturada não-ortogonal. . . . .	37
2.23	Exemplo de malha 2D estruturada em bloco. . . . .	38

2.24	Exemplo de malha 2D não-estruturada. . . . .	38
2.25	Elementos regulares constituintes de malha 2D: triângulo e quadrilátero. Figura extraída de ANSYS (2017a). . . . .	38
2.26	Elementos regulares constituintes de malha 3D: tetraedro, hexaedro, prisma e pirâmide. Figura extraída de ANSYS (2017a). . . . .	39
2.27	Exemplos de triângulo e quadrilátero simétrico e assimétrico. . . . .	40
2.28	<i>Softwares</i> usados nos trabalhos de simulação computacional com ferramentas de CFD. . . . .	42
2.29	Estrutura do <i>Polyflow</i> . Fonte: Adaptado de ANSYS (2017a). . . . .	44
2.30	Representação esquemática da (a) zona de mistura e da (b) unidade simulada. Figura extraída de XU <i>et al.</i> (2017). . . . .	46
3.1	Desenho esquemático de um reômetro do tipo placas paralelas. Figura adaptada de CZECHOWSKA <i>et al.</i> (2017). . . . .	56
3.2	Perfil característico de velocidades no reômetro de duas placas rotatórias. . . . .	58
3.3	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	60
3.4	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	61
3.5	Ajuste obtido com o modelo Bird-Carreau ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	62
3.6	Ajuste obtido com o modelo Bird-Carreau ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	63
3.7	Ajuste obtido com o modelo Carreau-Yasuda ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	64
3.8	Ajuste obtido com o modelo Carreau-Yasuda ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	65
3.9	Ajuste obtido com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	66
3.10	Modelo Cross ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	67
3.11	Ajuste obtido com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	68
3.12	Ajuste obtido com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H503HS; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	69
3.13	Ajuste obtido com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	70

3.14	Ajuste obtido com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H614 RJ; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	71
3.15	Ajuste obtido com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H614 SP; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	72
3.16	Variação do parâmetro $m$ do modelo Cross com a temperatura e massa molar do <i>grade</i> de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem. . . . .	73
3.17	Variação do parâmetro $\lambda$ do modelo Cross com a temperatura e massa molar do <i>grade</i> de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem. . . . .	74
3.18	Variação do parâmetro $\eta_0$ do modelo Cross com a temperatura e massa molar do <i>grade</i> de PP. . . . .	75
3.19	Correlação entre os parâmetros $\alpha$ e $\eta_{00}$ da função $\eta_0(T, M_w)$ em função da temperatura de referência . . . . .	76
3.20	Parâmetro $\eta_{00}$ - Modelo Cross . . . . .	77
3.21	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	79
3.22	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H503HS; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	80
3.23	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	81
3.24	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H614 RJ; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	82
3.25	Ajuste obtido com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H614 SP; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	83
3.26	Variação do parâmetro $c$ do modelo <i>Power Law</i> Modificado com a temperatura e massa molar do <i>grade</i> de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem. . . . .	84
3.27	Variação do parâmetro $b$ do modelo <i>Power Law</i> Modificado com a temperatura e massa molar do <i>grade</i> de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem. . . . .	85
3.28	Variação do parâmetro $A$ do modelo <i>Power Law</i> Modificado com a temperatura e massa molar do <i>grade</i> de PP. . . . .	86

3.29	Variação do parâmetro $A_0$ do modelo <i>Power Law</i> Modificado com a massa molar do <i>grade</i> de PP. . . . .	87
4.1	Sistema utilizado na simulação computacional com base no artigo de WANG (2013), formado por a) domínio do parafuso (sólido) e b) domínio do fluido envolvendo o parafuso (líquido). . . . .	95
4.2	Algumas medidas importantes do parafuso utilizado para conduzir o estudo de CFD. . . . .	97
4.3	Representação esquemática da Técnica de Superposição de Malha (MST). Figura adaptada de GIGLIOTTI e PINHO (2015). . . . .	98
4.4	Contornos da simulação não-isotérmica. . . . .	99
5.1	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da constante de correção - dissipação viscosa tangencial. . . . .	104
5.2	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da constante de correção - dissipação viscosa axial. . . . .	104
5.3	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da constante de correção - dissipação viscosa tangencial e axial. . . . .	105
5.4	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da vazão de alimentação - dissipação viscosa tangencial. . . . .	107
5.5	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da vazão de alimentação - dissipação viscosa axial. . . . .	107
5.6	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da vazão de alimentação - dissipação viscosa tangencial e axial. . . . .	108
5.7	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da rotação do parafuso - dissipação viscosa tangencial. . . . .	109
5.8	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da rotação do parafuso - dissipação viscosa axial. . . . .	110
5.9	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da rotação do parafuso - dissipação viscosa tangencial e axial. . . . .	110
5.10	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da massa molar média de PP - dissipação viscosa tangencial. . . . .	111



5.11	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da massa molar média de PP - dissipação viscosa axial. . . . .	112
5.12	Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da massa molar média de PP - dissipação viscosa tangencial e axial. . . . .	112
5.13	Taxa de cisalhamento em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	116
5.14	Viscosidade em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	116
5.15	Velocidade axial em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	117
5.16	Pressão em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	117
5.17	Perfil da taxa de cisalhamento ao longo do parafuso obtida no trabalho de WANG (2013). . . . .	119
5.18	Comparação do perfil da taxa de cisalhamento ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação. . . . .	119
5.19	Planos de corte em $XY$ ao longo do eixo $Z$ nos pontos $0, 10 \text{ mm}, 20 \text{ mm}, 30 \text{ mm}, 40 \text{ mm}, 50 \text{ mm}$ e $60 \text{ mm}$ e linha em $(X, Y) = (0; 9, 9) \text{ mm}$ para a taxa de cisalhamento. . . . .	120
5.20	Perfil da viscosidade ao longo do parafuso obtido no trabalho de WANG (2013). . . . .	121
5.21	Comparação do perfil da viscosidade ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação . . . . .	121
5.22	Planos de corte transversal ao longo do eixo $Z$ nos pontos $0, 10 \text{ mm}, 20 \text{ mm}, 30 \text{ mm}, 40 \text{ mm}, 50 \text{ mm}$ e $60 \text{ mm}$ e linha em $(X, Y) = (0; 9, 9) \text{ mm}$ para a viscosidade . . . . .	122
5.23	Perfil da velocidade axial ao longo do parafuso do trabalho de WANG (2013). Nota-se que o autor usou o eixo longitudinal como sendo o eixo $X$ e a velocidade axial como velocidade $X$ . . . . .	123

5.24	Comparação do perfil da velocidade axial ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação. . . . .	123
5.25	Planos de corte transversal ao longo do eixo $Z$ nos pontos $0, 10 \text{ mm}, 20 \text{ mm}, 30 \text{ mm}, 40 \text{ mm}, 50 \text{ mm}$ e $60 \text{ mm}$ e linha em $(X, Y) = (0; 9, 9) \text{ mm}$ para a velocidade axial . . . . .	124
5.26	Perfil da pressão ao longo do parafuso do trabalho de WANG (2013).	125
5.27	Comparação do perfil da pressão ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação. . . . .	125
5.28	Planos de corte transversal ao longo do eixo $Z$ nos pontos $0, 10 \text{ mm}, 20 \text{ mm}, 30 \text{ mm}, 40 \text{ mm}, 50 \text{ mm}$ e $60 \text{ mm}$ e linha em $(X, Y) = (0; 9, 9) \text{ mm}$ para a pressão. . . . .	126
5.29	Comparação do perfil da tensão de cisalhamento ao longo do parafuso entre as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ) . . . . .	127
5.30	Perfil de temperaturas para os quatro casos não-isotérmicos (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	128
5.31	Perfis da taxa de cisalhamento nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	129
5.32	Perfis da viscosidade nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	130
5.33	Perfis da velocidade axial nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	131
5.34	Perfis da pressão nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	131
5.35	Perfis da dissipação viscosa nos casos não-isotérmicos (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	132
5.36	Perfis da tensão de cisalhamento nos casos isotérmico e não-isotérmico (em $Y = 8, 5 \text{ mm}$ ). . . . .	133
5.37	Perfis da tensão de cisalhamento nos casos isotérmico e não-isotérmico (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ). . . . .	134
5.38	Perfis da tensão de cisalhamento no caso isotérmico (em $Y = 9, 9 \text{ mm}$ ).	135

5.39	Perfis de temperatura nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	136
5.40	Perfis da taxa de cisalhamento nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	137
5.41	Perfis da viscosidade nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	138
5.42	Perfis da velocidade axial nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	138
5.43	Perfis da pressão nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	139
5.44	Perfis da tensão de cisalhamento nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 8,5 \text{ mm}$ ). . . . .	140
5.45	Perfis da tensão de cisalhamento nos dois casos não-isotérmicos para cada <i>grade</i> (em $Y = 9,9 \text{ mm}$ ). . . . .	141

# Lista de Tabelas

2.1	<i>Grades</i> de PP utilizados no trabalho de MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015). . . . .	20
2.2	Características dos <i>grades</i> de PP usados nos ensaios de reologia. Adaptado de DRABEK <i>et al.</i> (2018). . . . .	21
2.3	Formas funcionais dos modelos reológicos de PP disponíveis na literatura. . . . .	23
2.4	Massas molares ponderais médias das resinas de PP produzidas no trabalho de CHANG e WHITE (2003). . . . .	24
2.5	Medidas principais de uma extrusora convencional com base no diâmetro nominal do parafuso. . . . .	29
2.6	Faixas de valores do parâmetro <i>skewness</i> (ANSYS, 2017b). . . . .	40
2.7	Modelos reológicos presentes no <i>Polyflow</i> . . . . .	44
3.1	Características dos <i>grades</i> comerciais usados no trabalho . . . . .	55
3.2	Modelos reológicos clássicos (não aplicados para fluidos viscoelásticos) e modelo reológico empírico usados para estimação de parâmetros a partir dos dados experimentais. . . . .	56
3.3	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	60
3.4	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	61
3.5	Parâmetros estimados com o modelo Bird-Carreau ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	62
3.6	Parâmetros estimados com o modelo Bird-Carreau ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	63

3.7	Parâmetros estimados com o modelo Carreau-Yasuda ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	64
3.8	Parâmetros estimados com o modelo Carreau-Yasuda ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ ) . . . . .	65
3.9	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C$ )	66
3.10	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C$ )	67
3.11	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	68
3.12	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H503HS; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	69
3.13	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	70
3.14	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H614 RJ; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	71
3.15	Parâmetros estimados com o modelo Cross ( <i>Grade</i> H614 SP; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	72
3.16	Parâmetros $\eta_{00}$ , $\alpha$ e $T_{ref}$ da função $\eta_0(T, M_w)$ . . . . .	77
3.17	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H125; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	79
3.18	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H503HS; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	80
3.19	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H503; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	81
3.20	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H614 RJ; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	82
3.21	Parâmetros estimados com o modelo <i>Power Law</i> Modificado ( <i>Grade</i> H614 SP; $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ ) . . . . .	83
3.22	Parâmetros $\eta_{00}$ , $\alpha$ e $T_{ref}$ da função $A_0(T, M_w)$ . . . . .	87
4.1	Temperaturas do barril ( $T_{barrel}$ ), da entrada ( $T_{inlet}$ ) e do parafuso ( $T_{screw}$ ) para as simulações não-isotérmicas realizadas neste trabalho .	100

5.1	Dados de entrada do modelo matemático a parâmetros concentrados.	102
5.2	Propriedades físicas do polipropileno usado nas simulações. . . . .	103
5.3	Tempo de simulação associado às malhas do parafuso. . . . .	115
5.4	Tempo de simulação das malhas do domínio de fluido. . . . .	118

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xvi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação . . . . .	1
1.2 Problema . . . . .	4
1.3 Estrutura da Dissertação . . . . .	6
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>8</b>
2.1 Metodologia de Pesquisa . . . . .	8
2.2 Patentes . . . . .	8
2.2.1 Comentários Adicionais . . . . .	15
2.3 Artigos . . . . .	16
2.3.1 Reologia de Polipropileno . . . . .	17
2.3.2 Extrusão de Polipropileno . . . . .	23
2.3.3 Desgaste de Extrusoras . . . . .	25
2.3.4 Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados . . . . .	27
2.3.5 Simulação Computacional via CFD . . . . .	33
2.3.6 Estimação de Parâmetros . . . . .	47
2.3.7 Comentários Adicionais . . . . .	51
<b>3 Desenvolvimento do Modelo Reológico</b>	<b>54</b>

3.1	Materiais e Métodos . . . . .	54
3.2	Ajuste Inicial das Curvas . . . . .	59
3.3	Modelo Cross . . . . .	68
3.4	Modelo <i>Power Law</i> Modificado . . . . .	78
3.5	Comentários Adicionais . . . . .	88
<b>4</b>	<b>Metodologia da Modelagem Matemática</b>	<b>90</b>
4.1	Balanco de Massa e Energia . . . . .	90
4.2	Metodologia do Estudo de CFD . . . . .	94
<b>5</b>	<b>Resultados e Discussão</b>	<b>101</b>
5.1	Resultados da Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados .	101
5.1.1	Análise de Sensibilidade . . . . .	101
5.1.2	Comentários Adicionais . . . . .	113
5.2	Resultados das Simulações de CFD . . . . .	115
5.2.1	Análise de Convergência de Malhas . . . . .	115
5.2.2	Simulações não-Isotérmicas . . . . .	127
5.2.3	Comparação entre os <i>grades</i> H125 e H614 SP . . . . .	135
5.2.4	Comentários Adicionais . . . . .	141
<b>6</b>	<b>Conclusão e Sugestões para Trabalhos Futuros</b>	<b>144</b>
6.1	Conclusão . . . . .	144
6.2	Sugestões para Trabalhos Futuros . . . . .	146
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>148</b>



# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Motivação

O polipropileno (PP), cuja molécula é mostrada na Figura 1.1, é formado a partir da polimerização do propileno na presença de um catalisador sob condições controladas de temperatura e pressão. Nesse tipo de reação, as moléculas de propileno, chamadas de monômeros, reagem formando uma longa cadeia de polipropileno, chamado de polímero (MAIER e CALAFUT, 1998).

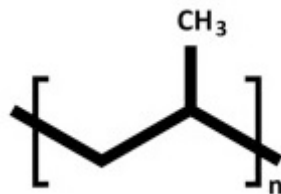


Figura 1.1: Representação esquemática da molécula de polipropileno formada por  $n$  moléculas de propileno. Figura extraída de (CRAWFORD e QUINN, 2017).

Os polímeros podem ser classificados de três formas distintas de acordo com a disposição espacial dos grupos metila (CANEVAROLO, 2006):

- Atático  $\rightarrow$  conformação na qual o grupo metila está posicionado de forma aleatória na cadeia de polipropileno;
- Sindiotático  $\rightarrow$  conformação na qual o grupo metila está posicionado de forma alternada nos lados da cadeia de polipropileno;
- Isotático  $\rightarrow$  conformação na qual o grupo metila está posicionado de forma alinhada em um dos lados da cadeia de polipropileno.

A Figura 1.2 mostra as três formas espaciais distintas do polipropileno quanto à disposição do radical metila.

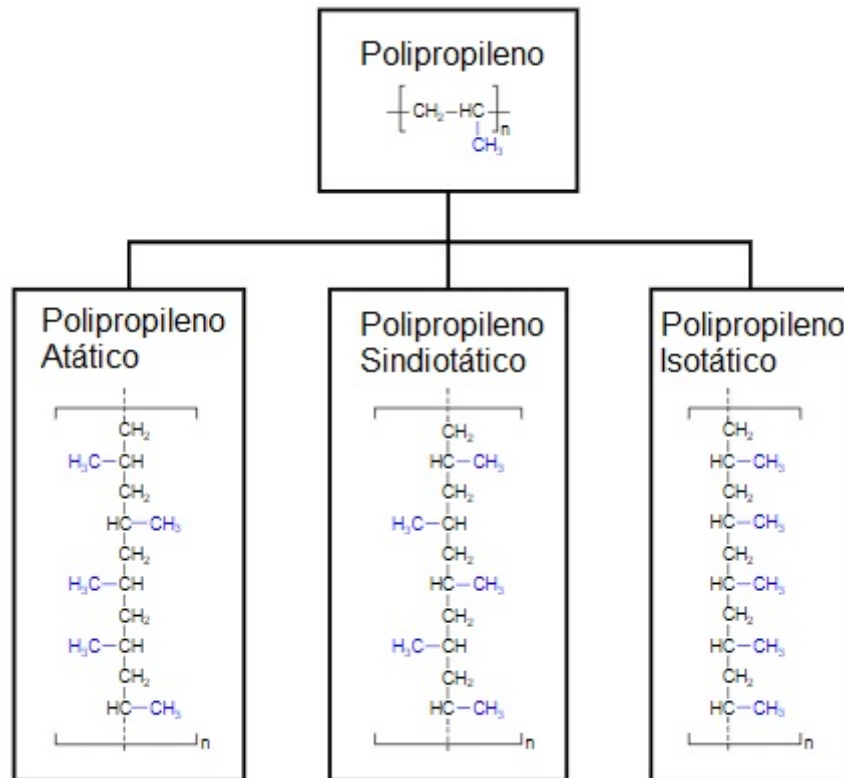


Figura 1.2: Classificação do polipropileno conforme a disposição espacial dos grupos metila. Figura extraída de WIKIPEDIA (2019).

O polipropileno é disponível comercialmente nas formas de homopolímero, copolímero aleatório e copolímero em bloco. O primeiro ocorre quando o polipropileno é formado pela polimerização apenas de moléculas de propileno, resultando em longas cadeias formadas por um mesmo mero, que é a forma da espécie química inserida na cadeia e resultante da incorporação do monômero. Os copolímeros são formados pela polimerização de propileno com pequenas quantidades de outros monômeros como etileno ou buteno, resultando em longas cadeias com meros oriundos desses monômeros intercalados entre as unidades de propileno. Os fatores que determinam se o copolímero tem estrutura aleatória ou de bloco são os mecanismos cinéticos, as taxas e os modos de operação das reações de polimerização. No caso de serem formadas seqüências curtas ou unidades individuais de monômeros diferentes do propileno, diz-se que o copolímero é aleatório; no caso de serem formadas seqüências longas desses monômeros, diz-se que o copolímero tem estrutura de bloco (MAIER e CALAFUT, 1998).

O polipropileno é um material termoplástico compatível com várias técnicas de processamento e que pode ser usado em diversas aplicações comerciais por conta

de suas características físico-químicas intrínsecas e dos aspectos econômicos. Por exemplo, o polipropileno é um dos termoplásticos com menor massa molar média e uma das poliolefinas mais rígidas, apresentando maior temperatura de fusão ( $160^{\circ}C$ - $170^{\circ}C$ ) e melhor resistência ao aquecimento que outras *commodities* termoplásticas. Além disso, apresenta excelente resistência química, está disponível em uma grande variedade de formas comercialmente relevantes e pode ser facilmente reciclado (MAIER e CALAFUT, 1998).

A Figura 1.3 mostra que a produção do polipropileno corresponde a aproximadamente 20% do mercado de termoplástico, sendo que, em termos de volume, é menor apenas que a do polietileno (PE) e a do policloreto de vinila (PVC). A popularidade do polipropileno pode ser explicada pelo fato de ser um dos termoplásticos mais versáteis devido a uma combinação de propriedades importantes para diversos usos, baixo preço e capacidade de processamento por meio de grande variedade de técnicas. (MAIER e CALAFUT, 1998)

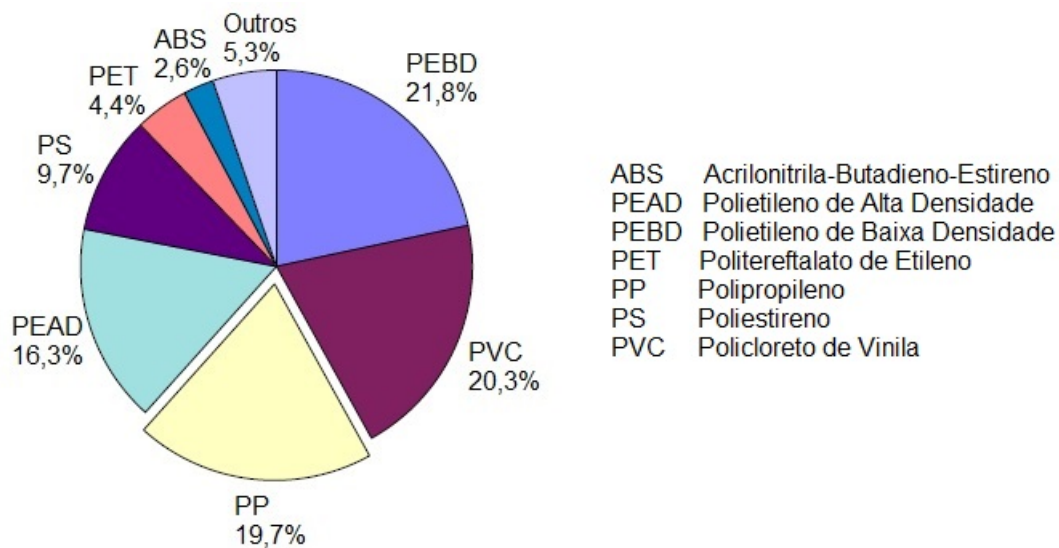


Figura 1.3: Consumo de polipropileno em relação a outros termoplásticos. Figura adaptada de MAIER e CALAFUT (1998).

Segundo MAIER e CALAFUT (1998), o processo de extrusão consiste fundamentalmente em elevar a temperatura de um polímero termoplástico até seu ponto de fusão e forçar sua passagem através de algum tipo de molde ou orifício para ser resfriado posteriormente na forma de peça, tubo, filme ou *pellet*. Esse processo é o mais utilizado no processamento de polipropileno e as extrusoras mais utilizadas são as do tipo rosca única e dupla rosca (MAIER e CALAFUT, 1998), sendo que as do tipo rosca única ainda são as mais comumente utilizadas na indústria de polímeros (RAUWENDAAL, 2014).

A primeira extrusora de termoplásticos foi construída por volta de 1935 e as primeiras análises do processo de extrusão estavam relacionadas principalmente às regiões do equipamento utilizadas para o transporte do polímero fundido. Posteriormente, as extrusoras passaram a ser aquecidas eletricamente e fabricadas com maiores comprimentos. Por volta de 1950, estudos científicos dos processos de extrusão tornaram-se mais frequentes, sendo que a partir de 1965 todo o processo, do funil de alimentação até o molde e o sistema de resfriamento, passou a ser descrito quantitativamente (RAUWENDAAL, 2014).

Segundo RAUWENDAAL (2014), os trabalhos sobre o processo de extrusão foram inicialmente desenvolvidos pela indústria de polímeros, sendo que, ao longo dos anos, grande parte da contribuição científica na área passou a ser oriunda da academia. Assim, enquanto originalmente eram perseguidos objetivos mais práticos sobre a operação de extrusão e o desenho dos equipamentos, atualmente os trabalhos se concentram principalmente no desenvolvimento de aspectos teóricos e no desenvolvimento de métodos numéricos e computacionais que permitem a interpretação dos complexos fenômenos que ocorrem nesses equipamentos, dando suporte ao projeto mais acurado de equipamentos e à otimização das operações industriais.

## 1.2 Problema

Usualmente o setor industrial dos termoplásticos precisa atender elevada demanda de produtos, de modo que, em muitas situações, é necessário utilizar múltiplos equipamentos, operados continuamente por tempos de operação muito longos. Nesse contexto, a manutenção dos equipamentos é feita principalmente durante as paradas das plantas industriais, demandando mais tempo para investigação e detecção de possíveis desgastes e a necessidade de reposição de peças. Ao longo deste trabalho, o termo desgaste é utilizado para designar a erosão mecânica que ocorre na rosca de extrusoras. Apesar desses equipamentos serem usados regularmente na indústria petroquímica, a investigação dos problemas existentes é muito complexa, demandando tempo, mão-de-obra especializada, monitoramento *online* de variáveis, entre outros fatores.

CAMPBELL e SPALDING (2013) abordam dois assuntos principais que estão relacionados ao tema da detecção e correção de falhas em operações de extrusão. O primeiro é a fundamentação teórica necessária para executar a modelagem matemática das diferentes seções de extrusoras, incluindo as zonas de transporte de sólidos, bombeamento e de mistura, além da descrição do processo de fusão dos polímeros nesses equipamentos. O segundo diz respeito ao conhecimento sobre os

problemas típicos que ocorrem em extrusoras e sobre como resolvê-los. Os problemas principais associados à operação desses equipamentos podem ser mecânicos, elétricos e resultantes das falhas de sensores, motores e seus componentes.

Um exemplo de problema mecânico abordado por CAMPBELL e SPALDING (2013) é o mau alinhamento entre o barril e o parafuso, considerado de extrema importância para a operação de uma extrusora. Segundo esses autores, um alinhamento que ultrapasse a tolerância permitida pode causar grande desgaste tanto no barril, quanto no parafuso e, dependendo do desvio, pode ocorrer até mesmo a fratura da rosca. Por isso os autores recomendam que o alinhamento seja realizado por pessoas treinadas e utilizando equipamentos ópticos ou sistemas de *laser*.

Os componentes principais de uma extrusora simples de parafuso único são mostrados na Figura 1.4.

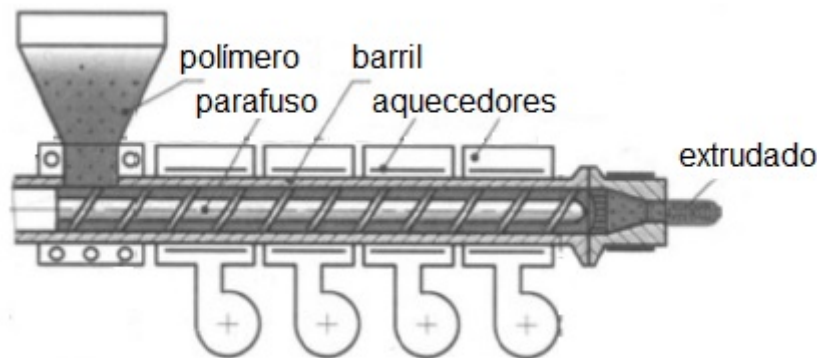


Figura 1.4: Componentes principais de uma extrusora monorosca simplificada. Adaptado de LAFLEUR e VERGNES (2014).

Segundo MANRICH (2005), uma extrusora deve apresentar os seguintes componentes:

- Funil adequado para alimentar tipos diferentes de matéria-prima;
- Barril e parafuso longos o suficiente para gerar pressão, plastificação e transferência de calor;
- Restrição após o parafuso para gerar pressão por meio da própria matriz ou de uma grelha, com ou sem telas filtrantes;
- Parafuso adequado para comprimir, cisalhar e homogeneizar o polímero;
- Resfriamento na zona de alimentação, para que não ocorra aderência da resina na superfície do parafuso nessa zona;

- Controle rígido da velocidade de rotação do parafuso e da temperatura ao longo do barril e da matriz;
- Possibilidade de variação de parâmetros operacionais para aumentar a versatilidade do processo;
- Matriz ou grelha, para oferecer resistência ao escoamento e permitir o desenvolvimento do perfil de temperaturas e de pressões, gerando condições para produzir filamentos, filmes ou alimentar moldes.

Como observado na descrição dos principais componentes de uma extrusora, os problemas associados ao seu funcionamento podem ocorrer em diversas regiões. Por esse motivo, a prevenção e a solução desses problemas requer o conhecimento do equipamento e de sua operação. Assim, o Capítulo 2 aborda em mais detalhes o processo de extrusão e as diferentes seções de uma extrusora.

Com base nos problemas típicos de extrusoras e das operações de extrusão, a presente dissertação tem como principal objetivo o estudo dos esforços viscosos causados pelo escoamento de polipropileno em extrusoras, de modo a avaliar se as forças cisalhantes são suficientemente grandes para causar desgaste no equipamento. Para obter os resultados perseguidos, esse estudo considera alguns objetivos específicos, como a proposição de um modelo reológico multivariável adequado para alguns *grades* comerciais de PP e de um modelo matemático a parâmetros concentrados com base nos balanços de massa e energia e na aproximação de uma extrusora como uma série de tanques de mistura. Os resultados finais também devem ser alcançados considerando objetivos específicos para o estudo de Dinâmica dos Fluidos Computacional (em inglês, *Computational Fluid Dynamics*, CFD), como a representação computacional da seção de uma extrusora e posterior análise dos perfis das principais variáveis envolvidas (velocidade, taxa e tensão de cisalhamento, pressão, temperatura, entre outras).

### 1.3 Estrutura da Dissertação

Essa dissertação está organizada nos seguintes capítulos: Introdução (Capítulo 1), Revisão Bibliográfica (Capítulo 2), Desenvolvimento dos Modelos Reológicos (Capítulo 3), Metodologia da Modelagem Matemática (Capítulo 4), Resultados e Discussão (Capítulo 5) e Conclusão e Sugestões de Trabalhos Futuros (Capítulo 6).

O Capítulo 2 (Revisão Bibliográfica) discute inicialmente as bases e classificações utilizadas para realizar buscas por patentes e artigos. Em seguida, são apresentados

os principais resultados levantados sobre os tópicos considerados mais relevantes nas literaturas técnica e científica para a condução do tema de estudo.

O Capítulo 3 (Desenvolvimento dos Modelos Reológicos) apresenta o ajuste de dados experimentais de *grades* comerciais de polipropileno em diversas temperaturas para alguns modelos reológicos, de modo a escolher o modelo mais adequado para uso em estudos de simulação. Adicionalmente, técnicas de estimação de parâmetros são aplicadas para discriminação dos modelos disponíveis, bem como para o desenvolvimento de modelos reológicos dependentes da taxa de cisalhamento, da massa molar média do polímero e temperatura.

O Capítulo 4 (Metodologia da Modelagem Matemática) discorre sobre os balanços de massa e energia a partir dos quais um modelo fenomenológico pode ser desenvolvido e sobre a forma como o estudo de CFD é conduzido, considerando a geometria do parafuso e do domínio de fluido, a técnica usada para construção da malha numérica e as condições de contorno utilizadas nas simulações fluidodinâmicas.

O Capítulo 5 (Resultados e Discussão) apresenta os principais resultados obtidos nessa dissertação, sendo dividido em duas seções: Resultados da Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados e Resultados das Simulações de CFD. A primeira seção apresenta, a partir de dados de extrusoras industriais, estudos de análise de sensibilidade em resposta aos efeitos das principais variáveis de processo e parâmetros geométricos da extrusora sobre os perfis de temperatura e das taxas de dissipação viscosa na extrusora, usando modelos de tanques em série como referência. A segunda seção apresenta inicialmente o estudo de convergência de malhas, seguido de estudos de simulação do escoamento conduzidos em condições isotérmicas e não-isotérmicas. Por fim, comparam-se também os resultados de simulação obtidos com dois *grades* de polipropileno e usando o modelo reológico desenvolvido.

O Capítulo 6 (Conclusão e Sugestões de Trabalhos Futuros) encerra o texto da dissertação por meio da apresentação das principais conclusões relacionadas ao trabalho desenvolvido e da indicação de estudos futuros associados aos principais temas avaliados.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 Metodologia de Pesquisa

O presente capítulo apresenta a revisão bibliográfica de periódicos científicos abertos e patentes relacionados ao processo de extrusão de polipropileno contida em duas bases de dados, *Espacenet* e *Derwent (Web of Science)*, considerando o período compreendido entre 1998 e 2020. Devido ao grande interesse industrial, o tema do desgaste de extrusoras foi incluído nessa pesquisa bibliográfica com o objetivo de avaliar a existência de mecanismos ou procedimentos que possam ser usados para retardar, identificar ou monitorar desgaste das extrusoras usadas nas indústrias de polipropileno. A pesquisa por patentes ainda considerou dois dos principais fabricantes de extrusoras no mundo: Coperion GMBH e Japan Steel Works LTD. Essa busca teve como objetivo principal avaliar quais são os principais problemas existentes ao longo do tempo de vida útil de um equipamento industrial (estrutural, de processo, entre outros) e os tipos de tecnologia que essas empresas empregam para a resolução desses problemas. Ressalta-se que o presente estudo não teve a pretensão de revisar toda a área de extrusão de termoplásticos, dado a enorme extensão dessa área e o fato de que materiais distintos são normalmente processados em condições de operação distintas e usando equipamentos com diferentes configurações. Por essa razão, a busca foi concentrada na área específica dos processos de extrusão de polipropileno.

### 2.2 Patentes

A busca por patentes foi conduzida sobre os temas "Extrusão de Polipropileno" e "Desgaste de Extrusoras", além de um estudo sobre as patentes depositadas pelas



duas principais empresas fabricantes de extrusoras industriais. O primeiro tema se refere aos assuntos diretamente relacionados ao processo de extrusão de polipropileno, resultando em 164 patentes cuja classificação é listada abaixo e mostrada na Figura 2.1.

- Material/produto – são as patentes nas quais o polipropileno é usado como matéria-prima para formar algum produto;
- Extrusora - são as patentes que apresentam inovações nas partes mecânicas ou nos componentes internos de extrusoras específicas para processamento de polipropileno;
- Processo de extrusão de PP – são as patentes que apresentam inovações quanto ao processo de extrusão de polipropileno;
- Processo de produção de PP – são as patentes que apresentam inovações na produção de polipropileno ou na formação de polipropileno modificado;
- Outros dispositivos – são as patentes nas quais o polipropileno é usado em algum dispositivo ou equipamento diferente de extrusora;
- Métodos/processos – são as patentes nas quais o polipropileno é usado em algum método ou processo.

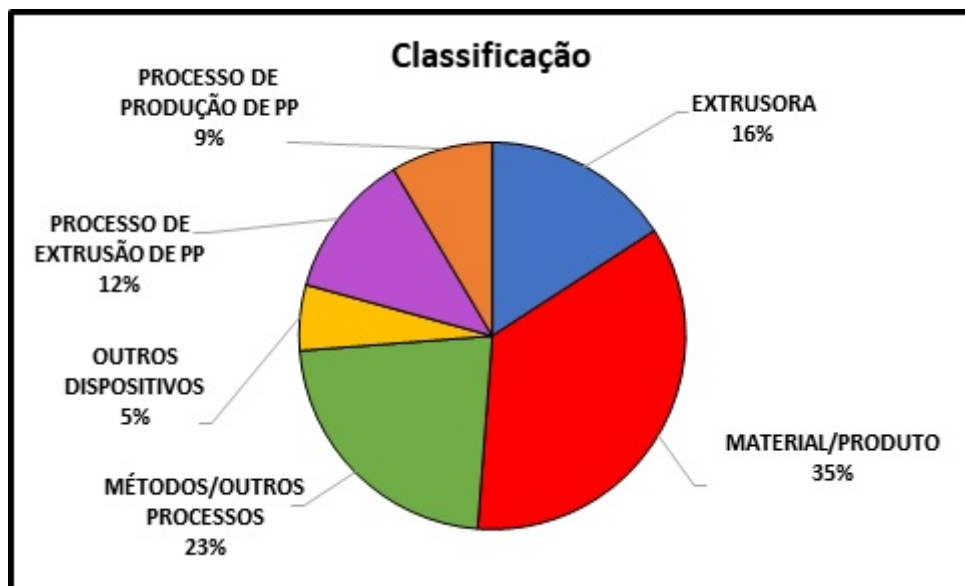


Figura 2.1: Classificação das patentes identificadas sobre "Extrusão de Polipropileno"

O segundo tema se refere aos assuntos diretamente relacionados aos métodos para impedir ou reduzir os problemas de desgaste de extrusoras, resultando em 34 patentes cuja classificação é listada abaixo e mostrada na Figura 2.2.

- Componente interno com proteção anti-desgaste – são as patentes que apresentam inovações não relacionadas ao desgaste de extrusoras;
- Detecção de desgaste – são as patentes que apresentam um método ou dispositivo para avaliar o desgaste de extrusoras;
- Fabricação de interno com proteção anti-desgaste – são as patentes que apresentam inovação na fabricação de um componente interno com proteção anti-desgaste;
- Material ou dispositivo para reduzir desgaste – são as patentes que apresentam um material ou dispositivo colocado nos componentes internos para reduzir o desgaste de extrusoras.

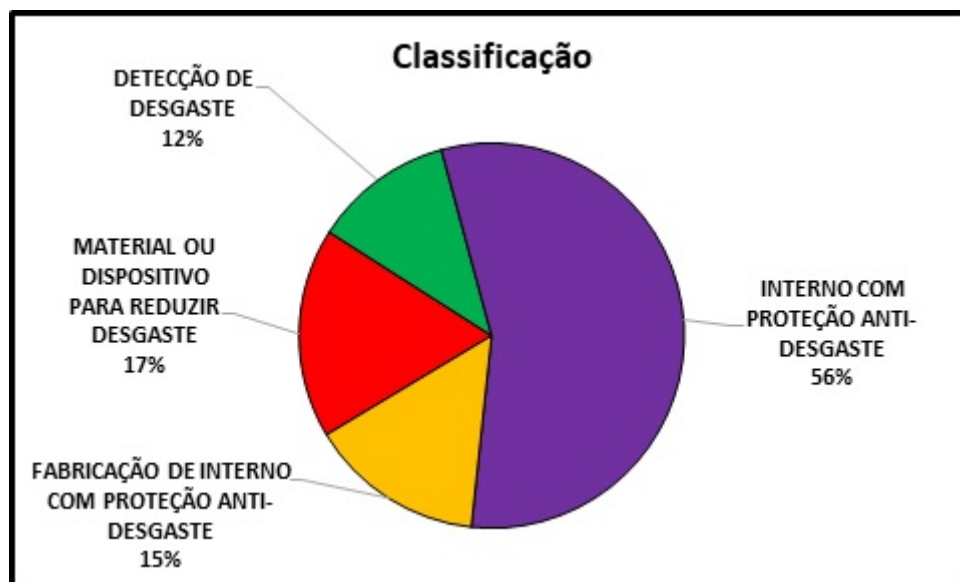


Figura 2.2: Classificação das patentes identificadas sobre "Desgaste de Extrusoras"

Considerando os dois temas pesquisados ("Extrusão de Polipropileno" e "Desgaste de Extrusoras"), resultando em um total de 198 patentes, obteve-se a classificação mostrada na Figura 2.3.

Pode-se observar que o estudo sobre "Extrusão de Polipropileno" (gráfico da direita na Figura 2.3) é responsável por 83% das patentes totais encontradas, enquanto o estudo sobre "Desgaste de Extrusora" (fatia colorida do gráfico da esquerda na Figura 2.3) é responsável por 17% desse universo.

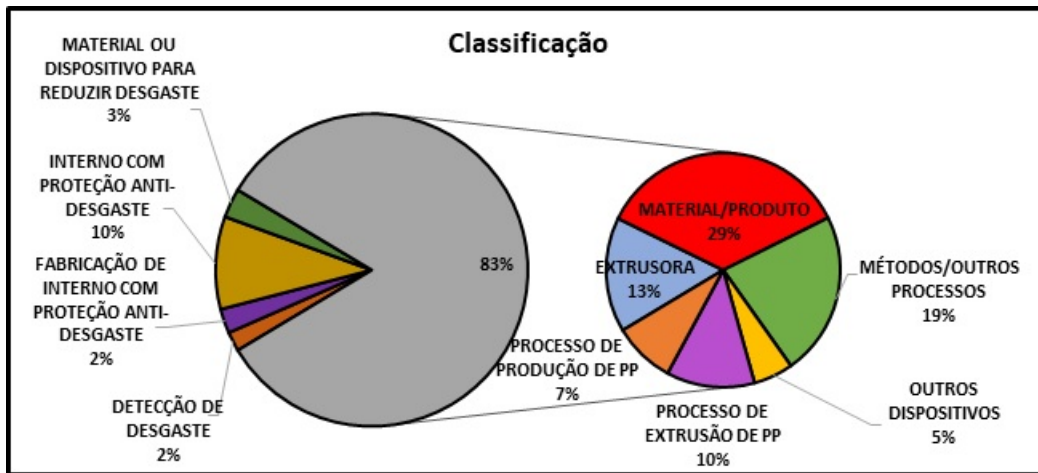


Figura 2.3: Classificação das patentes identificadas sobre "Extrusão de Polipropileno" e "Desgaste de Extrusoras"

Dentre as patentes pesquisadas, destacam-se algumas que dizem respeito à detecção de desgaste, como apresentado nos parágrafos que seguem e mostradas nas Figuras 2.4, 2.5 e 2.6.

- *Device for wear characterisation and extruder assembly* (2015) - Esta patente descreve um anel de teste para caracterizar o desgaste de materiais colocados em seu interior e sujeitos ao escoamento que passa através da extrusora (ANDREAS, 2015);

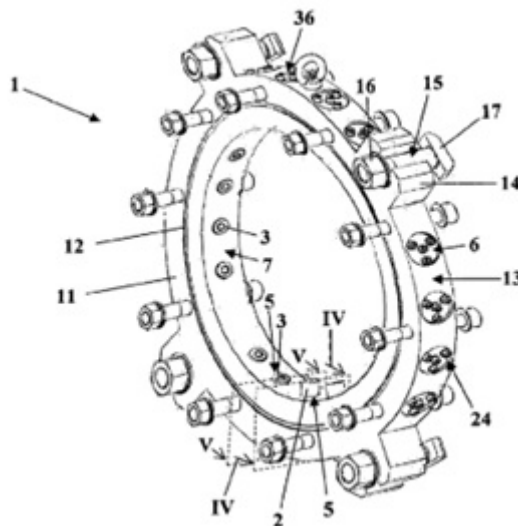


Figura 2.4: Figura extraída da patente: *Device for wear characterisation and extruder assembly* (2015). Depositante: Handle GMBH Maschinen und Anlagenbau.

- *Method for determining wear in extrusion machines* (2003) – Esta patente propõe a um método empírico para monitoramento do desgaste de uma extrusora. A curva de evolução de um parâmetro escolhido da extrusora deve ser



cionadas ao tema do desgaste de extrusoras, sendo que as patentes sobre detecção de desgaste representam apenas 12% do total de patentes relacionadas ao tema do “Desgaste de Extrusoras” e apenas 2% do número de total de patentes pesquisadas. Nota-se em particular que até nas patentes encontradas sobre detecção de desgaste não existem grandes inovações, já que os documentos tratam da implementação de técnicas de detecção empíricas e que exigem ou a intervenção física no processo ou a comparação com condições de operação estabelecidas como padronizadas.

Devido à importância econômica das extrusoras industriais para a produção de polímeros, conduziu-se uma pesquisa a respeito das patentes das empresas Coperion GMBH e Japan Steel Works LTD, que são as maiores e principais fornecedoras de extrusoras no mundo, inclusive as fabricantes das extrusoras utilizadas nas plantas de polipropileno que operam no Brasil.

A pesquisa sobre as patentes da empresa Coperion GMBH resultou em 12 documentos. A classificação dessas patentes é mostrada na Figura 2.7. Apesar das poucas patentes encontradas, percebe-se que quase 20% delas se referem ao tema da detecção de desgaste, enquanto os demais documentos se referem a aspectos de construção e projeto dos equipamentos.

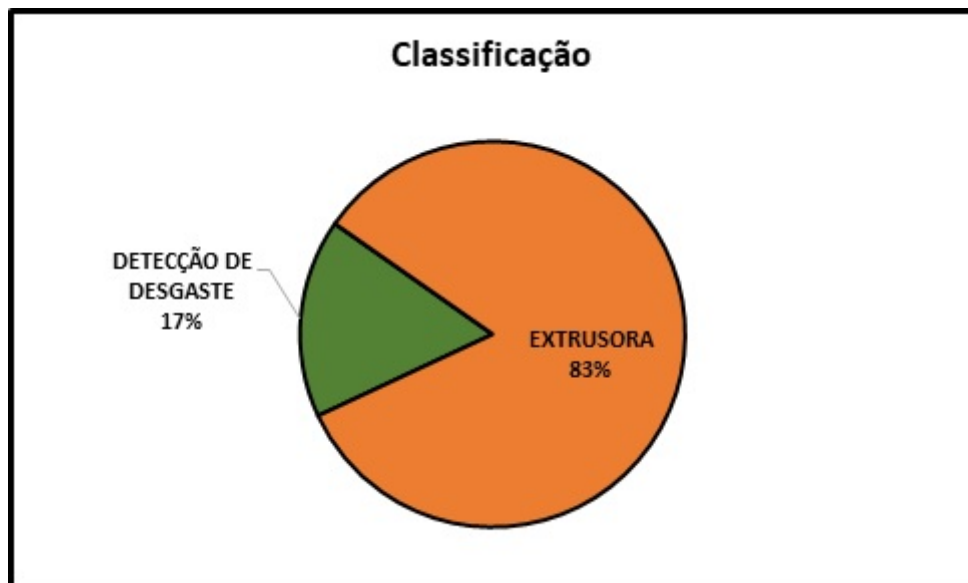


Figura 2.7: Classificação das patentes da propriedade da empresa Coperion GMBH

Dentre as patentes pesquisadas, destacam-se duas que tratam especificamente sobre o tema da detecção de desgaste, sendo que um documento é uma atualização do outro. A patente mais recente é mostrada na Figura 2.8.

- *Measuring device for detecting the state of wear of the bore walls of two interpenetrating housing bores* (2006) (RAINER, 2006);

- *Measuring device and method for measuring the level of erosion of drill holes for extruder screws* (2008) – Esta patente se refere a um dispositivo com rodas e sensores que deve ser colocado dentro da extrusora, após a remoção dos parafusos, para analisar o estado das paredes internas e identificação de desgaste (FELIX *et al.*, 2008).

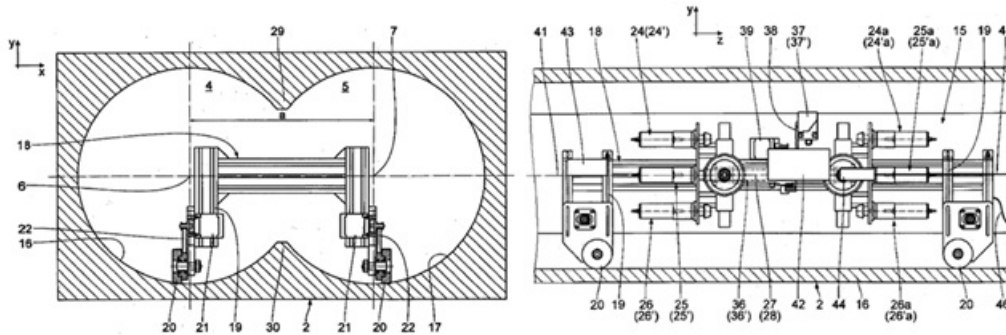


Figura 2.8: Figura extraída da patente: *Measuring device and method for measuring the level of erosion of drill holes for extruder screws* (2008)

A pesquisa conduzida sobre as patentes da empresa Japan Steel Works LTD resultou em 42 documentos. A classificação dessas patentes é mostrada na Figura 2.9. A JSW possui maior diversificação de patentes em relação à Coperion, mas apresenta menos patentes relacionadas ao tema “Desgaste de Extrusoras”.

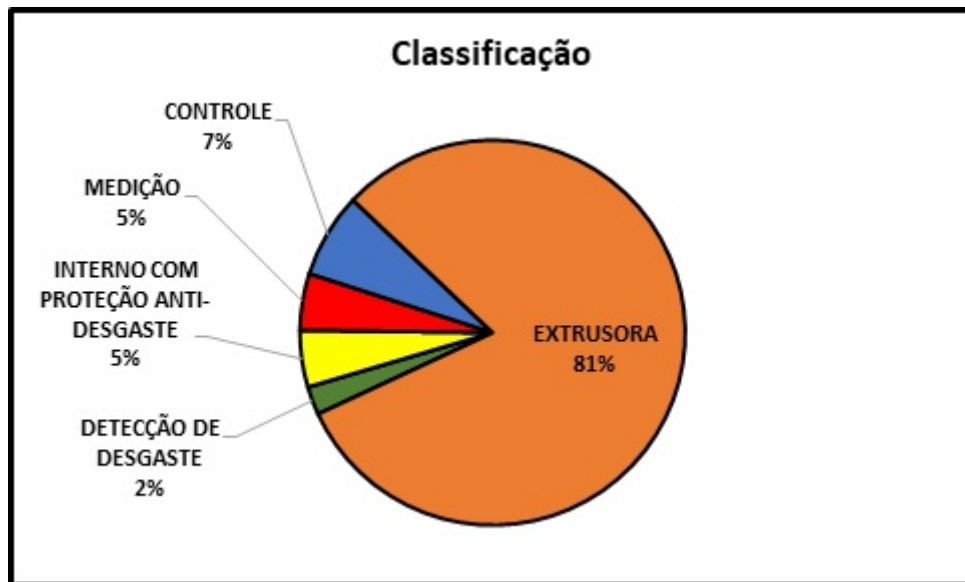


Figura 2.9: Classificação das patentes da empresa Japan Steel Works LTD

Dentre as patentes pesquisadas, destaca-se somente uma sobre o tema de detecção de desgaste, mostrada na Figura 2.10.

- *Extruder has residual lifetime judging unit which determines whether residual lifetime of thrust bearing reaches limit based on acquired rotational speed and thrust-loading* (2008) – Esta patente utiliza um método empírico baseado no acompanhamento da relação entre a velocidade de rotação do parafuso e a carga de alimentação para estimar a vida útil do equipamento (TODA, 2008).

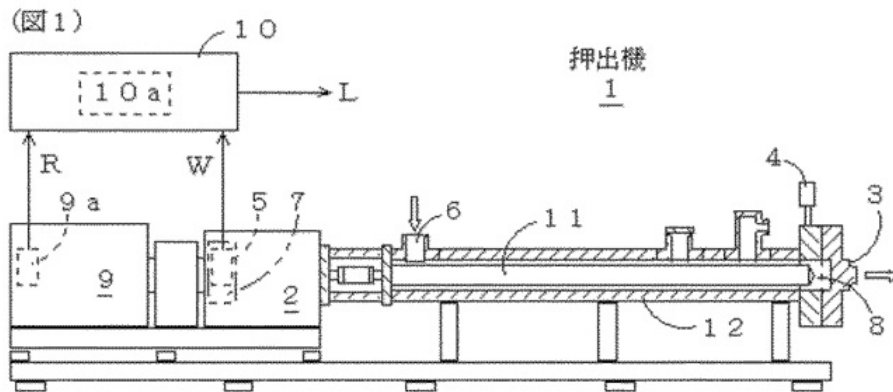


Figura 2.10: Figura extraída da patente: *Extruder has residual lifetime judging unit which determines whether residual lifetime of thrust bearing reaches limit based on acquired rotational speed and thrust-loading* (2008)

### 2.2.1 Comentários Adicionais

A busca por temas relacionados à extrusão de PP considerou especificamente assuntos relacionados à extrusão que envolvem, de alguma forma, o polipropileno. Um número relativamente elevado de patentes com diversas aplicações foi observado. A análise dos resultados indicou que a China apresenta domínio absoluto no setor e que existe um interesse crescente pelo tema. A análise dos depositantes dessas patentes mostrou que, apesar do grande número de documentos encontrados, poucas foram as empresas que depositaram mais de uma patente sobre o tema, com destaque para a Milliken Co, no topo da lista, com cinco patentes depositadas.

A busca por temas relacionados ao desgaste de extrusoras resultou em um baixo número de patentes encontradas, de forma que é possível concluir que tal tema vem sendo pouco explorado ao longo dos anos. As patentes mais relevantes se referem a métodos ou dispositivos utilizados para a caracterização do desgaste de extrusoras. Uma patente sobre um dispositivo a ser colocado na extrusora e as outras duas patentes sobre metodologias empíricas foram destacadas. Portanto, as poucas patentes sobre este assunto trazem formas de monitorar, de certa forma, o desgaste, mas não de entender suas causas ou evitar tais ocorrências.

A análise dos depositantes das patentes sobre "Desgaste de Extrusoras" mostrou

que são poucas as empresas dominantes no setor, sendo a maioria delas fabricantes de extrusoras, o que é esperado, pois as empresas desse ramo têm interesse na resolução de problemas envolvendo o desgaste desse tipo de equipamento industrial. Apesar disso, nenhuma delas possui um número significativo de patentes, sendo que apenas duas dessas empresas (Battenfeld Extrusionstechnik GMBH e Good Earth Tools Inc) possuem mais de uma patente, ambas com duas patentes depositadas.

Observa-se, portanto, que existe muito pouco estudo sobre a área de desgaste de extrusoras e nem mesmo as empresas fabricantes do equipamento publicaram material disponível na literatura técnica. Pode-se concluir que esse tema de estudo se encontra na fronteira do conhecimento e que avanços nesse sentido indicam possíveis inovações na área.

## 2.3 Artigos

A busca por artigos seguiu a mesma estratégia usada para as patentes: Reologia de Polipropileno, Extrusão de Polipropileno, Desgaste de Extrusoras, Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados, Simulação Computacional via CFD e Estimação de Parâmetros.

Os artigos disponíveis e referentes à reologia de polipropileno analisam principalmente aspectos do comportamento de diferentes *grades* deste polímero quando submetido a diferentes condições de operação, tais como: taxa e tensão de cisalhamento, temperatura, concentração de iniciador (usado para promover a degradação controlada do PP em extrusoras industriais), entre outras variáveis, além do comportamento reológico deste polímero como função do grau de ramificação das cadeias. Particularmente, os trabalhos publicados na literatura acerca do comportamento reológico do polipropileno estão focados em *grades* e condições de operação específicos, estando raramente disponíveis dados que descrevam o comportamento de mais do que um material como função de mais de uma variável, o que torna o uso desses dados inadequado para a formulação de modelos de interesse industrial, que devem abranger *grades* distintos em condições de operação distintas.

Os artigos disponíveis e referentes à extrusão podem ser divididos em duas categorias: alguns abordam a análise do comportamento do polipropileno durante o processo de extrusão, enquanto outros trabalhos estão focados na análise das características de diferentes extrusoras ou de diferentes elementos de parafuso.

A análise dos artigos relacionados ao tema do desgaste de extrusora teve como objetivo entender o que a academia vem pesquisando sobre o tema ao longo do



período de interesse. Como observado, esses artigos tratam essencialmente da caracterização do desgaste, não reportando a descrição do motivo ou da possível solução do problema.

A busca pelos artigos sobre a modelagem matemática fenomenológica do problema da extrusão do PP teve como objetivo entender os tipos de abordagem usados na literatura para propor os modelos de extrusora com base nos balanços de massa e energia. Como discutido adiante, os artigos encontrados tratam de abordagens bem diversificadas.

Finalmente, os artigos sobre simulação computacional em CFD de operação de extrusão do PP foram pesquisados com o intuito de possibilitar a compreensão acerca do que vem sendo feito na literatura acadêmica sobre a simulação numérica utilizando ferramentas de CFD para o estudo de extrusoras e do processo de extrusão de polímeros em geral. Por constituir um tema muito complexo, a grande maioria dos artigos trata de pequenas seções de extrusoras de laboratório e tais trabalhos focam, principalmente, no desenvolvimento ou aplicação dos métodos numéricos, no estudo do tempo de residência e da mistura que ocorre nas extrusoras e na análise das grandezas envolvidas no escoamento de polímero, havendo muito pouca informação disponível sobre o uso de ferramentas numéricas para a detecção de problemas operacionais em extrusoras industriais.

### 2.3.1 Reologia de Polipropileno

Esta seção reporta a revisão da literatura sobre os principais modelos reológicos utilizados para aplicação em problemas relacionados ao escoamento de polipropileno. Como já comentado, enfatizam-se os poucos modelos multivariáveis, em que a viscosidade pode ser descrita como função das muitas variáveis que afetam o processo de extrusão, tais como, taxa de cisalhamento, temperatura, pressão, índice de fluidez (IF), entre outras. Entretanto, a pesquisa resultou em conjuntos de artigos científicos sobre duas linhas de estudo principais:

- Estudo do processamento de diferentes tipos de polipropileno em diversas condições, como nos trabalhos de DRABEK e ZATLOUKAL (2016), MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015), CHIKHALIKAR *et al.* (2015), SUGIMOTO *et al.* (2006), FADIGAS (2006), AZIZI e GHASEMI (2003) e SUGIMOTO *et al.* (1998);
- Estudo de diferentes aspectos da reologia de polipropileno, não necessariamente relacionados ao desenvolvimento de modelos reológicos, como no tra-

balho de DRABEK *et al.* (2018), SYKUTERA *et al.* (2018), ARIS e VINCENT (2017), BUE *et al.* (2017), GUPTA *et al.* (2016), SMITS e HULTMARK (2015), CHEN *et al.* (2015), ARIFF *et al.* (2012), WU *et al.* (2012), DOUFAS *et al.* (2013) e COSTA (2005).

AZIZI e GHASEMI (2003) reportaram a extrusão reativa de PP usando peróxido de dicumila (DCP) como iniciador e conduzindo experimentos em uma extrusora co-rotativa de rosca dupla. O índice de fluidez, as propriedades mecânica, térmica e reológica foram medidas para avaliar os efeitos da concentração de iniciador (faixa de fração mássica entre 0,02% e 0,6%), temperatura ( $200^{\circ}\text{C}$  e  $230^{\circ}\text{C}$ ) e velocidade de rotação da extrusora (30 rpm e 70 rpm) sobre as propriedades do produto final. Os principais resultados do artigo são reproduzidos nas Figuras 2.11 e 2.12. A Figura 2.11 mostra que o aumento da concentração de iniciador aumenta o IF da resina produzida, com comportamento aproximadamente exponencial. A Figura 2.12 mostra que a viscosidade aparente diminui com a taxa de cisalhamento para todas as concentrações de iniciador nas duas temperaturas analisadas. O trabalho não identificou a natureza dos efeitos sobre *grades* distintos de PP.

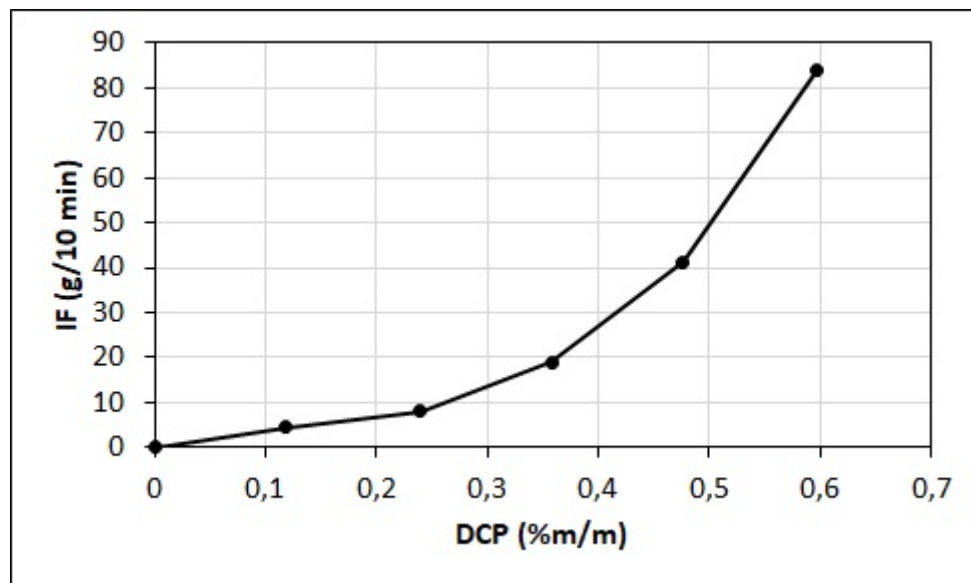
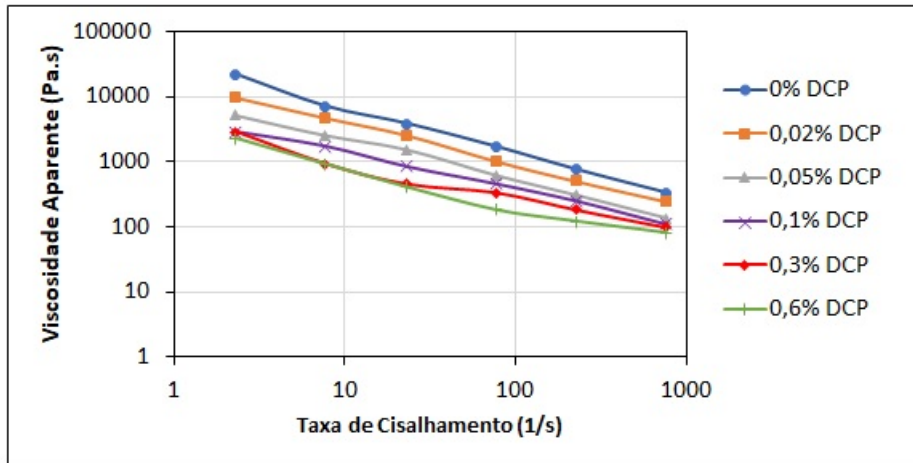
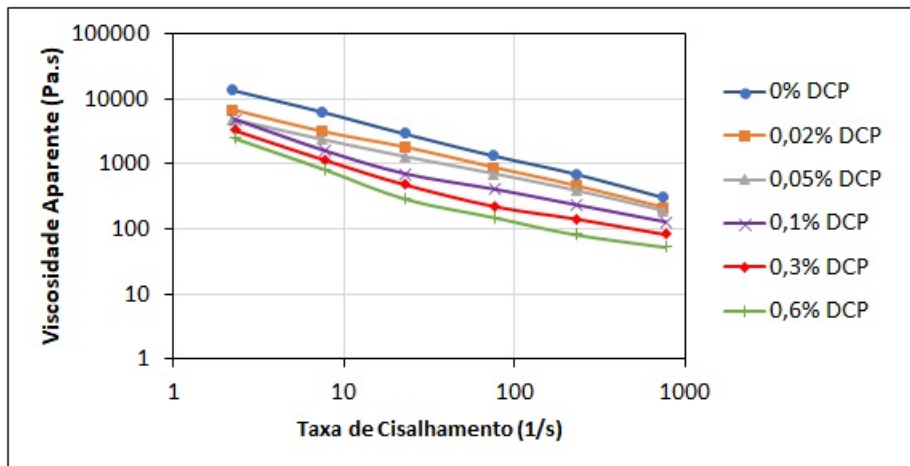


Figura 2.11: Efeito da concentração de peróxido no IF da resina produzida. Figura adaptada de AZIZI e GHASEMI (2003).



(a)



(b)

Figura 2.12: Curvas reológicas de polipropileno para diferentes concentrações de iniciador na temperatura de (a)  $200^{\circ}\text{C}$  e (b)  $230^{\circ}\text{C}$ . Figura adaptada de AZIZI e GHASEMI (2003).

MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015) investigaram as propriedades reológicas de quatro tipos de PP linear (L-PP) com diferentes massas molares quando misturadas com 10, 25, 50 e 75% (em fração mássica) com PP ramificado de cadeia longa (LCB-PP). Os *grades* utilizados no estudo são mostrados na Tabela 2.1, enquanto os principais resultados obtidos são mostrados na Figura 2.13.

Tabela 2.1: *Grades* de PP utilizados no trabalho de MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015).

Material	Nome Comercial	IF (g/10 min)	Mw (g/mol)
L-25	Z30S	25	$2,33 \times 10^5$
L-9	HP510M	9	$2,99 \times 10^5$
L-6	C30S	6	$3,44 \times 10^5$
L-3.2	RG1104K	3.2	$3,92 \times 10^5$
LCB-2.5	Pro-fax PF814	2.5	NA

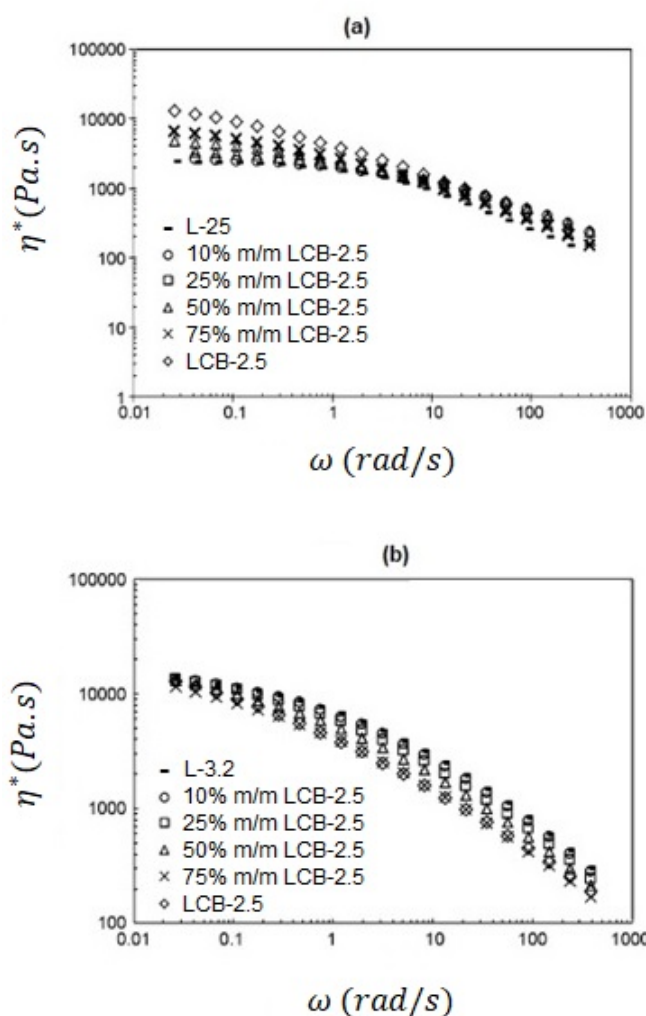


Figura 2.13: Curva reológica da mistura (a) L-25/LCB-2.5 e (b) L-3.2/LCB-2.5, ambas a  $T = 180^\circ C$ , para diferentes concentrações de LCB-2.5. Figura adaptada de MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015).

Pode-se perceber na Figura 2.13a que, a baixas taxas de cisalhamento, uma mistura com maior quantidade de LCB-2.5 apresenta maior viscosidade, enquanto a altas taxas de cisalhamento, a quantidade de LCB-2.5 não afeta a viscosidade

de forma significativa. Por outro lado, na Figura 2.13b percebe-se que, a baixas taxas de cisalhamento, a quantidade de LCB-2.5 não afeta a viscosidade de forma significativa, mas que, a altas taxas de cisalhamento, uma mistura preparada com maior quantidade de LCB-2.5 apresenta menor viscosidade. O resultado da Figura 2.13 é importante porque, como a extrusão ocorre a altas taxas de cisalhamento, é possível obter menores viscosidades por meio da adição de um *grade* de polipropileno de cadeia longa e, assim, retardar o desgaste sofrido pela extrusora. Como o estudo de MAROUFKHANI e GOLSHAN (2015) não envolveu extrusão, sugere-se que trabalhos futuros conduzam experimentos similares em uma extrusora, para verificar se o comportamento se mantém o mesmo nesse tipo de equipamento, permitindo a otimização do processo de extrusão do PP.

DRABEK *et al.* (2018) exploraram o efeito da massa molar dos *grades* de polipropileno mostrados na Tabela 2.2 sobre o segundo *plateau* Newtoniano de curvas de viscosidade, representado pelo termo  $\eta_\infty$ , presente em alguns modelos reológicos, como os de Carreau, Carreau modificado, Carreau-Yasuda, Cross, Quemada generalizado e Quemada modificado. O resultado principal desse artigo é apresentado na Figura 2.14, em que pode ser observada a existência de uma forma funcional do tipo lei de potência entre  $\eta_0$  e  $\eta_\infty$  com  $M_w$ . Dessa forma, é possível entender com mais detalhe o comportamento de polímeros fundidos com diferentes propriedades e propor novos modelos reológicos.

Tabela 2.2: Características dos *grades* de PP usados nos ensaios de reologia. Adaptado de DRABEK *et al.* (2018).

Nome Comercial	IF (g/10 min a 2,16 kg e 230°C)	$M_w$ (g/mol)
HL504FB	450	75850
HL508FB	800	63750
HL512FB	1200	56250

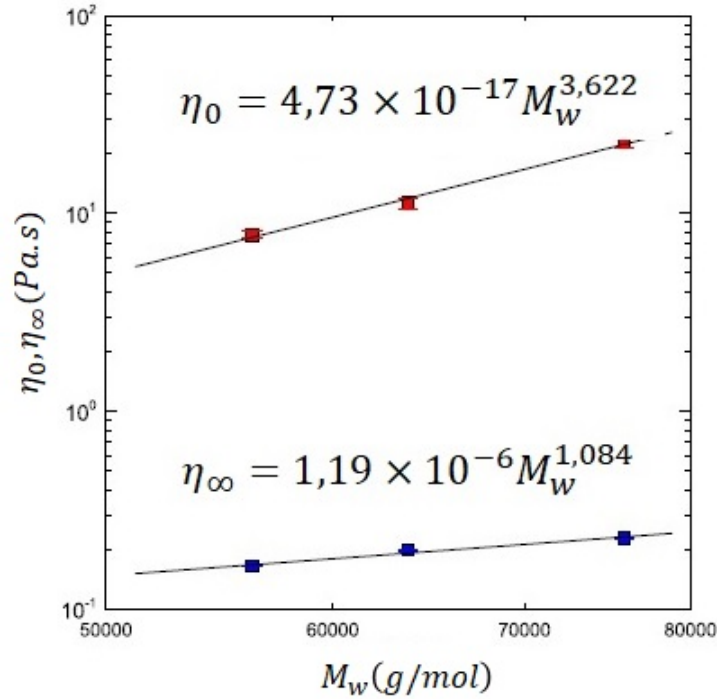


Figura 2.14: Forma funcional das viscosidades  $\eta_0$  e  $\eta_\infty$  com a massa molar média. Figura adaptada de DRABEK *et al.* (2018).

O trabalho de DRABEK *et al.* (2018) constitui um bom exemplo sobre como os artigos abordam os estudos referentes aos modelos reológicos, já que não foram encontrados trabalhos que envolvem o desenvolvimento de modelos reológicos especificamente para o escoamento do PP.

É importante observar que os modelos relatados na literatura para descrever o comportamento reológico do PP apresentam dependência de, no máximo, duas das seguintes variáveis: taxa de cisalhamento,  $\dot{\gamma}$ ; temperatura,  $T$ ; pressão,  $p$ ; massa molar média,  $M_w$ ; e IF, cujas formas funcionais são mostradas na Tabela 2.3. Também não foram encontrados, dentre os trabalhos aqui reportados, modelos reológicos que dependam do grau de taticidade, apesar deste parâmetro ter grande relevância nos processos de fabricação de polipropileno. Dessa forma, um dos objetivos da presente dissertação é desenvolver um modelo reológico multivariável a partir de dados experimentais de viscosidade obtidos para diferentes *grades* comerciais de polipropileno.

Tabela 2.3: Formas funcionais dos modelos reológicos de PP disponíveis na literatura.

<b>Modelos Reológicos</b>	<b>Trabalhos</b>
$\eta = f(\dot{\gamma})$	Modelos Clássicos
$\eta = f(T, p)$	DRABEK <i>et al.</i> (2018)
$\eta = f(M_w)$	DRABEK <i>et al.</i> (2018)
$\eta = f(\dot{\gamma}, T)$	PARK e LYU (2018)
$\eta = f(IF)$	COSTA (2005)

### 2.3.2 Extrusão de Polipropileno

Buscaram-se trabalhos que envolvessem a extrusão de PP, de forma a compreender o estado da arte sobre o tema. A pesquisa resultou na identificação de duas linhas de estudo:

- Influência da extrusão nas características do polipropileno durante ou após o processamento, como nos trabalhos de LIU *et al.* (2015), RAMOS e HELSON (2007), CANEVAROLO e BABETTO (2002), CANEVAROLO (2000) e MACAULEY *et al.* (1998);
- Análise de diferentes extrusoras ou elementos de parafuso sobre a operação de extrusão do PP, como nos trabalhos de ANDERSEN (2017) e CHANG e WHITE (2003).

Ressalta-se a relevância dos grupos de estudo do Brasil em temas relacionados a essas linhas de pesquisas, cujos trabalhos abordam o comportamento do polipropileno quando submetido a múltiplas extrusões. Mais especificamente, CANEVAROLO (2000) estudou a evolução das curvas de distribuição de massa molar durante a degradação do polímero, CANEVAROLO e BABETTO (2002) estudaram os efeitos do tipo de parafuso nesse processo e RAMOS e HELSON (2007) caracterizaram as propriedades térmicas e mecânicas do polipropileno depois de seguidos processos de extrusão.

MACAULEY *et al.* (1998) analisaram em particular como alguns parâmetros de processo, como temperatura dos rolos, velocidade da esteira, espessamento do molde e espessura do filme, podem influenciar a qualidade do produto final. A Figura 2.15 mostra o sistema estudado por esses autores.

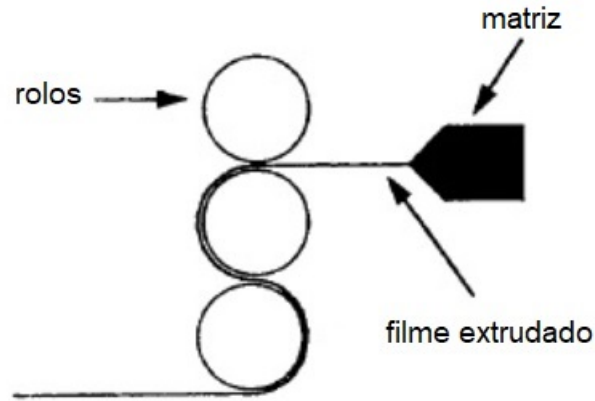


Figura 2.15: Sistema estudado por MACAULEY *et al.* (1998) (adaptado).

CHANG e WHITE (2003) fizeram comparações de desempenho usando alguns tipos de extrusoras. As massas molares das resinas de PP produzidas neste trabalho são mostradas na Tabela 2.4. As letras indicadas que antecedem os tipos de extrusoras são usadas no artigo, sendo por isso também utilizadas nessa tabela.

Tabela 2.4: Massas molares ponderais médias das resinas de PP produzidas no trabalho de CHANG e WHITE (2003).

Tipo de Extrusora	Massa Molar PP (g/mol)
PP inicial	$M_w = 5,98 \times 10^5$
(A) <i>Intermeshing co-rotating TSE</i>	$M_w = 3,41 \times 10^5$
(B) <i>Intermeshing counter-rotating TSE</i> (configuração de parafuso 2)	$M_w = 3,55 \times 10^5$
(C) <i>Intermeshing counter-rotating TSE</i> (configuração de parafuso 1)	$M_w = 4,06 \times 10^5$
(D) <i>Tangencial counter-rotating TSE</i>	$M_w = 2,90 \times 10^5$
(E) Kobelco Nex-T	$M_w = 2,62 \times 10^5$

A partir da massa molar inicial do PP e das massas molares das resinas finais, os autores concluíram que as extrusoras do tipo Kobelco Nex-T (E) e *Intermeshing counter-rotating* (C) foram responsáveis pela maior e menor degradação de polipropileno nas condições do experimento, respectivamente. Além disso, a comparação entre as extrusoras dos tipos *Tangencial counter-rotating* (D) e *Intermeshing* (A, B e C) mostrou que a degradação de PP foi maior na primeira. Compararam-se também as extrusoras dos tipos *co-rotating* (A) e *counter-rotating* (B e C) e o resultado obtido foi que o primeiro tipo resultou em maior degradação de PP que o segundo.

Os autores também analisaram os tempos de residência nas extrusoras para a



mesma taxa de alimentação e mesma velocidade de rotação dos parafusos, cujo resultado é mostrado na Figura 2.16.

Como esperado, devido ao resultado anterior, a extrusora do tipo Kobelco Nex-T (E) apresentou o tempo de residência médio mais longo e a distribuição de tempos de residência mais larga, enquanto a extrusora do tipo *Intermeshing counter-rotating* (C) apresentou o tempo de residência médio mais curto e a distribuição de tempos de residência mais estreita. Analogamente, a extrusora do tipo *Tangencial counter-rotating* (D) apresentou tempos de residência médio maiores que as extrusoras dos tipos *Intermeshing* (A, B e C), assim como a extrusora do tipo *co-rotating* (A) apresentou tempos de residência médio maiores que as extrusoras do tipo *counter-rotating* (B e C). Nota-se que a degradação discutida nesse artigo está relacionada ao tempo de residência do polímero ao longo da extrusora e não às temperaturas envolvidas no processo de extrusão.

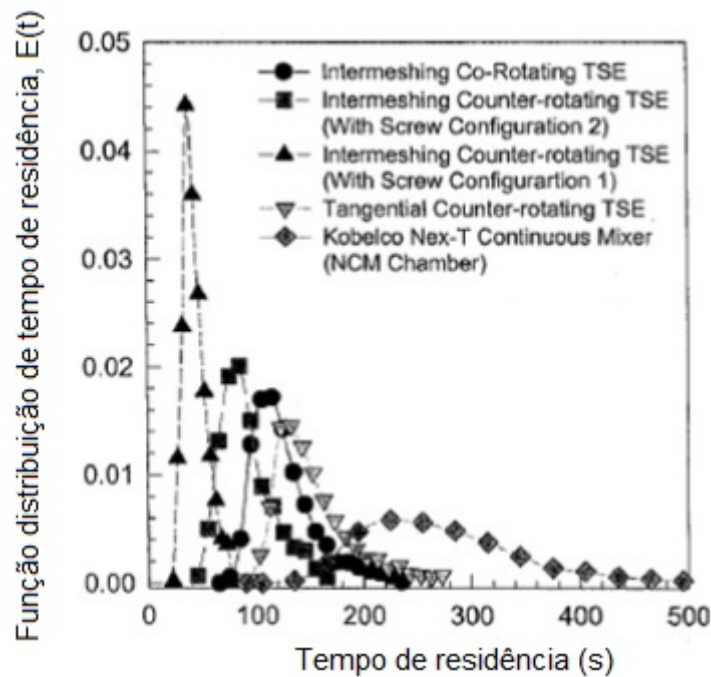


Figura 2.16: Tempo de residência nas extrusoras analisadas para a mesma taxa de alimentação e mesma velocidade de rotação dos parafusos. Figura adaptada do trabalho de CHANG e WHITE (2003).

### 2.3.3 Desgaste de Extrusoras

Foi conduzida uma pesquisa na literatura aberta sobre desgaste de extrusoras e poucos artigos foram encontrados. Os assuntos abordados nesses trabalhos são difusos e discorrem, principalmente, sobre a caracterização do desgaste com auxílio de análises químicas e mecânicas do material usado para a confecção da extrusora

(FOX *et al.* (2005), PARDO e ARISTIZÁBAL (2017) e DURCZAK (2017)). Não foram encontrados trabalhos que procurassem analisar o motivo ou propor uma solução para o problema do desgaste causado pelo processo de extrusão.

Além dos artigos mencionados, foi encontrado um trabalho relevante, escrito por QAMAR *et al.* (2007), cujo objetivo é prever o tempo de vida útil de uma extrusora considerando os problemas estruturais mais comuns neste equipamento durante um processo de extrusão, que são a fratura e o desgaste. Apesar do foco desse trabalho ser o molde e não o parafuso, ele pode servir como fonte de consulta inicial para trabalhos que envolvam a predição da vida útil de um parafuso de extrusora, também considerando o desgaste natural de operações de extrusão.

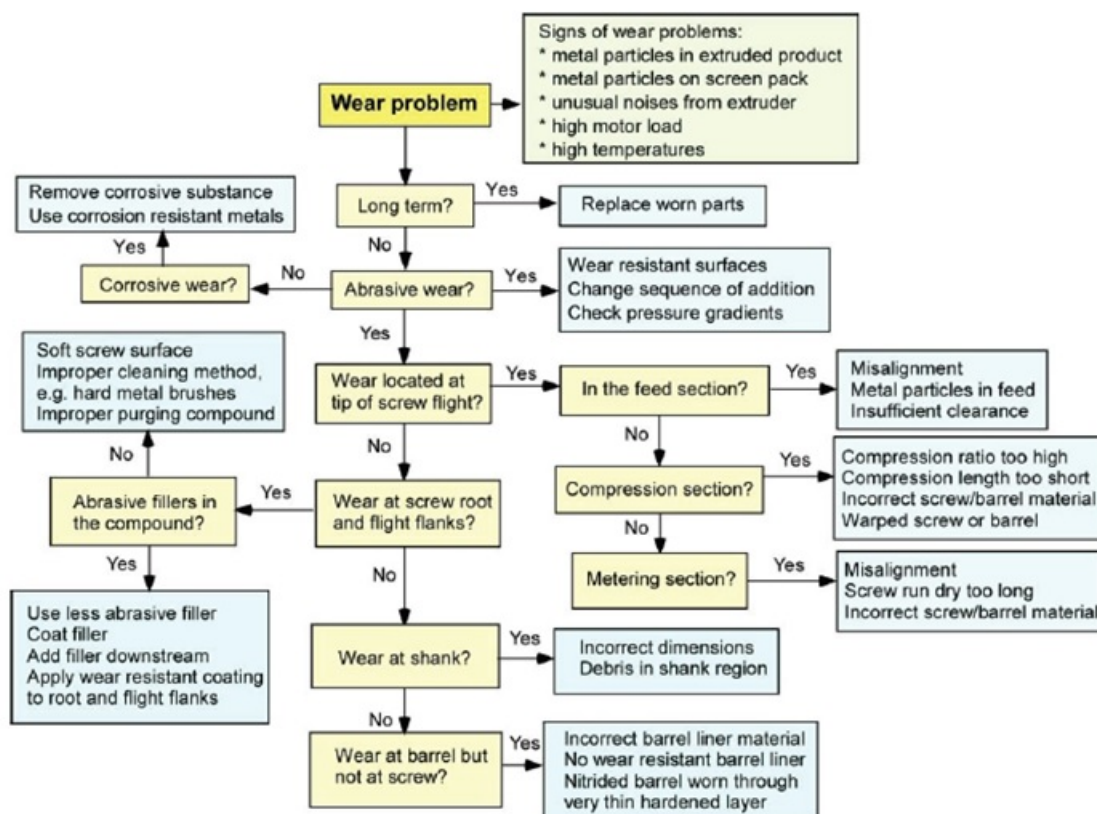


Figura 2.17: Fluxograma proposto para resolução de problemas de desgaste em extrusoras. Figura extraída de RAUWENDAAL (2016).

Os estudos encontrados na literatura científica que mais se aproximam da solução de problemas de desgaste em extrusoras são os trabalhos de RAUWENDAAL (2016) e de KHAN *et al.* (2014). Esses trabalhos não discorrem sobre experimentos envolvendo desgaste, mas reportam análises de possíveis causas de problemas em extrusoras e sobre como resolvê-los com auxílio de um fluxograma simplificado de *troubleshooting* (RAUWENDAAL (2016)), mostrado na Figura 2.17, e de uma *check list* (KHAN *et al.* (2014)).

Outros exemplos de materiais que podem ser consultados sobre soluções de problemas associados ao desgaste de extrusoras são livros-texto específicos sobre extrusão, como o escrito por RAUWENDAAL (2014), e livros-texto focados na resolução dos diferentes problemas que podem ocorrer com extrusoras industriais, como o escrito por CAMPBELL e SPALDING (2013).

### 2.3.4 Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados

Uma operação de extrusão pode ser resumida da seguinte forma: o polímero, geralmente na forma de pó ou *pellet*, é alimentado no funil e segue para o espaço anular entre o barril e o parafuso, ficando em contato com ambos, sendo que o primeiro é estacionário e o segundo possui movimento de rotação. Como resultado, são geradas forças de atrito que são responsáveis pelo transporte do polímero ao longo do equipamento e pela fusão do material, junto com o calor fornecido pelos aquecedores. Quando a temperatura de fusão é alcançada, forma-se um filme de material fundido próximo à superfície do barril. O polímero no estado líquido é transportado para a matriz, localizada depois do parafuso, e que é responsável pela forma do produto final. Essa é uma operação aparentemente simples, mas que apresenta grande complexidade devido às diferentes regiões da extrusora e às diversas possibilidades de construção do parafuso.

As regiões de uma extrusora responsável pelos diferentes objetivos em um processo de extrusão são usualmente classificadas por zonas, tais como descrito abaixo:

1. Zona de alimentação ou de transporte de sólido, onde o material se encontra no estado sólido e próximo ao funil de alimentação;
2. Zona de compressão ou de fusão, onde o material começa a ser fundido, existindo simultaneamente os estados sólido e líquido;
3. Zona de bombeamento, onde o material, já completamente fundido, é bombeado para a matriz depois do parafuso.

A Figura 2.18 mostra algumas roscas, descritas por MANRICH (2005), que podem ser tipicamente utilizadas para o processamento de polímeros:

- a) Rosca com filete duplo na zona de alimentação: desenhada com o objetivo de diminuir a flutuação na alimentação causada por interrupções na dosagem;
- b) Rosca de passo variável: permite otimizar o ângulo de hélice em cada zona individualmente;

- c) Rosca de passo variável para borrachas: o passo é reduzido conforme se afasta da zona de alimentação, comprimindo o material processado e, ao mesmo tempo, mantendo a profundidade do canal constante;
- d) Rosca cônica: usada quando o diâmetro do barril é cônico. Serve para comprimir o material por meio de uma complexa combinação de variáveis geométricas de forma balanceada;
- e) Rosca com zona de descompressão: colocadas em regiões de degasagem ou em zonas com alimentação lateral.

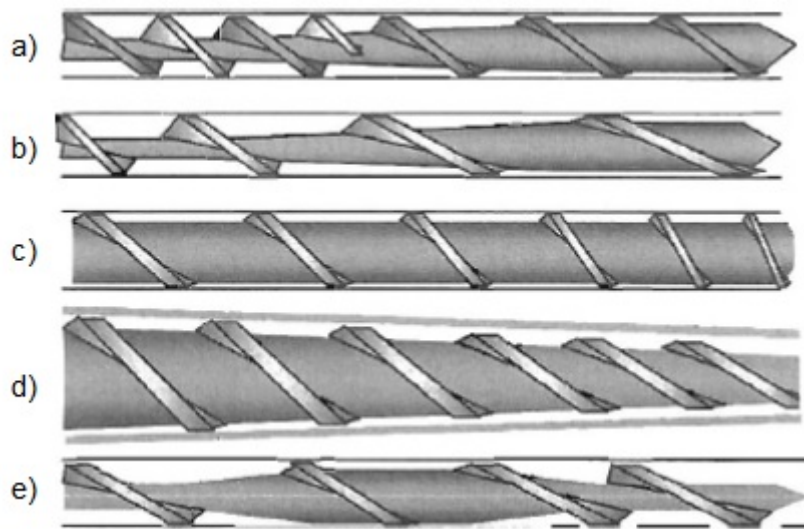


Figura 2.18: Exemplos de rosca utilizadas para o processamento de polímeros. Figura extraída de MANRICH (2005).

Segundo LAFLEUR e VERGNES (2014), as principais medidas de uma extrusora convencional, com base no diâmetro nominal do parafuso,  $D$ , são apresentadas na Tabela 2.5. Nota-se que essas medidas não constituem regras rígidas, visto que muitas das extrusoras reportadas na literatura, e mesmo as extrusoras industriais encontradas em *sites* de compra e venda de equipamentos para a indústria de polímero, não seguem essa recomendação.

Tabela 2.5: Medidas principais de uma extrusora convencional com base no diâmetro nominal do parafuso.

Dimensão	Medidas
Comprimento total	20-30D
Comprimento da zona de alimentação	4-8D
Comprimento da zona de bombeamento	6-10D
Passo do parafuso	1D
Espessura da rosca	0,1D
Profundida de zona de alimentação	0,1-0,15D
Espaçamento entre a rosca e o barril	0,0025D
Razão de compressão	2-4

A modelagem matemática apresentada nesta dissertação tem como base os fenômenos intrínsecos à natureza do sistema como, por exemplo, os princípios de conservação de massa e energia que ocorrem durante o processo de extrusão. A representação de uma extrusora pode ser feita como mostrado na Figura 2.19.

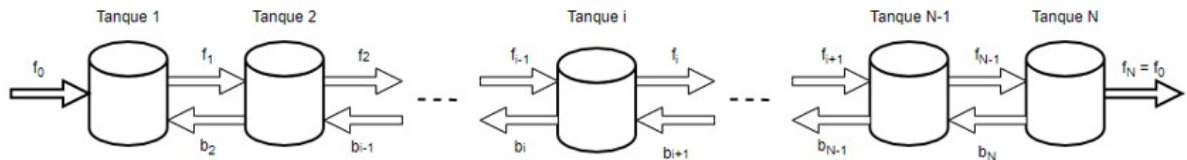


Figura 2.19: Representação de uma extrusora como uma série de tanques de mistura.

A representação de um escoamento como uma série de tanques de mistura pode ser vista como uma técnica de discretização numérica do sistema e tem sido frequentemente utilizada para realizar os cálculos numéricos necessários e obter as variáveis de interesse como solução. De acordo com essa representação, a extrusora é descrita como uma série de  $N$  tanques de mistura (do termo em inglês, *Continuous Stirred Tank Reactor*, CSTR), sendo que em cada tanque  $i$  está associada uma vazão mássica  $f_i$  no sentido do escoamento e, como em algumas regiões da extrusora também existe contrafluxo (*backflow*), uma vazão mássica  $b_i$  no sentido contrário ao escoamento, que pode ser escrita em termos da razão de *backflow*,  $\alpha_i$ :

$$b_i = \alpha_i f_i \quad (2.3.1)$$

Nota-se que a discretização da extrusora apresenta algumas imposições físicas, tais como  $b_1 = 0$ ,  $\alpha_1 = 0$  e, por consequência,  $f_N = f_0$ , já que a massa se conserva ao longo da extrusora, e  $b_N = \alpha_N f_0$  devido à igualdade anterior. Modelos similares a esse foram utilizados por alguns autores para representar um processo de extrusão, como KUMAR *et al.* (2008), AVRAY e ISAMBERT (2010), VAUCHEL *et al.* (2010), EITZLMAYR *et al.* (2014) e DEWASME *et al.* (2016).

A pesquisa de artigos disponíveis nessa área de estudo foi conduzida com o objetivo de representar um modelo simplificado que permitisse a obtenção do perfil de temperaturas da massa do PP ao longo de uma extrusora industrial e a análise de sensibilidade de alguns parâmetros importantes em um processo de extrusão. Os trabalhos identificados têm em comum o fato de utilizarem pequenas seções de extrusoras de laboratório para conduzir as análises. Observou-se que os estudos encontrados podem ser divididos em dois grupos:

- Estudo do escoamento de polímero fundido ao longo de extrusoras, como nos trabalhos de KETTEMANN *et al.* (2019), TRIPPE e SCHÖPPNER (2019), ROLAND *et al.* (2019), ROLAND (2018), MIKULIONOK (2018), MARSCHIK *et al.* (2018), PACHNER *et al.* (2017), DEWASME *et al.* (2016), EBEID e FIKRY (2015), ALFARO *et al.* (2015), EITZLMAYR *et al.* (2014), AVRAY e ISAMBERT (2010) e WILCZYNSKI e WHITE (2003);
- Análise do tempo de residência e qualidade da mistura em extrusoras, como nos trabalhos de KENNEDY *et al.* (2014), REITZ *et al.* (2013), VAUCHEL *et al.* (2010), KUMAR *et al.* (2008) e SURESH *et al.* (2008).

A maior parte dos artigos sobre Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados se concentra no estudo de alguns aspectos do escoamento de polímero fundido nas extrusoras. Isso pode ser explicado porque os fenômenos envolvidos na seção da extrusora que apresenta o polímero nesse estado físico são mais simples que em outras seções, como a de transporte de sólidos, onde ocorre escoamento de material parcialmente sólido e líquido devido à fusão de parte dos sólidos alimentados no equipamento, de forma que a modelagem matemática de fluidos completamente fundidos não é tão complexa quanto a de sistemas bifásicos. Além disso, o efeito da dissipação viscosa é muito importante durante o processo de extrusão de um polímero porque o modelo reológico está presente no termo de dissipação e, portanto, a reologia exerce forte influência sobre a variação da temperatura do polímero ao longo da extrusora. Assim, alguns trabalhos também têm como foco o desenvolvimento de um modelo matemático para o termo de dissipação viscosa.

Um dos trabalhos mais completos encontrados sobre o tema é o reportado por

EITZLMAYR *et al.* (2014). Nesse trabalho, os autores apresentaram um modelo unidimensional da zona de bombeamento de uma extrusora de dupla rosca que considera, principalmente, as seguintes variáveis: razão de preenchimento, pressão, temperatura do polímero fundido, potência e torque do motor e tempo de residência. Esse modelo foi desenvolvido a partir dos balanços de massa e energia em cada elemento de discretização da extrusora, como mostrado na Figura 2.20.

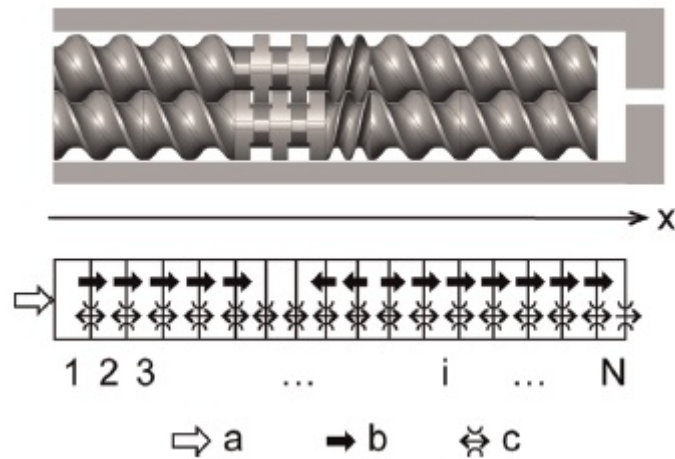


Figura 2.20: Discretização da extrusora reportada por EITZLMAYR *et al.* (2014), sendo que **a** é a vazão de alimentação, **b** é a vazão causada pelo movimento do parafuso e **c** é a vazão causada pela pressão.

A modelagem matemática desenvolvida nesta dissertação é similar ao que foi feito por EITZLMAYR *et al.* (2014), mas apresenta algumas diferenças. No presente trabalho, além do desenvolvimento de um modelo reológico multivariável a partir de dados experimentais para ser implementado no modelo matemático, considerou-se perfis de temperaturas no barril e no polímero fundido. Por outro lado, o autor utilizou, na modelagem matemática, o modelo clássico de Carreau e considerou, além dos perfis de temperaturas no barril e no polímero fundido, o perfil também no parafuso, como mostrado na Figura 2.21.

O resultado mais relevante do trabalho de EITZLMAYR *et al.* (2014) é a possibilidade de obtenção do perfil de temperatura do polímero fundido ao longo do parafuso, já que sua medida experimental é de difícil obtenção. Entretanto, o modelo consegue prever a temperatura em apenas uma direção, de forma que a realidade de um processo tridimensional requer modelos mais complexos. Nota-se que este texto também apresenta um perfil de temperatura unidimensional do polímero fundido.



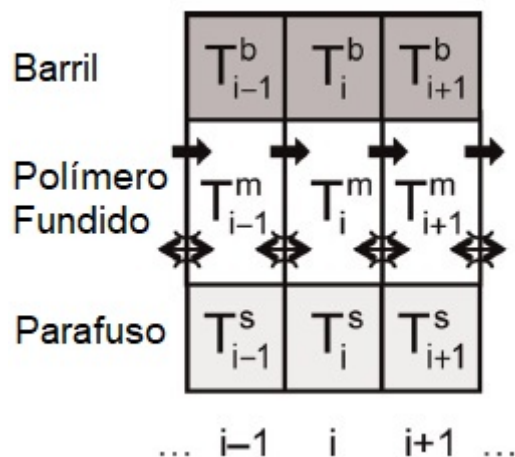


Figura 2.21: Temperatura do barril, do polímero fundido e do parafuso em cada elemento numérico. Figura adaptada de EITZLMAYR *et al.* (2014).

TRIPPE e SCHÖPPNER (2019) desenvolveram um modelo matemático para o termo de dissipação, com base em um balanço de energia simplificado, que pode ser aplicado desde a seção da extrusora voltada para o transporte de sólidos da alimentação até a região onde ocorre a fusão do material. Entretanto, o trabalho abordou o termo dissipativo com expressões muito simples, de forma que os resultados obtidos provavelmente não podem ser estendidos ou extrapolados para operações industriais reais.

ROLAND (2018) e ROLAND *et al.* (2019) desenvolveram relações analíticas para a dissipação viscosa com auxílio de relações rigorosas, a partir do produto interno duplo entre a tensão de cisalhamento e o gradiente de velocidade. A adimensionação das equações, com consequente criação de grupos adimensionais, junto com o uso de métodos heurísticos, permitiram o desenvolvimento de uma expressão para o termo de dissipação. Os autores obtiveram relações entre as variáveis envolvidas que consideram tanto os efeitos de fluidos não-Newtonianos, quanto o escoamento no canal de parafusos genéricos ou que apresentaram uma geometria específica. Apesar do modelo desenvolvido ser capaz de prever a dissipação viscosa, existe a limitação do escoamento ser bidimensional, o que não condiz com a operação de um processo de extrusão industrial. É importante enfatizar que essas expressões não foram combinadas com balanços de massa e energia para representar o comportamento de sistemas reais de extrusão.

Existem muitos estudos publicados que analisam os efeitos das distribuições de tempo de residência e das condições de mistura em extrusoras com auxílio de modelos fenomenológicos. Contudo, como o tema foge do escopo proposto na presente dissertação, não foram feitas análises detalhadas sobre a natureza desses trabalhos.



### 2.3.5 Simulação Computacional via CFD

Sistemas simples de escoamento podem ser resolvidos analiticamente com auxílio das equações de balanço de massa global, conservação de massa das espécies químicas, momento e energia, juntamente com o estabelecimento de equações constitutivas, como, por exemplo, os modelos reológicos, além das hipóteses simplificadoras necessárias. Entretanto, no caso de sistemas mais complexos ou quando se deseja estudar um determinado sistema da forma mais real possível, a resolução analítica das equações torna-se quase sempre impossível, sendo necessário o uso de métodos numéricos sofisticados e *softwares* específicos.

As técnicas de Fluidodinâmica Computacional, segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), constituem uma poderosa ferramenta para analisar um determinado sistema de interesse e que envolve escoamento de fluido, transferência de calor e fenômenos associados, como reações químicas, por meio de simulações computacionais. Essa ferramenta é muito poderosa, pois permite o estudo de diversos sistemas que encontram aplicações industriais e não-industriais relevantes, dentre muitas outras, como:

- Aerodinâmica de carros e aeronaves;
- Hidrodinâmica de navios;
- Processos de usinas elétricas;
- Turbomáquinas;
- Transferência de calor em circuitos elétricos e eletrônicos;
- Processos químicos e bioquímicos;
- Ventilação em prédios;
- Cargas em estruturas *offshore*;
- Distribuição de poluentes;
- Escoamento em rios e oceanos.

As simulações podem ser realizadas em geometrias tão simples como em um tubo cilíndrico ou uma placa plana e também em geometrias mais complexas, como no estudo aerodinâmico de carros e aviões. Em engenharia química, o interesse é mais voltado para a descrição de escoamentos em equipamentos industriais como bombas, compressores, ciclones, trocadores de calor, entre outros. Na área de polímeros,

simulações computacionais são de grande auxílio para o entendimento de vários processos, dentre os quais se encontra o processo de extrusão, que é objeto de estudo dessa dissertação.

A utilização de CFD nos estudos de engenharia é cada vez maior, principalmente por causa da evolução da tecnologia, que permite a realização de simulações mais rápidas e mais condizentes com os comportamentos dos problemas reais. Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), um motivo relevante para o uso cada vez mais frequente desse tipo de ferramenta é a substituição de procedimentos experimentais no estudo de sistemas fluidos, já que ferramentas de CFD podem ter algumas vantagens em relação aos procedimentos experimentais, como:

- Redução significativa do tempo e custo;
- Capacidade de estudar sistemas em que o controle dos experimentos é difícil ou impossível;
- Capacidade de estudar sistemas em condições perigosas ou acima dos limites de segurança;
- Resultados com nível de detalhe praticamente ilimitado.

Os códigos de CFD são formados essencialmente por três elementos principais:

1. Pré-processamento;
2. Solução das equações do problema;
3. Pós-processamento.

Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), o pré-processamento consiste na introdução do problema em estudo em um programa de CFD com auxílio de uma interface amigável ao usuário e com a subsequente transformação desse problema em uma forma capaz de ser resolvida pelo *solver*. Nessa etapa, o usuário é responsável por:

1. Definir a geometria da região de interesse (domínio computacional);
2. Gerar a malha, que é a subdivisão do domínio em um número menor de subdomínios não superpostos, chamados de células ou volumes de controle;
3. Selecionar os fenômenos físicos e químicos que devem ser modelados;

4. Definir as propriedades do fluido;
5. Especificar as condições de contorno apropriadas nas células que coincidem ou compartilham arestas com o contorno do domínio.

A solução das equações do problemas é alcançada com o auxílio do *solver* do programa de CFD, que é o conjunto de configurações do código capaz de resolver essas equações com o uso dos métodos numéricos adequados. Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), essa etapa inclui três passos principais:

1. Aproximação dos perfis das variáveis desconhecidas com auxílio de funções simples;
2. Substituição dos valores aproximados calculados das variáveis nas equações do problema;
3. Solução das equações.

Esse cálculo pode ser realizado com base em alguns métodos numéricos, sendo os três principais: Método das Diferenças Finitas (do termo em inglês, *Finite Difference Method*, FDM), Método dos Elementos Finitos (do termo em inglês, *Finite Element Method*, FEM) e Método dos Volumes Finitos (do termo em inglês, *Finite Volume Method*, FVM). Segundo LEWIS *et al.* (2004), o Método das Diferenças Finitas é bem estabelecido, conceitualmente simples e usado em muito casos. Contudo, em problemas com geometria irregular ou condições de contorno mais complexas, essa técnica torna-se pouco eficiente. O Método dos Volumes Finitos é uma versão refinada do FDM e tem se tornado popular na área de CFD nos últimos anos. Ainda de acordo com LEWIS *et al.* (2004), o Método dos Elementos Finitos foi inicialmente desenvolvido em 1960 e atualmente é muito utilizado em estudos de CFD por causa da flexibilidade e capacidade de resolver problemas de engenharia em diversas áreas. Os principais métodos numéricos utilizados para a resolução de problemas de CFD têm sido extensivamente estudados e documentados, por exemplo, nos livros de VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), FERZIGER e PERIC (2002) e LEWIS *et al.* (2004)). Como o objetivo dessa dissertação não é discutir esses métodos, a formulação matemática detalhada e apresentação desses métodos não serão aqui abordados.

O pós-processamento é a etapa em que se torna possível visualizar e analisar os resultados obtidos na etapa anterior utilizando ferramentas gráficas. Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), os pacotes gráficos permitem:

- Visualizar a geometria e a malha;
- Plotar vetores, linhas, contornos e superfícies 2D e 3D;
- Acompanhar as partículas de fluido;
- Manipular o domínio por meio de translação, rotação e redimensionamento dos eixos.

As três etapas principais de um estudo de CFD podem ser mais detalhada da seguinte forma:

1. Desenhar a geometria;
2. Construir a malha;
3. Selecionar o domínio, as propriedades físicas, as condições de contorno e outras configurações necessárias para a simulação;
4. Resolver as equações de transporte e constitutivas do sistema;
5. Visualizar e analisar os resultados obtidos.

A etapa de construção da geometria é importante em um processo de simulação computacional utilizando ferramentas de CFD. Isto se deve ao fato de que os resultados obtidos na simulação são tão mais condizentes com a realidade do processo quanto maior for a semelhança entre a estrutura física a ser simulada e a geometria desenhada em um dos pacotes computacionais adequados para este fim.

No caso de uma extrusora industrial, que é o tema dessa dissertação, uma simulação adequada e realista exige que a geometria utilizada em um programa de CFD seja bem representada ao longo de toda a sua complexa estrutura, especialmente em zonas onde o escoamento é mais complicado, como nos diferentes elementos do parafuso e na estreita zona denominada *flight clearance*, que é o espaçamento entre a rosca do parafuso e o barril.

O desenho da geometria pode ser feito com o auxílio de qualquer pacote CAD (em inglês, *Computer Aided Design*) existente, como *AutoCAD*, *Solidworks*, *Rhinoceros 3D* ou os pacotes próprios do ANSYS, como *Design Modeler*, *Gambit* e *SpaceClaim*. Nesse trabalho o pacote CAD utilizado foi o *SpaceClaim*.

Assim como no caso da geometria, a etapa de construção da malha numérica também é muito importante para uma simulação que tenha como objetivo representar de forma mais realista possível um determinado sistema. A região onde ocorrem

os fenômenos físicos e químicos precisa ser dividida em várias regiões menores, para que os cálculos matemáticos possam ser realizados. Esse procedimento é chamado de discretização do domínio, formando a malha numérica, e as regiões menores são chamadas de células, volumes de controle ou elementos da malha.

Os nós de uma malha numérica podem ser localizados no centro das células ou na interseção entre elas, a depender da definição e do método numérico utilizados. Os fenômenos em estudo são avaliados nesses nós e, portanto, a solução do problema (velocidade, pressão, temperatura, entre outras variáveis) também é obtida nesses pontos.

FERZIGER e PERIC (2002) descreveram alguns tipos de malhas existentes, cujas representações são mostradas nas Figuras 2.22, 2.23 e 2.24.

- Malha estruturada ou regular

Esse tipo de malha é formado por famílias de linhas, cujos membros de família distintas se cruzam apenas uma vez e membros de uma mesma família não se cruzam. Esse é o tipo mais simples de malha, por ser equivalente a um conjunto de eixos cartesianos. Conseqüentemente, qualquer ponto dessa malha pode ser identificado por índices cartesianos  $i$ ,  $j$  e  $k$ .

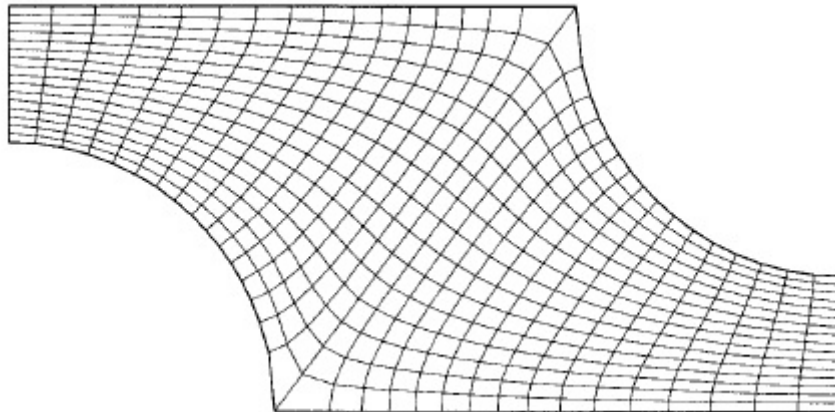


Figura 2.22: Exemplo de malha 2D estruturada não-ortogonal.

- Malha estruturada em bloco

Nesse tipo de malha existem dois ou mais grupos de malhas estruturadas diferentes, acopladas para formar a região geométrica estudada.

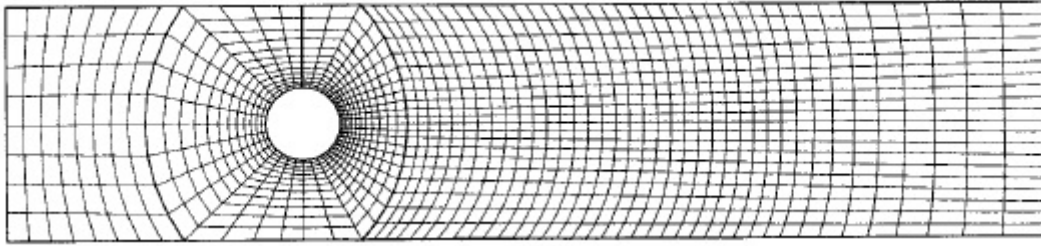


Figura 2.23: Exemplo de malha 2D estruturada em bloco.

- Malha não-estruturada

Esse tipo de malha é formado por células sem uma organização específica e, por isso, é usada geralmente em geometrias complexas. Esse tipo de malha é mais bem adaptada para os métodos de volumes finitos e elementos finitos. Uma malha é classificada como híbrida se possuir elementos estruturados e não-estruturados.

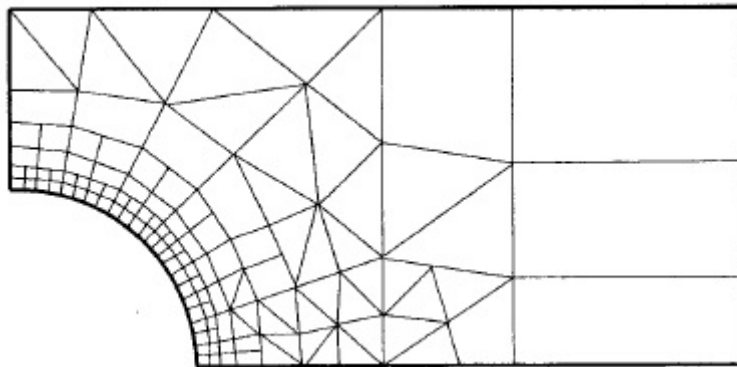


Figura 2.24: Exemplo de malha 2D não-estruturada.

As malhas numéricas descritas podem ser formadas por elementos regulares menores, como mostrados nas Figuras 2.25 (malhas 2D) e 2.26 (malha 3D):

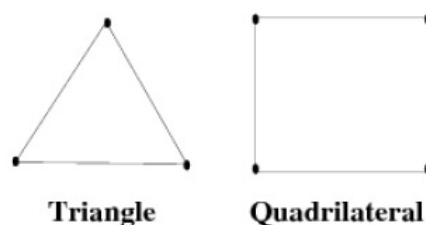


Figura 2.25: Elementos regulares constituintes de malha 2D: triângulo e quadrilátero. Figura extraída de ANSYS (2017a).

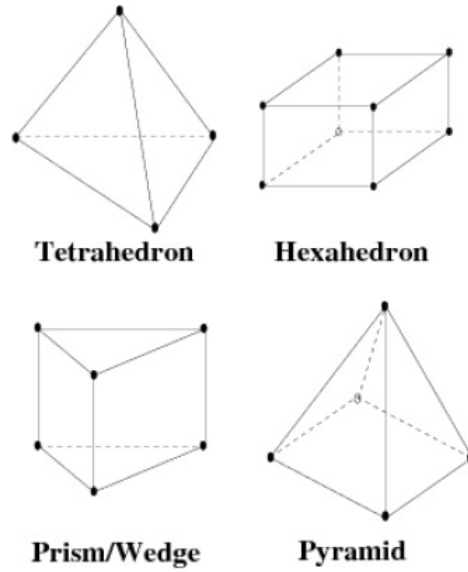


Figura 2.26: Elementos regulares constituintes de malha 3D: tetraedro, hexaedro, prisma e pirâmide. Figura extraída de ANSYS (2017a).

Como a etapa de resolução das equações envolvidas depende fortemente da etapa da construção da malha numérica, uma malha bem construída resulta usualmente em um resultado mais preciso e mais condizente com a realidade. Dessa forma, regiões onde o escoamento é mais complexo, como nas vizinhanças de superfícies, exigem uma malha mais refinada, com elementos menores e maior quantidade de nós, permitindo a realização de mais cálculos pelo programa e, conseqüentemente, gerando um resultado mais realista. Existem, portanto, parâmetros que caracterizam a qualidade de uma malha, sendo os principais (ANSYS, 2019):

- *Element Quality* (Qualidade do Elemento): é baseado na razão entre o volume do elemento e a soma do quadrado do comprimento de suas arestas para malha 2D e na razão entre o volume do elemento e a raiz quadrada do cubo da soma do quadrado do comprimento de suas arestas. Esse parâmetro está na faixa 0-1, em que 0 indica um elemento com volume mínimo ou nulo e 1 indica um quadrado ou cubo perfeito;
- *Aspect Ratio* (Razão de Aspecto): é baseado na razão entre medidas dos elementos. Esse parâmetro está na faixa 1- $\infty$ , em que 1 indica um elemento simétrico; quanto maior seu valor, maior é o desvio da condição de simetria;
- *Skewness* (Assimetria): segundo ANSYS (2017b), esse é um dos parâmetros de qualidade de malha mais importantes. Esse parâmetro determina o quanto uma face ou elemento está perto da idealidade. A Tabela 2.6 mostra as faixas

dos valores e a Figura 2.27 mostra um exemplo de triângulo e quadrilátero simétricos e assimétricos;

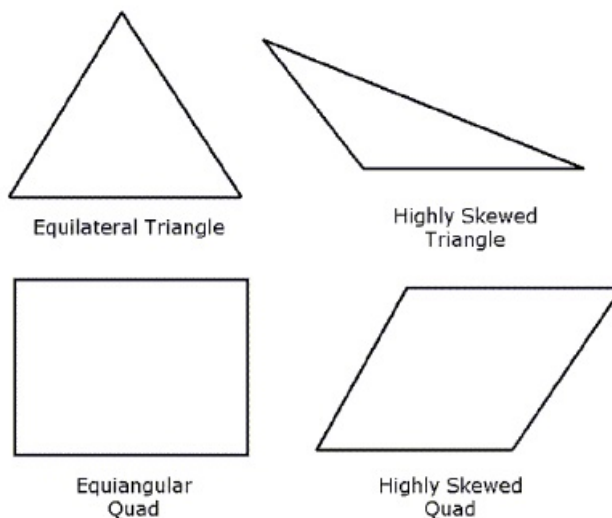


Figura 2.27: Exemplos de triângulo e quadrilátero simétrico e assimétrico.

Tabela 2.6: Faixas de valores do parâmetro *skewness* (ANSYS, 2017b).

Valor	Nível de Simetria
0	Simétrico
entre 0 e 0,25	Excelente
entre 0,25 e 0,5	Bom
entre 0,5 e 0,75	Aceitável
entre 0,75 e 0,9	Pobre
entre 0,9 e 1	Ruim
1	Inaceitável

- *Orthogonal Quality* (Qualidade Ortogonal): esse parâmetro refere-se ao grau de ortogonalidade dos elementos e está na faixa 0-1, e que 0 indica o pior elemento (total colinearidade) e 1 indica o melhor elemento (total ortogonalidade).

A malha numérica de uma determinada geometria pode ser construída utilizando qualquer programa próprio para isso, como o *Pointwise* ou o pacote próprio do ANSYS, que é o *Meshing*.

A seleção dos domínios onde ocorrem os fenômenos e a variação das grandezas envolvidas no processo, das propriedades físicas dos fluidos e sólidos presentes, das



condições inicial e de contorno, entre outras especificações necessárias para uma simulação de CFD, são feitas nos pacotes específicos de cada *software*. No caso do *Polyflow*, usado neste trabalho, esse pacote é o *Polydata*.

Após a definição das características de interesse, a simulação pode ser feita usando o *solver*, que também é específico para cada *software*, e que tem como objetivo resolver as equações de balanço e constitutivas existentes no problema em estudo com auxílio dos métodos numéricos mais adequados. Essas equações são as seguintes:

**Conservação de massa:**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.3.2)$$

**Conservação de momento linear:**

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \vec{g} \quad (2.3.3)$$

**Conservação de energia:**

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = -\nabla \cdot \vec{q} - \left( \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right)_p \frac{Dp}{Dt} - \tau : \nabla \vec{v} \quad (2.3.4)$$

**Equação constitutiva:**

$$\eta = \eta(\dot{\gamma}) \quad (2.3.5)$$

O resultado pode ser visualizado em qualquer pacote de pós-processamento, como o *CFD-Post*, próprio do ANSYS. Esse pacote permite a visualização dos campos de escoamento das grandezas calculadas com o apoio de várias ferramentas como contornos, vetores, planos e linhas, gráficos, animações, entre outras. Além disso, é possível exportar os valores para outros programas, como o *Microsoft Excel*, para trabalhar com os resultados da forma mais conveniente.

Existem muitos programas capazes de conduzir simulações numéricas de parâmetros distribuídos que consideram a variação das grandezas existentes no espaço tridimensional. Nos artigos pesquisados foi identificado o uso dos seguintes *softwares*: *LIGGGHTS*, *OpenFOAM*, *Polyflow*, *CFX*, *Fluent*, *Ludovic*, *XimeX*, *MoldFlow*, *Comet* e *COMSOL Multiphysics*. Entre esses, apenas *LIGGGHTS* e *OpenFOAM* são de código aberto, enquanto os demais são programas comerciais.

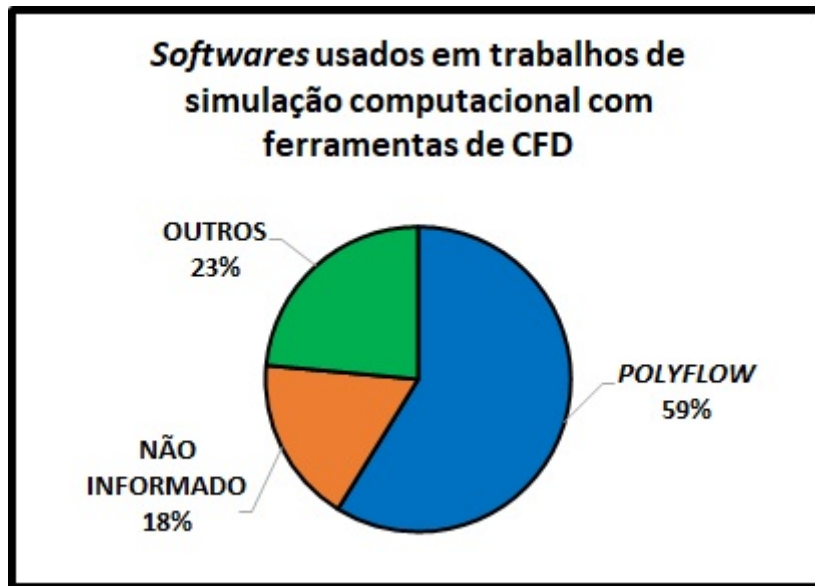


Figura 2.28: *Softwares* usados nos trabalhos de simulação computacional com ferramentas de CFD.

A Figura 2.28 apresenta os *softwares* de CFD usados em trabalhos sobre simulação computacional envolvendo o processo de extrusão de polipropileno. Nota-se que a maioria dos artigos encontrados na literatura sobre o tema utilizou o *Polyflow*, presente em 59% dos estudos. Nota-se que 18% dos estudos não informou o programa no qual o estudo foi desenvolvido e 23% usam os outros *softwares* mencionados.

O *Polyflow* é um *software* de simulação de Dinâmica dos Fluidos Computacional desenvolvido pela empresa ANSYS Inc. VANANDRUEL (1995) explicou o *Polyflow* da seguinte forma:

*Polyflow is a general Computational Fluid Dynamics finite element program which simulates the flow of Newtonian and non-Newtonian fluids, with a special emphasis on rheological complex liquids in industrial processes.*

*A major objective of Polyflow is Computer Aided Processing: using the computer as a laboratory, the engineer understands, modifies, creates, tests and improves processes in which flow of viscous liquids plays a dominant role. The code is used for modeling a variety of processes: extrusion, fiber spinning, laminar mixing, coating, sedimentation, heat transfer, chemical reactions, flow through channels, thermoconvection and many others.*

*Advanced computational methods have been implemented for calculating free surfaces and interfaces which are typical of many processes. Polyflow is also used as a toolbox for developing new applications.*

Segundo JUNHONG (2003), o *Polyflow* é um *software* de CFD especializado no processamento de polímeros. É, portanto, uma ferramenta útil na investigação e simulação de problemas envolvendo extrusão e moldagem por injeção. Ainda de acordo com esse autor, algumas aplicações industriais podem ser estudadas com auxílio de simulações conduzidas com esse programa para qualquer tipo de material viscoelástico, como extrusão e coextrusão, revestimentos de fios e cabos, predição do formato do molde a partir do produto final (*inverse die design*), moldagem por sopro e injeção, entre outras.

O domínio do *Polyflow* em relação aos demais programas usados em estudos de CFD pode ser explicado pelo fato desse *software* ser projetado especificamente para realização de simulações relacionadas ao escoamento de polímeros e aos processos mais comuns nessa área, como extrusão, termoformação e moldagem por injeção e sopro.

Segundo JUNHONG (2003), as principais características do *Polyflow* são as seguintes:

- *Solver* robusto para reologias não-Newtonianas complexas, incluindo escoamento viscoelástico, muito comum na área de processamento de polímeros;
- *Solver* diretamente acoplado, não-estruturado e que usa a técnica de Elementos Finitos;
- Técnicas avançadas para lidar com deformação de malhas, movimento complexo de partes sólidas (como a de parafusos) e detecção do contato entre superfícies livres e molde;
- Várias técnicas 2D e 3D de reorganização da malha (*remeshing*) que possibilitam a predição de superfícies livres no escoamento de fluidos;
- Vários tipos de modelos reológicos: 10 modelos não-Newtonianos e 9 modelos viscoelásticos, além de 8 modelos de viscosidade como função da temperatura. Os modelos clássicos e viscoelásticos são mostrados na Tabela 2.7;
- Contornos móveis com especificação da força normal, da velocidade normal ou da tensão interfacial, permitindo o compartilhamento da condição de contorno por duas superfícies diferentes.

Tabela 2.7: Modelos reológicos presentes no *Polyflow*.

Modelos Reológicos	
Modelos Clássicos	Modelos Viscoelásticos
<i>Power Law</i>	Upper-Convected Maxwell
Cross	Oldroyd-B
Cross Modificado	White-Metzner
Carreau-Yasuda	PTT Linear
Bird-Carreau	PTT Exponencial
Bingham	Giesekus
Bingham Modificado	FENE-P
Herschel-Bulkley	POM-POM
Herschel-Bulkley Modificado	Leonov
log-log	-

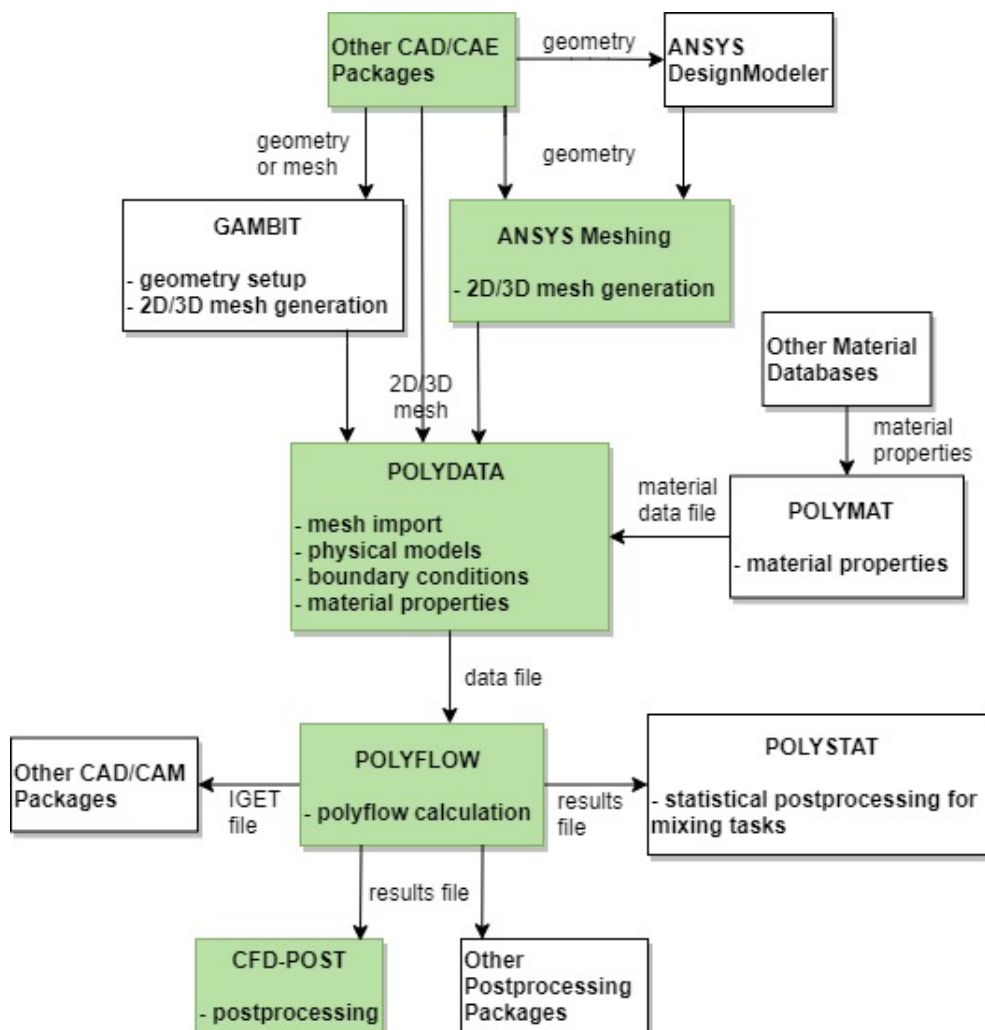


Figura 2.29: Estrutura do *Polyflow*. Fonte: Adaptado de ANSYS (2017a).

O *Polyflow* foi o programa de CFD escolhido para conduzir esse estudo principalmente porque, além das vantagens citadas por JUNHONG (2003), ele conta com diversos modelos reológicos e a maioria dos trabalhos sobre simulação numérica de processos de extrusão utiliza esse *software*, mostrando que ele é capaz de simular diversos casos de escoamento de polímero e que é bem aceito na literatura.

A Figura 2.29 mostra a estrutura de um programa de CFD, mais especificamente do *Polyflow*. Os pacotes que não estão hachurados em verde, como o *Polymat* e o *Polystat*, são pacotes do *Polyflow* utilizados para atingir objetivos específicos, como a definição de materiais e o estudo da mistura de partículas, respectivamente.

Nesta seção, além da fundamentação teórica sobre ferramentas de CFD, reportam-se os principais trabalhos na área de CFD relacionados ao escoamento de polímeros em extrusoras, e que podem ser divididos nos seguintes grupos genéricos:

- Análise de grandezas envolvidas no escoamento de polímeros em extrusoras, como nos trabalhos de LEWANDOWSKI e WILCZYŃSKI (2018), WILCZYŃSKI *et al.* (2018), TAGLIAVINI (2018) LEWANDOWSKI e WILCZYŃSKI (2017), XU *et al.* (2017), SINGH e MUTHUKUMARAPPAN (2016), KE *et al.* (2014) e WANG (2013);
- Desenvolvimento de métodos numéricos aplicados às simulações de CFD, como nos trabalhos de EUSTERHOLZ e ELGETI (2018), XU *et al.* (2018), WITTEK *et al.* (2018), HE *et al.* (2017), EITZLMAYR e KHINAST (2015a) e FARD e ANDERSON (2013);
- Análise do efeito das distribuições de tempo de residência e da qualidade da mistura em extrusoras, como nos trabalhos de MARSCHIK *et al.* (2019), ROBINSON e CLEARY (2019), NAKAYAMA *et al.* (2017), EITZLMAYR *et al.* (2017) XU *et al.* (2017), EITZLMAYR e KHINAST (2015b) e FEL *et al.* (2014);
- Outros estudos de simulação computacional com CFD envolvendo extrusão de polímero, como nos trabalhos de ZHANG *et al.* (2018), FADEYIBI *et al.* (2016), STEPHAN *et al.* (2016) e YILMAZ *et al.* (2014).

O objetivo do presente trabalho é o estudo do escoamento de polipropileno em extrusoras e pode ser incluído na primeira das quatro áreas em que os artigos encontrados foram divididos. Assim, o principal trabalho de referência dessa dissertação foi escrito por WANG (2013), cuja análise pode ser observada de forma mais aprofundada no capítulo de Resultados e Discussão.

Estudos teóricos sobre as técnicas de CFD ou o desenvolvimento de métodos numéricos não constituem o tema desta dissertação. No entanto, como trabalhos nessa área podem ser de grande importância, ressalta-se aqui que vários autores têm desenvolvido métodos numéricos mais robustos para a implementação de modelos e estudo de escoamentos de polímeros em sistemas de geometria complexa.

Deve-se observar que a construção da malha para a realização dos estudos de CFD neste trabalho foi feita utilizando a técnica de superposição de malha (do termo em inglês, *Mesh Superposition Technique*, MST), de forma que esse procedimento também é discutido com mais detalhe no capítulo de Metodologia do Estudo de CFD.

Um dos trabalhos encontrados na revisão bibliográfica sobre tempo de residência e qualidade de mistura em extrusoras foi reportado por XU *et al.* (2017). Esse tema é relevante porque evidencia a importância da homogeneização do material nesse tipo de equipamento para a obtenção de um produto de boa qualidade, evitando o surgimento de alguns problemas comuns na operação de extrusoras industriais. Entretanto, esta é uma área de estudo muito vasta e qualquer análise sobre esse assunto se encontra fora da abordagem principal da presente dissertação. É importante, porém, enfatizar que o tipo de extrusora estudada nos trabalhos de simulação computacional baseados em ferramentas de CFD são, em geral, pequenas seções de extrusoras de laboratório, como mostrado na Figura 2.30. Nota-se que os diâmetros são da ordem de 5 cm e o comprimento é da ordem de 20 cm. Em extrusoras industriais, os diâmetros podem superar 100 cm e o comprimento pode ultrapassar 4 m, como pode ser observado na Tabela 5.1.

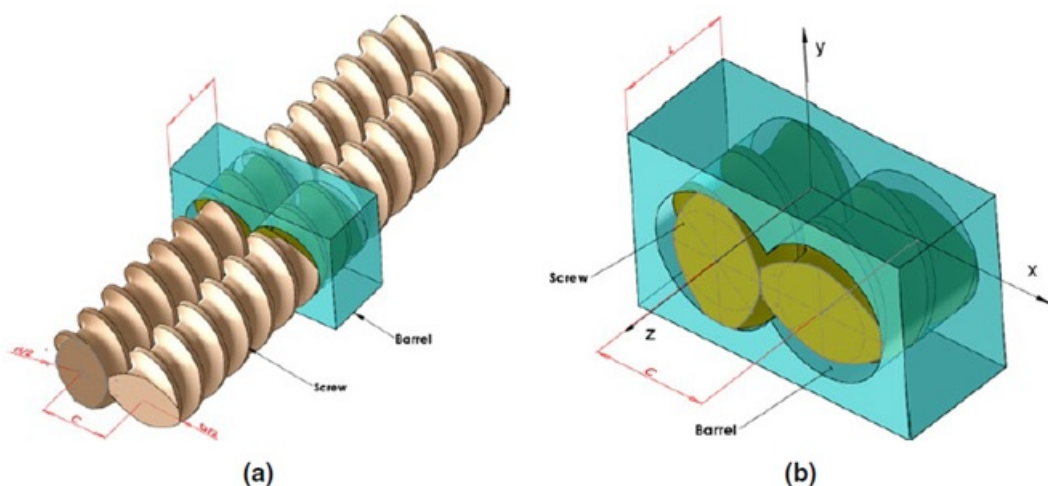


Figura 2.30: Representação esquemática da (a) zona de mistura e da (b) unidade simulada. Figura extraída de XU *et al.* (2017).

Um dos artigos que podem ser incluídos na última das quatro áreas de estudo

pesquisadas é o reportado por STEPHAN *et al.* (2016). Esse trabalho apresenta o maior parafuso de extrusora simulada dentre aqueles encontrados na literatura, com 1400 *mm* de comprimento, podendo ser considerado de laboratório ou, no máximo, de uma extrusora piloto, cuja complexidade é muito inferior à de um equipamento industrial. Entretanto, não foram fornecidos muitos detalhes acerca do estudo realizado.

Outro trabalho que se enquadra nessa área é o reportado por FADEYIBI *et al.* (2016). Os autores mostraram que, apesar de haver um interesse crescente nos últimos anos por pesquisas envolvendo nanocompósitos, não existem trabalhos sobre o desenho de parafusos de extrusoras para o processamento de meios particulados, como os compósitos formados por glicerol e amido de mandioca e inhame com nanopartículas. Dessa forma, o objetivo principal do trabalho foi desenvolver um parafuso simples de extrusora para mistura e homogeneização de sólidos. Esse trabalho teve como ponto interessante o fato de apresentar uma inovação em sua área de pesquisa e mostrou também o quanto a área de simulação computacional usando ferramentas de CFD pode ser vasta e diversificada.

### 2.3.6 Estimação de Parâmetros

Após a avaliação dos modelos a serem usados na modelagem reológica dos *grades* de polipropileno comercial, foi realizada a estimação dos parâmetros necessários para o ajuste dos dados experimentais reológicos disponíveis com o auxílio do pacote computacional ESTIMA, desenvolvido a partir do trabalho de SCHWAAB *et al.* (2008). Este programa utiliza a função de Mínimos Quadrados Ponderados como função-objetivo e um método numérico híbrido constituído pelo método heurístico do enxame de partículas (do termo em inglês *Particle Swarm Optimization*, PSO) acoplado sequencialmente com a técnica de Gauss-Newton.

A função de Mínimos Quadrados Ponderados é dada por

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NY} \frac{(y_{ij}^e - y_{ij}^m(x_i^m, \theta))^2}{\sigma_{ij}^2} \quad (2.3.6)$$

em que  $F_{obj}$  é a função-objetivo a ser minimizada,  $NE$  é o número de experimentos,  $NY$  é o número de variáveis de saída,  $y_{ij}^e$  são os valores experimentais das variáveis de saída,  $y_{ij}^m$  são os valores das variáveis de saída preditos pelo modelo matemático,  $x_i^m$  são as variáveis de entrada do modelo,  $\theta$  é o conjunto de parâmetros a ser estimado e  $\sigma_{ij}^2$  é a variância experimental.

Segundo SCHWAAB e PINTO (2007a), a função de Mínimos Quadrados Ponderados considera as seguintes hipóteses:

- A distribuição dos erros experimentais é conhecida e segue a distribuição normal;
- Os erros experimentais não estão correlacionados;
- As variáveis de entrada são bem controladas;
- O experimento é considerado bem feito, de modo que os dados experimentais estão sujeitos apenas a flutuações estocásticas e são tão pequenos quanto admissível.

A técnica de otimização PSO é classificada como heurística porque é baseada em regras evolutivas empíricas encontradas na natureza. No caso desse método, a inspiração vem do comportamento de um enxame de animais, como as abelhas. SCHWAAB *et al.* (2008) mostraram que o método PSO é eficiente tanto para a minimização, quanto para a construção da região de confiança dos parâmetros estimados.

Segundo o método, cada indivíduo do enxame é uma partícula que lembra a melhor solução encontrada por ela mesma e pelo enxame ao longo da trajetória de busca. As partículas se movem no espaço de busca e trocam informação com outras partículas de acordo com as seguintes equações:

$$v_{p,d}^{k+1} = wv_{p,d}^k + c_1r_1(x_{p,d}^{ind} - x_{p,d}^k) + c_2r_2(x_d^{glo} - x_{p,d}^k) \quad (2.3.7)$$

$$x_{p,d}^{k+1} = x_{p,d}^k + v_{p,d}^{k+1} \quad (2.3.8)$$

Nessas equações,  $p$  é a partícula,  $d$  é a direção de busca,  $k$  é o número de iterações,  $v$  é a velocidade da partícula,  $x$  é a posição da partícula,  $x^{ind}$  e  $x^{glo}$  são as melhores posições encontradas por uma partícula e por todo o enxame, respectivamente, sendo a melhor posição aquela onde a função-objetivo possui menor valor,  $r_1$  e  $r_2$  são dois números aleatórios na faixa  $[0, 1]$ ,  $w$ ,  $c_1$  e  $c_2$  são parâmetros de busca, em que  $w$  é chamado de peso do método e  $c_1$  e  $c_2$  são os parâmetros de cognição e social, respectivamente. Esses últimos três parâmetros são os parâmetros de sintonia do método numérico.

Ainda de acordo com SCHWAAB *et al.* (2008), o método PSO apresenta características interessantes ao longo das iterações. Nas iterações iniciais, a busca



apresenta forte aleatoriedade, de forma que as partículas conduzem uma busca global no espaço de busca. Conforme o número de iterações aumenta, as partículas se concentram nas regiões mais promissoras, encontradas na fase de exploração. A partir desse ponto, as partículas buscam o valor ótimo da solução. O algoritmo do método PSO é descrito pelos autores e pode ser reproduzido na forma:

1. Inicializar os parâmetros de busca:

$N_{iter}$ : número de iterações;

$N_{pt}$ : número de partículas;

$N_d$ : número de direções procuradas;

$x_{MIN}$  e  $x_{MAX}$ : vetores de tamanho  $N_d$  com limites de busca;

$c_1, c_2, w_0, w_f$ : parâmetros de busca;

Iniciar em  $k = 0$ ;

2. Calcular a velocidade máxima das partículas ao longo de cada direção  $d$ :

$$v^{MAX} = \frac{x_d^{MAX} - x_d^{MIN}}{2}$$

3. Calcular a velocidade e a posição inicial das partículas:

$$v_{p,d}^k = v_d^{MAX}(2r - 1)$$

$$x_{p,d}^k = x_d^{MIN} + r(x_d^{MAX} - x_d^{MIN})$$

4. Avaliar a função-objetivo para cada partícula;
5. Escrever a posição e a função-objetivo das partículas em um arquivo para construir a região de confiança;
6. Atualizar o vetor  $\mathbf{x}^{glo}$ , de dimensão  $N_d$ , e que contém as melhores posições encontradas por todo o enxame de partículas;
7. Quando o número máximo de iterações for alcançado ( $k = N_{iter}$ ), a busca é finalizada;
8. Atualizar os  $N_{pt}$  vetores;  $\mathbf{x}^{glo}$  de dimensão  $N_d$ , que contém a melhor posição encontrada por cada partícula do enxame
9. Calcular o valor do peso:

$$w = w_0 + (w_f - w_0) \frac{k}{N_{iter}}$$

10. Atualizar as velocidades das partículas para  $p = 1 \dots N_{pt}$  e  $d = 1 \dots N_d$ :

$$v_{p,d}^{k+1} = wv_{p,d}^k + c_1r_1(x_{p,d}^{ind} - x_{p,d}^k) + c_2r_2(x_d^{glo} - x_{p,d}^k)$$

11. Se a velocidade absoluta da partícula for maior que o máximo permitido, então:

$$v_{p,d}^{k+1} = v_d^{MAX}(v_{p,d}^{k+1})$$

12. Atualizar as posições das partículas:

$$x_{p,d}^{k+1} = x_{p,d}^k + v_{p,d}^k$$

13. Se a posição da partícula está fora do limite permitido, a partícula é colocada no limite de busca violado;

14. Adicionar uma interação ao contador ( $k = k + 1$ ) e voltar ao passo 4.

SCHWAAB *et al.* (2008) mostraram que o algoritmo PSO é simples e de fácil implementação e que o tempo computacional necessário para os cálculos desse método é pequeno, de forma que o tempo total para a estimação de parâmetros é dependente essencialmente do tempo requerido para as avaliações do modelo utilizado.

Segundo SCHWAAB e PINTO (2007a), quando o procedimento de minimização da função-objetivo e de estimação dos parâmetros do modelo é finalizado, deve-se analisar a qualidade dos resultados obtidos com o auxílio das ferramentas estatísticas apropriadas, tais como intervalos e regiões de confiança, matrizes de covariância, sensibilidade e grau de significância dos parâmetros e correlação paramétrica.

Como essa dissertação não aborda estudos detalhados sobre estimação de parâmetros, os aspectos teóricos mais aprofundados dessa área não serão discutidos. Entretanto, como foram realizados procedimentos de estimação de parâmetros e reparametrização de alguns modelos reológicos, o presente trabalho apresenta parte dessa discussão no capítulo de resultados e discussões.

Uma observação quanto aos modelos Cross e Cross Modificado deve ser feita. Alguns artigos consideram que esses modelos apresentam o parâmetro  $\eta_\infty$  e outros ignoram esse parâmetro (ver Tabela 3.2). Como o *software* de Dinâmica dos Fluidos Computacional utilizado neste trabalho não considera este parâmetro, optou-se por apresentar os modelos Cross e Cross modificado conforme mostrados na Tabela 3.2. Em relação aos modelos que possuem o parâmetro  $\eta_\infty$  (Bird-Carreau e Carreau-Yasuda), é importante ressaltar que a análise de sensibilidade indicou que o efeito

desse parâmetro nas respostas dos modelos é pouco significativo. Dessa forma, o ajuste com esses modelos foi realizado considerando  $\eta_{\infty} = 1 \times 10^{-5} Pa.s$ , que é um valor empírico suficientemente pequeno, mas que não traz prejuízos para a estimação dos demais parâmetros. Em relação aos modelos Bird-Carreau, Carreau-Yasuda e Cross, deve-se observar que não foi realizada a estimação de  $\eta_0$ , pois este parâmetro é um dado experimental e representa o valor da viscosidade na menor frequência angular (ou taxa de cisalhamento) medida.

### 2.3.7 Comentários Adicionais

A partir do que foi discutido sobre os artigos encontrados na literatura científica, pode-se concluir que a quantidade de trabalhos existentes não é grande, se comparada a outras áreas da ciência. Isso se deve, principalmente, à complexidade do processo de extrusão que resulta dos fenômenos físicos e químicos intrínsecos a este processo e pelo fato de haver um interesse maior por parte das indústrias do ramo de plásticos que da academia no tema.

A pesquisa sobre Reologia de Polipropileno teve como objetivo verificar a existência de modelos reológicos multivariáveis. Foi observado que a forma funcional da viscosidade é documentada apenas com uma ou duas variáveis e não foram encontrados trabalhos sobre o desenvolvimento de modelos reológicos, especialmente utilizando *grades* fornecidos por empresas que trabalham com materiais poliméricos. Também não foi encontrado qualquer modelo reológico dependente do grau de taticidade do polímero, que é um importante parâmetro durante o processo de fabricação. Percebe-se, portanto, que atualmente há um interesse maior no estudo de aspectos da reologia de polímeros, tais como o efeito da massa molar na curva de viscosidade, em vez do desenvolvimento de novos modelos reológicos.

A pesquisa sobre Extrusão de Polipropileno se mostrou muito fechada. Isso pode ser explicado pelo pequeno número de artigos encontrados. O objetivo dessa pesquisa foi entender o estado da arte sobre esse tema e o material obtido na literatura pode ser dividido em duas linhas de estudo. A primeira refere-se à forma como o processo de extrusão afeta as características do polipropileno que está sendo processado. Pode-se observar que esses trabalhos tendem a ser mais antigos. A segunda linha de estudo refere-se à análise de diferentes extrusoras ou elementos do parafuso. Percebe-se um destaque do grupo de estudos da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) na área de Extrusão de Polipropileno.

Os trabalhos sobre Desgaste de Extrusoras foram pesquisados com o objetivo de entender o que existe na literatura científica sobre o tema, mas muito pouco

foi encontrado. Esses trabalhos são difusos, mas estão relacionados, principalmente, com a caracterização do desgaste e não com o motivo ou com a solução do problema. Um dos trabalhos obtidos de maior relevância analisa o tempo de vida útil do molde de uma extrusora por meio de simulações de Monte Carlo. Apesar de não ter relação direta com o problema do desgaste, é um trabalho interessante que pode servir como base para outros estudos sobre vida útil de componentes de uma extrusora, como parafusos ou barris. Outros trabalhos encontrados estão relacionados com a solução do desgaste em extrusoras, mas sob um ponto de vista industrial; ou seja, com o auxílio de um diagrama com causas mais frequentes dos problemas e com possíveis formas de resolver. Esses trabalhos não trazem discussões nem motivos científicos. A ausência quase total de material nesta área pode ser explicada pelo interesse maior das indústrias na resolução de problemas envolvendo extrusoras e por eles serem dos mais variados tipos, incluindo desde problemas nos produtos formados até na estrutura física do equipamento. O baixo número de artigos encontrados está de acordo com o baixo número de patentes encontradas, indicando que, mesmo com a preocupação sendo maior por partes das empresas, esse ainda é um tema de complexidade elevada.

A pesquisa pelos trabalhos sobre Modelagem Matemática Fenomenológica tiveram como objetivo obter referências para o desenvolvimento de um modelo simplificado com base nos balanços de massa e energia. Os principais artigos encontrados sobre o estudo do escoamento de polímero fundido em extrusoras abordam a discretização de uma extrusora como uma série de tanques de mistura para realização dos cálculos matemáticos e obtenção das variáveis de interesse. A maior dificuldade desses trabalhos está associada à modelagem do termo de dissipação viscosa, devido à complexidade inerente do fenômeno. Um outro assunto abordado pelos trabalhos na área de Modelagem Matemática Fenomenológica é a análise dos efeitos relacionados às distribuições de tempo de residência e capacidade de mistura de extrusoras, fora do escopo de interesses do presente trabalho.

A pesquisa sobre Simulação Computacional via CFD também teve como objetivo entender os tipos de estudos existentes na área de Dinâmica dos Fluidos Computacional. O material obtido se mostrou bastante abrangente, o que pode ser explicado pelo avanço da tecnologia nos últimos anos. Como a investigação do processo de extrusão e de seus fenômenos é de grande complexidade, a utilização do computador e de suas ferramentas para o entendimento de diversos aspectos dessa tema não é só útil, como também necessária. Observou-se a utilização de alguns *softwares* nesses trabalhos, tanto de código aberto, quanto comerciais, sendo o principal o *Polyflow* (ANSYS), presente em 59% dos artigos encontrados. Nota-se que esse programa é específico para simulações com polímeros e apresenta diversos modelos reológicos,

tanto os clássicos (10 modelos), quanto os viscoelásticos (9 modelos).

Esse tema é bastante diversificado e pode ser dividido em quatro grupos: análise de grandezas envolvidas no escoamento de polímeros em extrusoras, aplicação e/ou desenvolvimento de métodos numéricos em simulações de CFD, análise dos efeitos relacionados a distribuições de tempo de residência e mistura e outros estudos com CFD envolvendo extrusão de polímeros. O desenvolvimento do estudo de CFD nesta dissertação é alinhado com o primeiro grupo. Entretanto, observa-se um dado em comum entre todos os artigos encontrados: não foi encontrado qualquer trabalho que tenha utilizado extrusoras industriais para a condução das análises e todos eles apresentam seus estudos com base em pequenas seções de extrusoras de laboratório. Nota-se que os maiores parafusos observados (em torno de 1 *m* de comprimento) não especificam questões importantes como, por exemplo, a forma de construção do parafuso e nem trazem análises mais detalhadas sobre a modelagem e os métodos numéricos usados no estudo. Isso significa que qualquer estudo envolvendo uma extrusora industrial está à frente do processo de inovação dessa área.

A última área abordada na revisão bibliográfica foi a de Estimação de Parâmetros. A principal aplicação deste tema no presente trabalho diz respeito ao desenvolvimento de um modelo reológico multivariável, a partir de dados experimentais de curvas de viscosidade, para utilização tanto na modelagem matemática fenomenológica, quanto no estudo de CFD, com o objetivo de representar de forma mais adequada a reologia dos *grades* de polipropileno estudados.

# Capítulo 3

## Desenvolvimento do Modelo Reológico

### 3.1 Materiais e Métodos

Os dados de viscosidade como função da frequência angular dos cinco *grades* comerciais de polipropileno usados na presente dissertação foram medidos pela Braskem em um reômetro ARES-G2 (TA Instruments, França) com 25 *mm* de diâmetro e 1 *mm* de distância entre as placas. Deve-se observar que esses *grades* foram obtidos em um mesmo reator e suas características físicas são mostradas na Tabela 3.1 e descritas a seguir.

- **H125**

O *grade* H125 é uma resina de polipropileno homopolímero destinada à aplicação em não-tecidos produzidos pelo processo *spunbond*. Esta resina garante ótima processabilidade, possibilitando incremento na velocidade de linha e elevação da pressão de ar na cabine, além de ganhos de propriedades mecânicas. O elevado índice de fluidez, estreita distribuição de massa molar, estabilização especial e rígido controle de géis garantem seu excelente desempenho.

- **H503HS**

O *grade* H503HS é uma resina de polipropileno de baixo índice de fluidez, aditivada para uso geral e indicada para ráfia. Essa resina apresenta excelente processabilidade, altíssima velocidade de produção com boa estabilidade do fundido, bom balanço rigidez/impacto e baixa transferência de odor e sabor.

- **H503**

O *grade* H503 é uma resina de polipropileno de baixo índice de fluidez, aditivada para uso geral e indicada para moldagem por injeção, rafia, filmes biorientados e extrusão geral. Essa resina apresenta excelente processabilidade com boa estabilidade do fundido, bom balanço rigidez/impacto e baixa transferência de odor e sabor.

- **H614**

O *grade* H614 é uma resina de polipropileno de baixo índice de fluidez, estabilizada para aplicações sujeitas à exposição direta à luz solar, especialmente desenvolvida para a fabricação de *big bags*. Essa resina apresenta boa processabilidade com alta resistência do fundido.

Tabela 3.1: Características dos *grades* comerciais usados no trabalho

<b><i>Grade</i></b>	<b>Massa Molar Média (<i>kg/kmol</i>)</b>	<b>Densidade (<i>kg/m<sup>3</sup></i>)</b>
H125	164	905
H503HS	320	905
H503	359	905
H614 RJ	375	905
H614 SP	404	905

Para o desenvolvimento de um modelo reológico multivariável, foram considerados inicialmente os modelos reológicos clássicos mais simples; ou seja, aqueles que não possuem o termo de tensão de cisalhamento inicial,  $\tau_0$ , e que não são indicados para a modelagem de fluidos viscoelásticos. Além desses modelos, também foi proposto para o ajuste das curvas um modelo empírico baseado no modelo *Power Law*, chamado de *Power Law* Modificado, em que o expoente da taxa de cisalhamento é uma função dessa variável. Esses modelos são mostrados na Tabela 3.2. Como será mostrado nos próximos capítulos, o modelo Cross Modificado apresentou um resultado muito próximo do modelo de Cross para os *grades* analisados inicialmente (H125 e H503). Por essa razão, como o modelo Cross está disponível no *software* de CFD utilizado nesse trabalho, optou-se por utilizá-lo nas comparações com outros modelos reológicos.

Tabela 3.2: Modelos reológicos clássicos (não aplicados para fluidos viscoelásticos) e modelo reológico empírico usados para estimação de parâmetros a partir dos dados experimentais.

Modelo	Equação	Parâmetros
<i>Power Law</i>	$\eta(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1}$	$K, n$
Bird-Carreau	$\frac{\eta(\dot{\gamma}) - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = [1 + (\lambda\dot{\gamma})^2]^{\frac{n-1}{2}}$	$\eta_0, \eta_{\infty}, \lambda, n$
Carreau-Yasuda	$\frac{\eta(\dot{\gamma}) - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = [1 + (\lambda\dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}}$	$\eta_0, \eta_{\infty}, \lambda, n$
Cross	$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\eta_0}{1 + (\lambda\dot{\gamma})^m}$	$\eta_0, \lambda, m$
Cross Modificado	$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\eta_0}{(1 + \lambda\dot{\gamma})^m}$	$\eta_0, \lambda, m$
<i>Power Law</i> Modificado (modelo proposto)	$\eta(\dot{\gamma}) = A\dot{\gamma}^{b+c \log \dot{\gamma}}$	$A, b, c$

Como os dados experimentais de viscosidade dos *grades* são usualmente apresentados na forma de curvas de viscosidade versus frequência angular ( $\eta \times \omega$ ) e as análises fenomenológicas geralmente são feitas a partir de curvas de viscosidade versus taxa de cisalhamento ( $\eta \times \dot{\gamma}$ ), é necessário fazer inicialmente a conversão entre essas variáveis. A relação entre a frequência angular e a taxa de cisalhamento depende da geometria do equipamento utilizado, sendo no caso particular considerado apresentada no material explicativo *Rheology: Theory and Application* (TA INSTRUMENT, 2019), fabricante do reômetro de modelo ARES-G2 de placas paralelas (ou discos paralelos). A Figura 3.1, adaptada do trabalho de CZECHOWSKA *et al.* (2017), mostra um desenho esquemático desse reômetro.

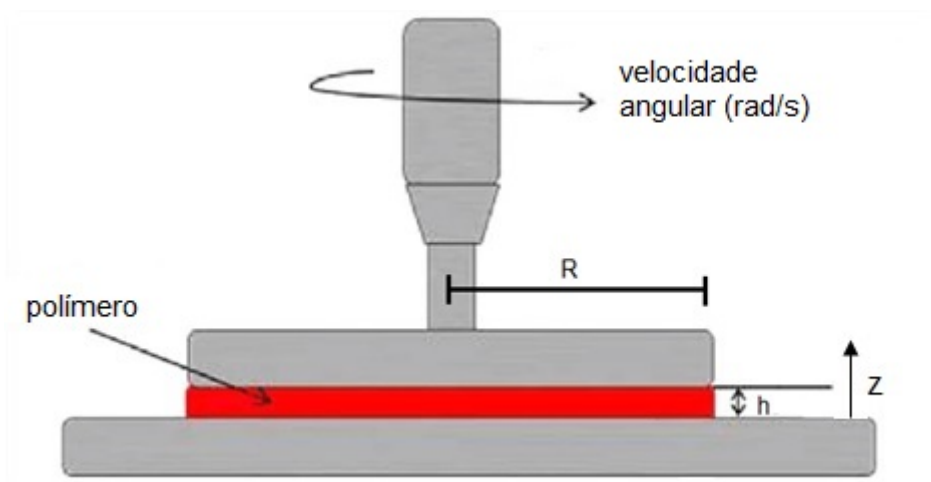


Figura 3.1: Desenho esquemático de um reômetro do tipo placas paralelas. Figura adaptada de CZECHOWSKA *et al.* (2017).



Segundo consta no material da empresa TA Instruments, alguns exemplos de substâncias cujas viscosidades podem ser medidas em um reômetro de placas paralelas são:

- líquidos com viscosidade baixa, média e alta;
- amostras que apresentem partículas grandes;
- amostras que apresentem longo tempo de relaxação;
- amostras disponíveis em pequeno volume.

Trata-se, portanto, de equipamento de grande versatilidade. Ainda de acordo com esta referência, a relação entre frequência angular e taxa de cisalhamento é dada por

$$\omega = \frac{h}{R} \dot{\gamma} \quad (3.1.1)$$

em que  $h$  é a distância entre as placas e  $R$  é o raio da placa rotatória do reômetro. Esse resultado pode ser obtido com o auxílio de conceitos da Mecânica dos Fluidos, utilizando a equação clássica de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos com as seguintes simplificações:

1. Fluido Newtoniano;
2. Velocidade somente ao longo do eixo  $\theta$ ; ou seja,  $v_r = 0$  e  $v_z = 0$ ;
3. Velocidade ao longo do eixo  $\theta$  é função apenas da distância ao centro do reômetro e da distância vertical entre as placas do equipamento,  $v_\theta(r, z)$ ;
4. Perfil de velocidade linear no eixo  $z$  (distância  $h$  entre as placas é muito pequena);
5. Apenas  $\dot{\gamma}_{z\theta}$  é medido pelo reômetro.

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho g + \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (3.1.2)$$

A partir das hipóteses listadas e observando o desenho esquemático do sistema de medição mostrado na Figura 3.1, pode-se inferir que as condições de contorno em  $z$  são dadas por

$$\begin{aligned}v_{\theta}(r, 0) &= 0 \\v_{\theta}(r, h) &= \omega r\end{aligned}\tag{3.1.3}$$

As Hipóteses 2, 3 e 4 e as condições de contorno descritas pela Equação (3.1.3), são representadas na Figura 3.2.

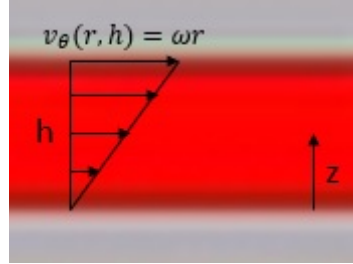


Figura 3.2: Perfil característico de velocidades no reômetro de duas placas rotatórias.

Pela consideração de perfil de velocidades linear no eixo  $z$ , pode-se escrever a velocidade do polímero fundido no reômetro como

$$v_{\theta}(r, z) = c_1 z + c_2\tag{3.1.4}$$

A aplicação das condições de contorno em  $z$  mostra  $c_1 = \frac{\omega r}{z}$  e  $c_2 = 0$ , de forma que o perfil de velocidades é dado por

$$v_{\theta}(r, z) = \frac{\omega r}{h} z\tag{3.1.5}$$

Assim, a taxa de cisalhamento é dada por

$$\dot{\gamma}_{z\theta}(r, z) = \frac{\partial v_{\theta}(r, z)}{\partial z} = \frac{\omega r}{h}\tag{3.1.6}$$

Como o reômetro mede a taxa de cisalhamento em  $(r, z) = (R, h)$ ; ou seja,  $\dot{\gamma}_{z\theta}(R, h) \equiv \dot{\gamma}$ , a relação entre frequência angular e essa taxa pode ser finalmente obtida:

$$\dot{\gamma}_{z\theta}(R, h) \equiv \dot{\gamma} = \frac{\omega R}{h}\tag{3.1.7}$$

Isolando  $\omega$ , obtém-se o mesmo resultado documentado em TA INSTRUMENT (2019), Equação (3.1.1):

$$\omega = \frac{h}{R}\dot{\gamma} \quad (3.1.8)$$

No caso do reômetro utilizado,  $R = 12,5 \text{ mm}$  e  $h = 1 \text{ mm}$ , de forma que o fator de conversão,  $\delta$ , entre essas variáveis é

$$\delta = \frac{h}{R} = \frac{1 \text{ mm}}{12,5 \text{ mm}} = 0,08 \quad (3.1.9)$$

Assim, neste caso, a relação entre a frequência angular e a taxa de cisalhamento é

$$\omega = 0,08\dot{\gamma} \quad (3.1.10)$$

## 3.2 Ajuste Inicial das Curvas

Inicialmente o ajuste das curvas reológicas, conduzido com o objetivo de selecionar o modelo reológico mais adequado e, portanto, aquele a ser utilizado nas simulações computacionais realizadas com o auxílio de ferramentas de CFD, foi implementado com os *grades* H503 e H125. O *grade* H503 foi selecionado por apresentar massa molar média intermediária entre os *grades* disponíveis para conduzir o estudo, enquanto o *grade* H125 foi selecionado por apresentar a menor massa molar média, apresentando comportamento reológico distinto dos demais *grades* fornecidos. Como os dados experimentais foram obtidos nas temperaturas de  $180^\circ\text{C}$ ,  $200^\circ\text{C}$  e  $220^\circ\text{C}$ , qualquer uma delas poderia ser usada para promover o ajuste inicial, tendo sido escolhida a temperatura de  $180^\circ\text{C}$  por causa das maiores viscosidades medidas, o que torna mais fácil o trabalho de discriminar os desempenhos dos diferentes modelos.

Os ajustes foram conduzidos com os modelos *Power Law*, Bird-Carreau, Carreau-Yasuda e Cross, todos esses disponíveis no programa de simulação computacional utilizado nesta dissertação. Foi ainda proposto o modelo chamado de *Power Law* Modificado, que demandou implementação computacional independente, por não estar disponível nos pacotes utilizados. Os modelos são apresentados na Tabela 3.2 do Capítulo 2.

As Figuras 3.3 a 3.10 apresentam os dados de comportamento reológico obtidos para os *grades* H503 e H125, bem como as curvas preditas pelos modelos analisados após o ajuste, realizado na forma descrita na Seção 2.3.6 do Capítulo 2. Os parâmetros estimados e os respectivos intervalos de confiança são apresentados nas

Tabelas 3.3 a 3.10.

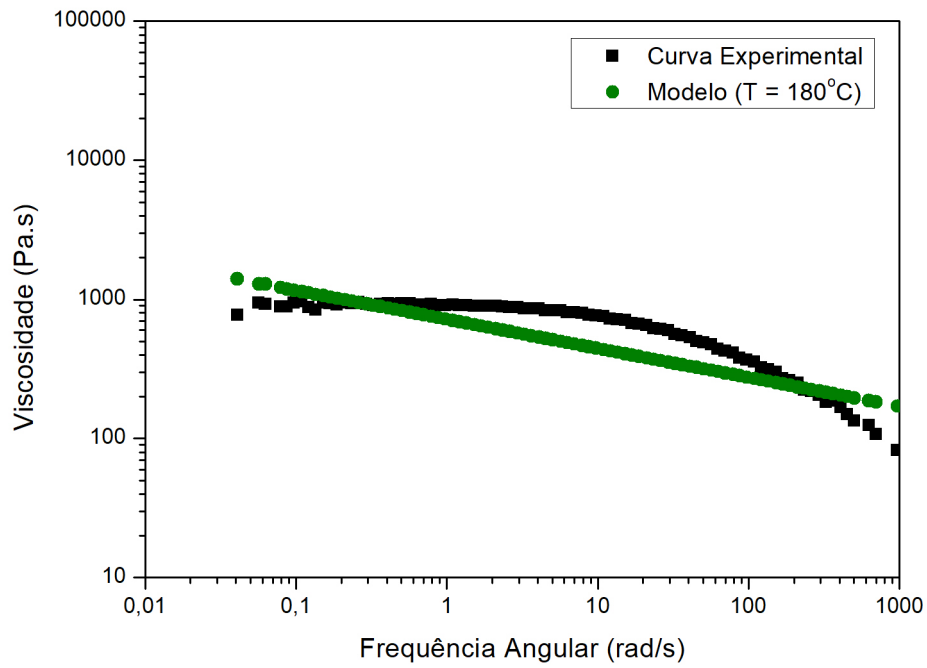


Figura 3.3: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* (*Grade H125; T = 180°C*)

Tabela 3.3: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* (*Grade H125; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$K(\times 10^2) (Pa.s^n)$	7,172	6,452	7,910
$n$	0,791	0,766	0,815

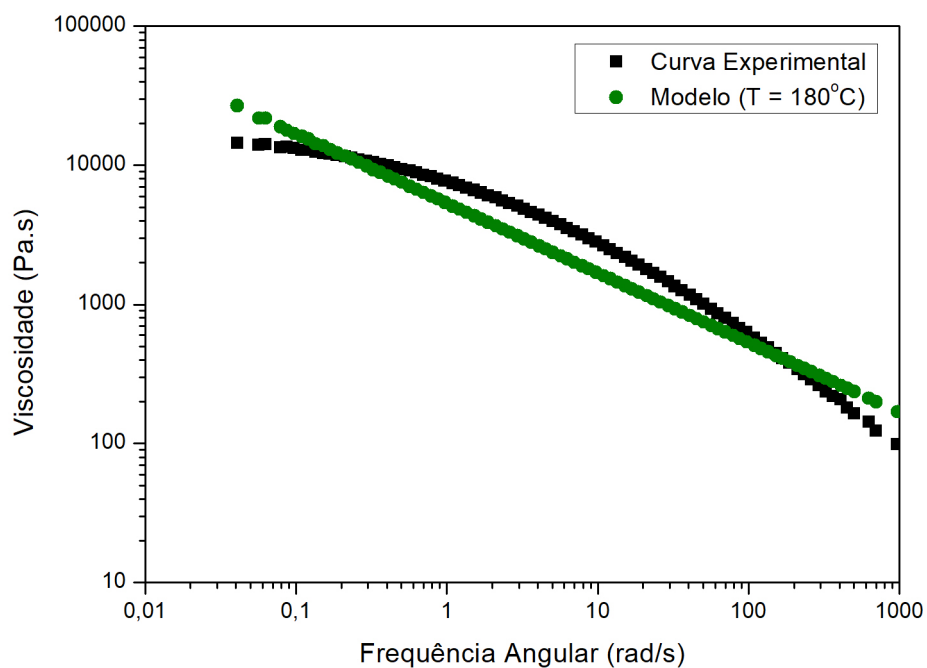


Figura 3.4: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* (*Grade H503; T = 180°C*)

Tabela 3.4: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* (*Grade H503; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$K(\times 10^3) (Pa.s^n)$	5,329	4,785	5,867
$n$	0,498	0,475	0,522

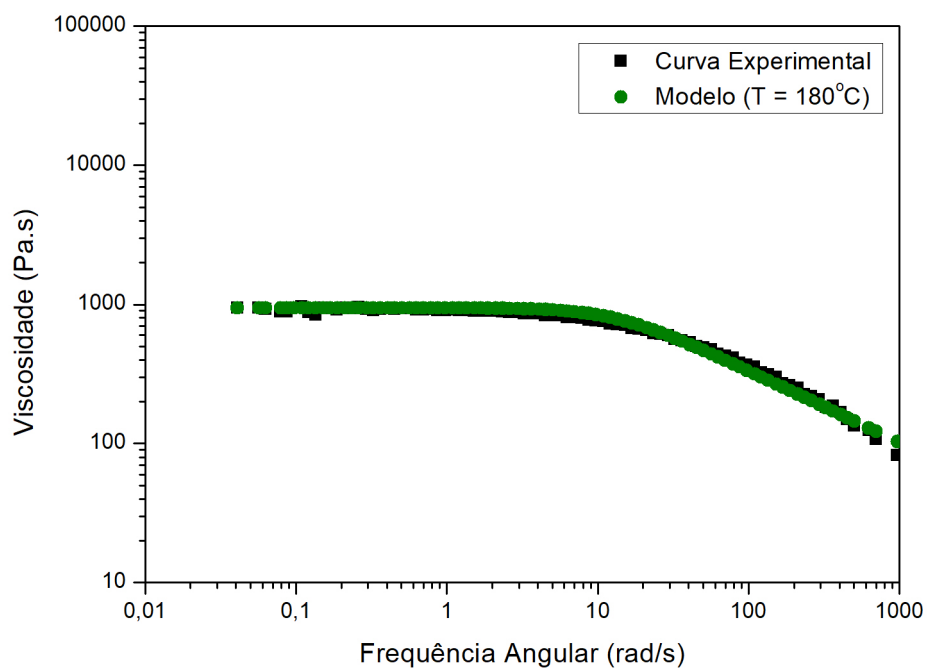


Figura 3.5: Ajuste obtido com o modelo Bird-Carreau (*Grade H125; T = 180°C*)

Tabela 3.5: Parâmetros estimados com o modelo Bird-Carreau (*Grade H125; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$\eta_0$ (Pa.s)	$0,944 \times 10^3$	-	-
$\eta_\infty$ (Pa.s)	$1,000 \times 10^{-5}$	-	-
$n$	0,484	0,454	0,513
$\lambda$ (s)	0,075	0,064	0,089

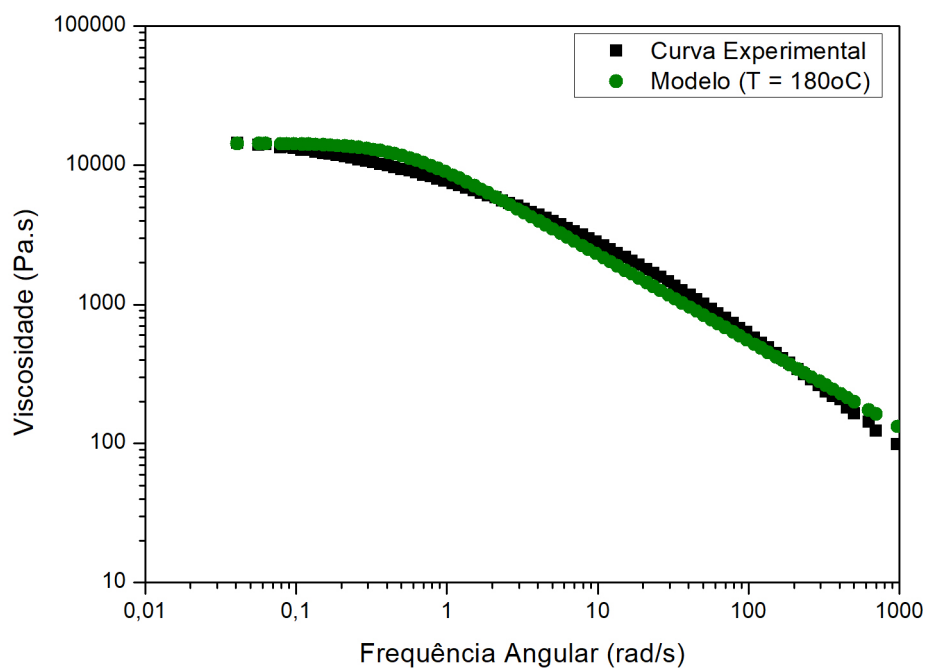


Figura 3.6: Ajuste obtido com o modelo Bird-Carreau (*Grade H503; T = 180°C*)

Tabela 3.6: Parâmetros estimados com o modelo Bird-Carreau (*Grade H503; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$\eta_0$ (Pa.s)	$1,441 \times 10^4$	-	-
$\eta_\infty$ (Pa.s)	$1,000 \times 10^{-5}$	-	-
$n$	0,378	0,354	0,402
$\lambda$ (s)	1,935	1,623	2,339

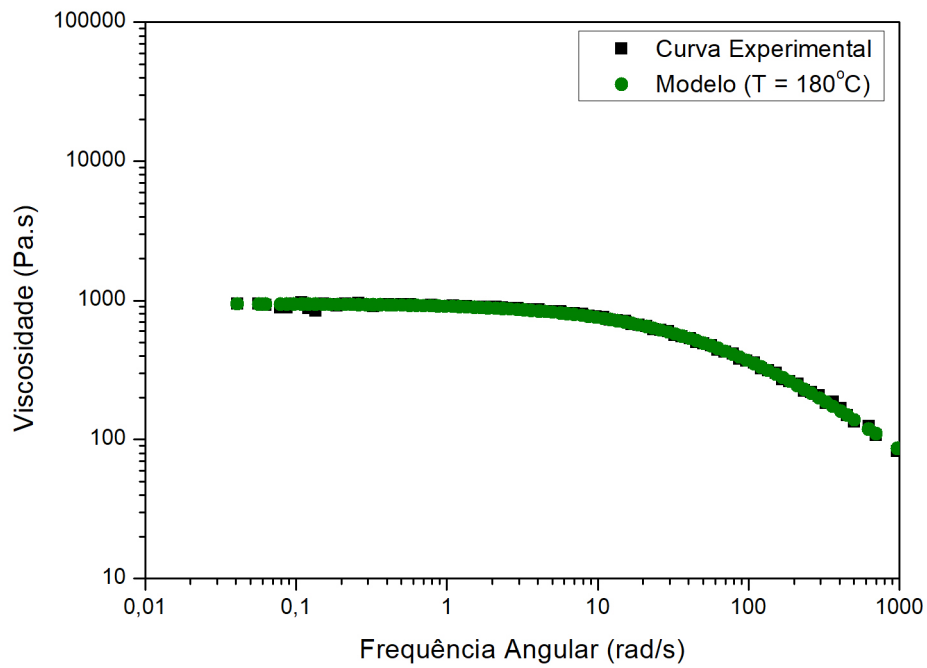


Figura 3.7: Ajuste obtido com o modelo Carreau-Yasuda (*Grade H125; T = 180°C*)

Tabela 3.7: Parâmetros estimados com o modelo Carreau-Yasuda (*Grade H125; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$\eta_0$ (Pa.s)	$0,944 \times 10^3$	-	-
$\eta_\infty$ (Pa.s)	$1,000 \times 10^{-5}$	-	-
$n$	0,171	0,133	0,215
$a$	0,781	0,760	0,805
$\lambda$ (s)	0,016	0,014	0,018



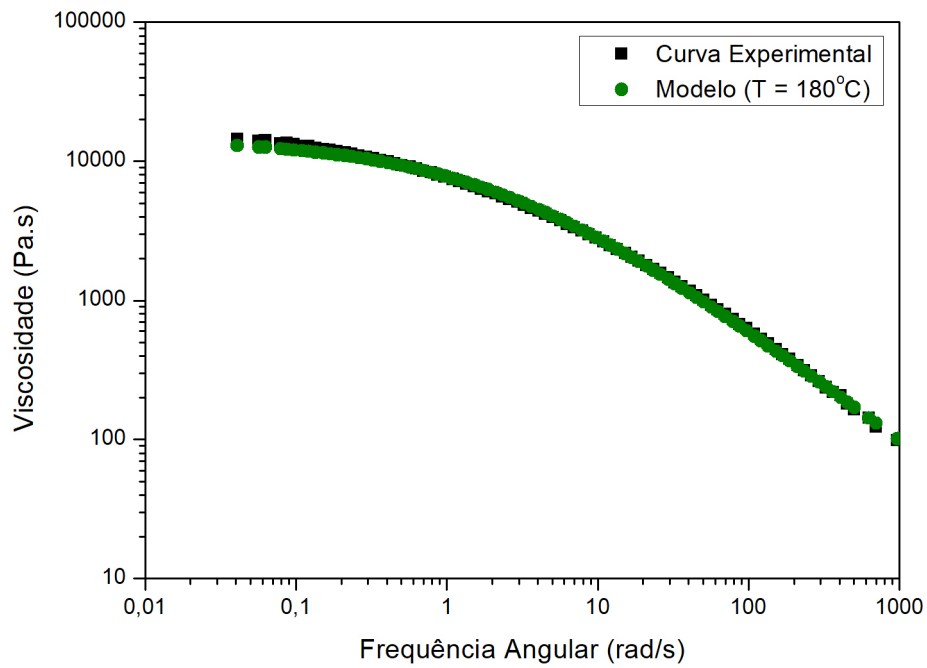


Figura 3.8: Ajuste obtido com o modelo Carreau-Yasuda (*Grade H503; T = 180°C*)

Tabela 3.8: Parâmetros estimados com o modelo Carreau-Yasuda (*Grade H503; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$\eta_0$ (Pa.s)	$1,441 \times 10^4$	-	-
$\eta_\infty$ (Pa.s)	$1,000 \times 10^{-5}$	-	-
$n$	0,191	0,170	0,191
$a$	0,629	0,607	0,629
$\lambda$ (s)	0,449	0,392	0,449

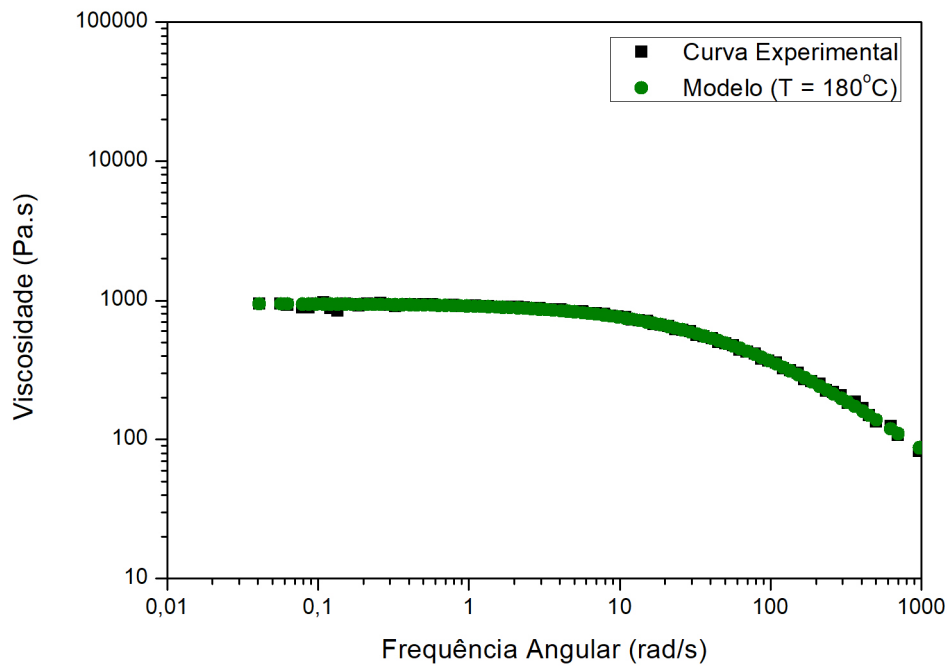


Figura 3.9: Ajuste obtido com o modelo Cross (*Grade H125; T = 180°C*)

Tabela 3.9: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade H125; T = 180°C*)

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$\eta_0$ ( <i>Pa.s</i> )	$0,944 \times 10^3$	-	-
$m$	0,801	0,787	0,815
$\lambda$ ( <i>s</i> )	0,017	0,017	0,018

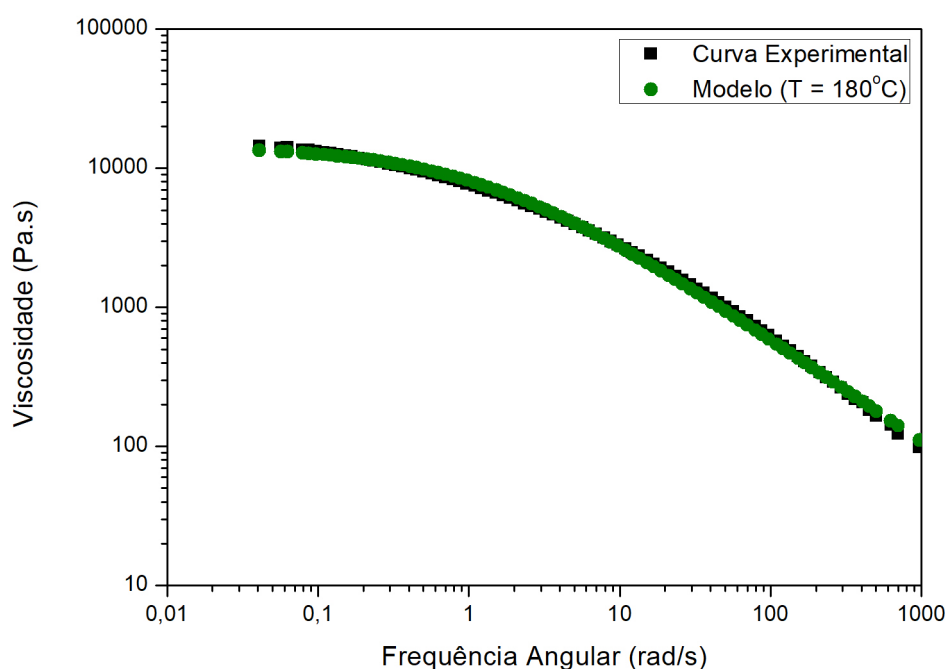


Figura 3.10: Modelo Cross (*Grade* H503;  $T = 180^{\circ}C$ )

Tabela 3.10: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade* H503;  $T = 180^{\circ}C$ )

Parâmetros	Valor	Limite Inferior	Limite Superior
$\eta_0$ (Pa.s)	$1,441 \times 10^4$	-	-
$m$	0,742	0,734	0,751
$\lambda$ (s)	0,717	0,684	0,753

Com base nos gráficos de viscosidade versus frequência angular apresentados, percebe-se que o modelo *Power Law* não consegue prever os dados experimentais de forma apropriada, enquanto o modelo Bird-Carreau consegue representar os dados do *grade* H125 adequadamente, mas não consegue capturar o comportamento reológico em certas regiões de frequência angular do *grade* H503. Por outro lado, os modelos Carreau-Yasuda e Cross conseguem prever o conjunto completo das curvas experimentais fornecidas, sendo, portanto, os modelos reológicos mais indicados para serem utilizados nesse conjunto de *grades* de PP. Entretanto, o modelo Carreau-Yasuda requer a definição de cinco parâmetros, enquanto o modelo Cross requer a definição de apenas três parâmetros, o que representa uma vantagem numérica relevante. Como o modelo Cross é muito utilizado e está disponível em *softwares* comerciais, incluindo o que foi utilizado no presente trabalho, este modelo foi escolhido para representar o comportamento reológico dos *grades* de PP

disponíveis para o presente estudo.

### 3.3 Modelo Cross

As Figuras 3.11 a 3.15 apresentam graficamente os desempenhos do modelo Cross para representar as curvas reológicas de diferentes grades de PP a diferentes temperaturas, enquanto as Tabelas 3.11 a 3.15 apresentam os valores dos parâmetros estimados e os respectivos intervalos de confiança. As siglas LI e LS significam Limite Inferior e Limite Superior, respectivamente. Em todos os casos, as estimações foram conduzidas na forma descrita na Seção 2.3.6 do Capítulo 2.

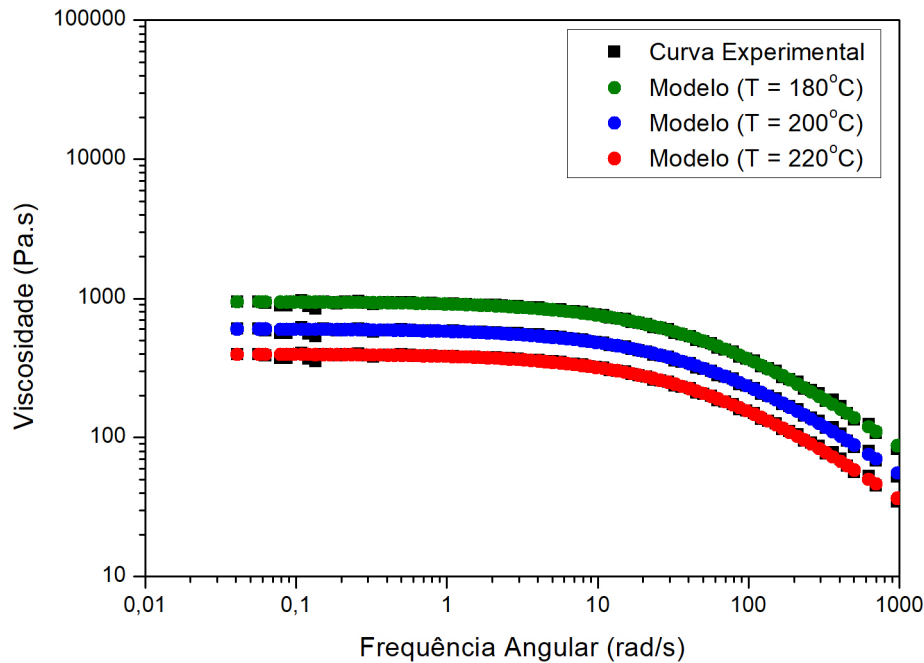


Figura 3.11: Ajuste obtido com o modelo Cross (*Grade* H125;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.11: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade* H125;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$\eta_0 (\times 10^3) (Pa.s)$	0,944	-	-	0,601	-	-	0,396	-	-
$m$	0,801	0,787	0,815	0,801	0,787	0,815	0,801	0,786	0,814
$\lambda (s)$	0,017	0,017	0,018	0,017	0,017	0,018	0,017	0,017	0,018

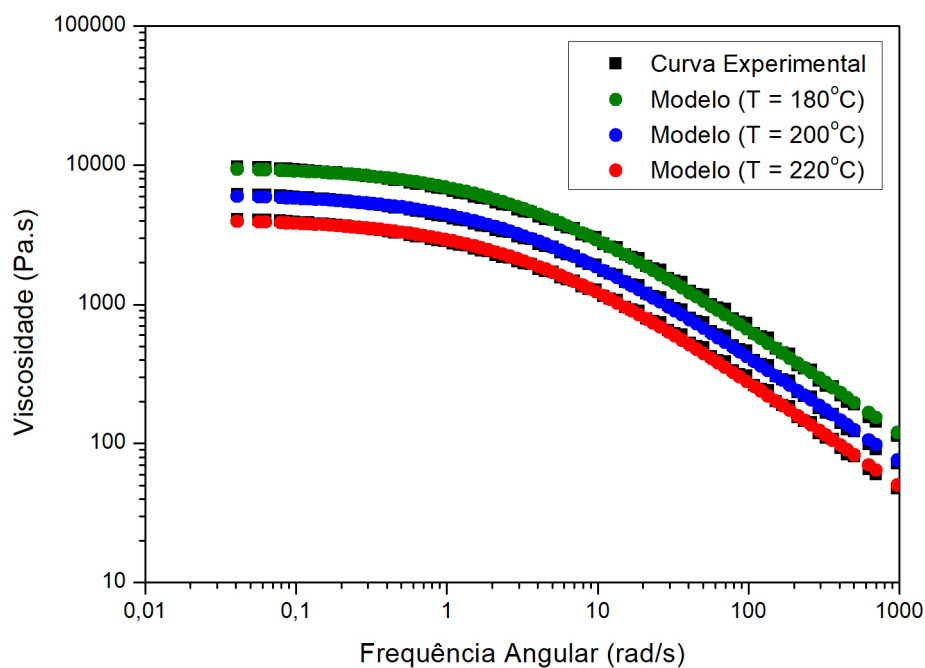


Figura 3.12: Ajuste obtido com o modelo Cross (*Grade* H503HS;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.12: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade* H503HS;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$\eta_0 (\times 10^3) (Pa.s)$	9,718	-	-	6,184	-	-	4,083	-	-
$m$	0,769	0,760	0,778	0,769	0,760	0,777	0,769	0,760	0,778
$\lambda (s)$	0,306	0,294	0,319	0,306	0,294	0,319	0,306	0,294	0,320

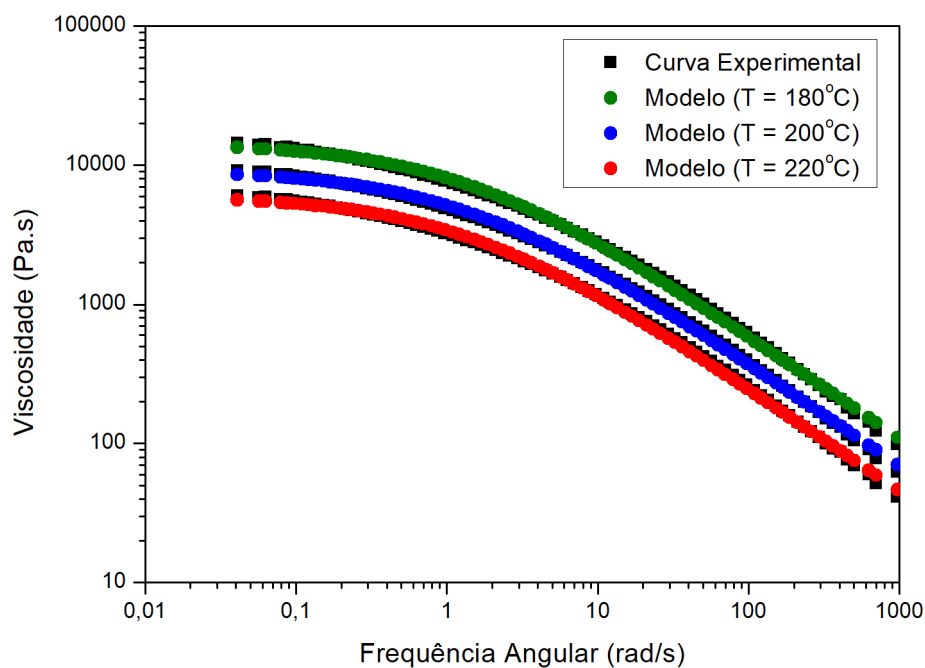


Figura 3.13: Ajuste obtido com o modelo Cross (*Grade* H503;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.13: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade* H503;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$\eta_0 (\times 10^4) (Pa.s)$	1,441	-	-	0,917	-	-	0,605	-	-
$m$	0,742	0,734	0,751	0,742	0,733	0,751	0,742	0,733	0,751
$\lambda (s)$	0,717	0,684	0,753	0,717	0,684	0,753	0,717	0,683	0,752

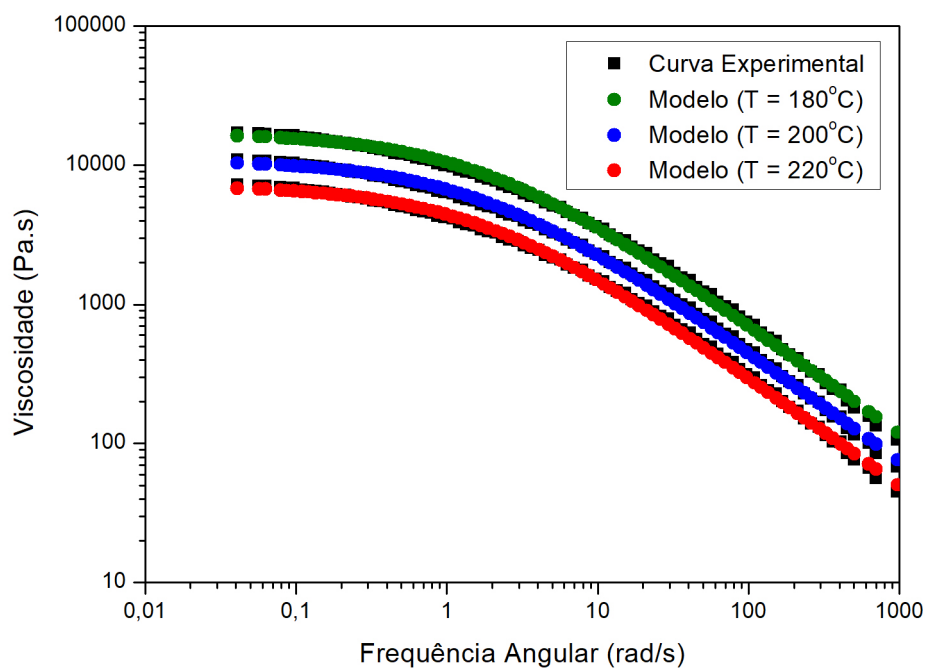


Figura 3.14: Ajuste obtido com o modelo Cross (*Grade* H614 RJ;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.14: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade* H614 RJ;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$\eta_0 (\times 10^4) (Pa.s)$	1,711	-	-	1,089	-	-	0,719	-	-
$m$	0,787	0,777	0,796	0,787	0,777	0,796	0,787	0,777	0,796
$\lambda (s)$	0,554	0,527	0,582	0,554	0,528	0,583	0,554	0,528	0,581

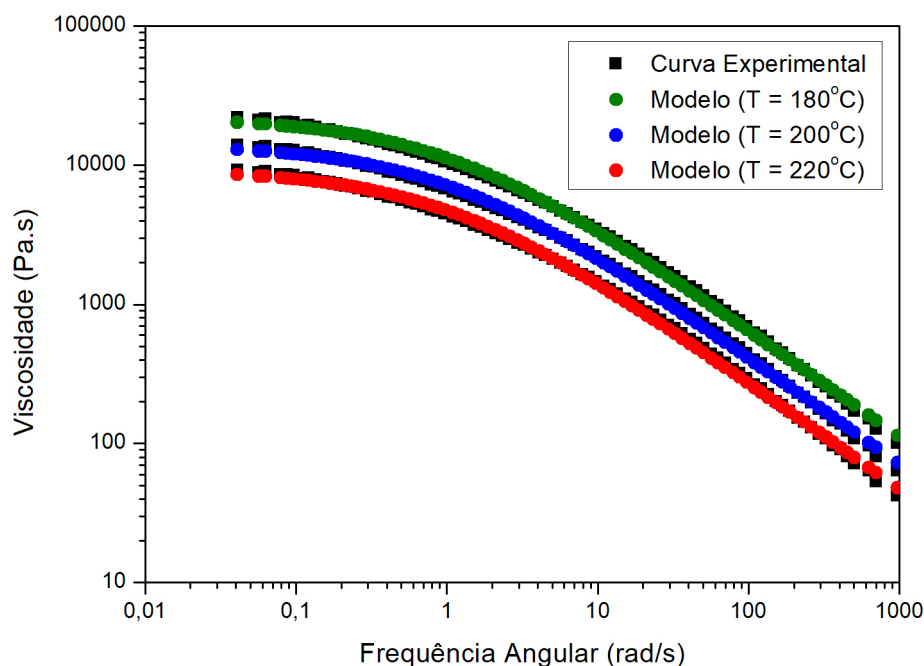


Figura 3.15: Ajuste obtido com o modelo Cross (*Grade* H614 SP;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.15: Parâmetros estimados com o modelo Cross (*Grade* H614 SP;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$\eta_0(\times 10^4) (Pa.s)$	2,197	-	-	1,398	-	-	0,923	-	-
$m$	0,770	0,761	0,779	0,770	0,760	0,779	0,770	0,760	0,778
$\lambda (s)$	0,944	0,896	0,987	0,944	0,905	0,996	0,944	0,901	0,995

Com base na análise das Figuras 3.11 a 3.15, é possível perceber que os parâmetros do modelo Cross exercem os seguintes efeitos sobre a curva de escoamento:

- $m \rightarrow$  é responsável pela inclinação da curva de escoamento a partir do ponto de viscosidade máxima;
- $\lambda \rightarrow$  é responsável pela suavidade na transição entre o primeiro *plateau* Newtoniano (região horizontal da curva de escoamento de valor igual a  $\eta_0$ ) e a região de inclinação da curva;
- $\eta_0 \rightarrow$  é a viscosidade inicial da curva de escoamento.



As Tabelas 3.11 a 3.15 mostram os parâmetros do modelo Cross como função da massa molar média dos *grades* comerciais disponíveis de polipropileno e da temperatura. Com base nos valores apresentados nessas tabelas, podem ser construídos os gráficos mostrados nas Figuras 3.16, 3.17 e 3.18.

A Figura 3.16 mostra que o parâmetro  $m$  não depende da temperatura do escoamento, mas depende da massa molar média do *grade* considerado. Entretanto, a dependência de  $m$  com a massa molar média é também pouco relevante, de forma que esse parâmetro pode ser escrito como

$$m \approx 0,77 \quad (3.3.1)$$

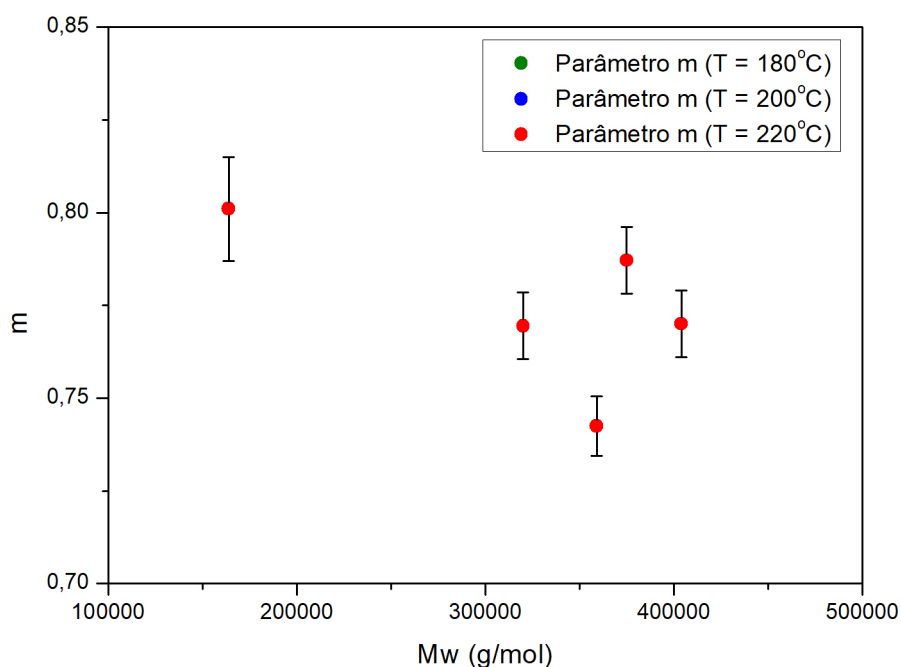


Figura 3.16: Variação do parâmetro  $m$  do modelo Cross com a temperatura e massa molar do *grade* de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem.

A Figura 3.17 mostra que o parâmetro  $\lambda$  não depende da temperatura do escoamento, mas depende da massa molar média do *grade* considerado. Assim, pode ser proposta uma forma funcional para esse parâmetro de acordo com a expressão  $\lambda = \lambda(M_w)$ . Após avaliar diferentes formas funcionais com o auxílio do programa *OriginPro 8* (ORIGINLAB CORPORATION, 2009) encontrou-se uma função que representa adequadamente os pontos obtidos. Dessa forma, o parâmetro  $\lambda$  pode ser escrito nas formas exponencial e linear, respectivamente, como

$$\lambda(M_w) = 4,7 \times 10^{-25} M_w^{4,3294} \quad (3.3.2)$$

$$\log \lambda = -24,3 + 4,3294 \log M_w \quad (3.3.3)$$

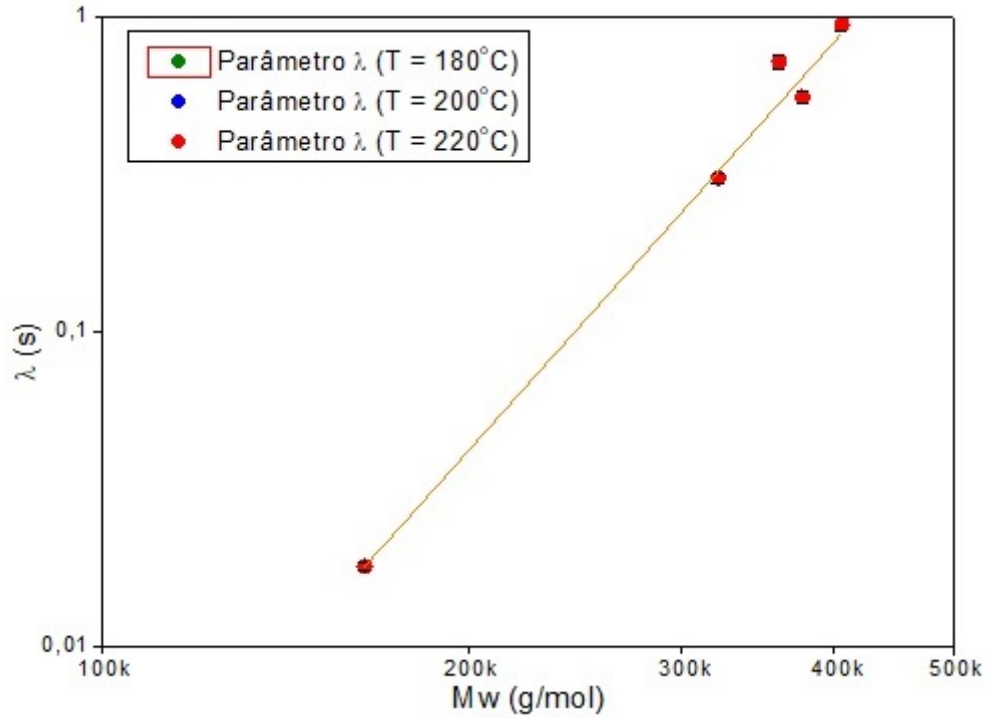


Figura 3.17: Variação do parâmetro  $\lambda$  do modelo Cross com a temperatura e massa molar do grade de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem.

A Figura 3.18 mostra que o parâmetro  $\eta_0$  depende da temperatura do escoamento e com a massa molar média do *grade* considerado. Assim, a forma funcional desse parâmetro pode ser representada na forma  $\eta_0 = \eta_0(T, M_w)$ . Esse resultado é importante porque mostra que os parâmetros do modelo Cross podem depender simultaneamente da temperatura e da massa molar média do *grade* de PP considerado. É importante enfatizar que não foram encontrados trabalhos na literatura que tenham identificado e quantificado essa dependência.

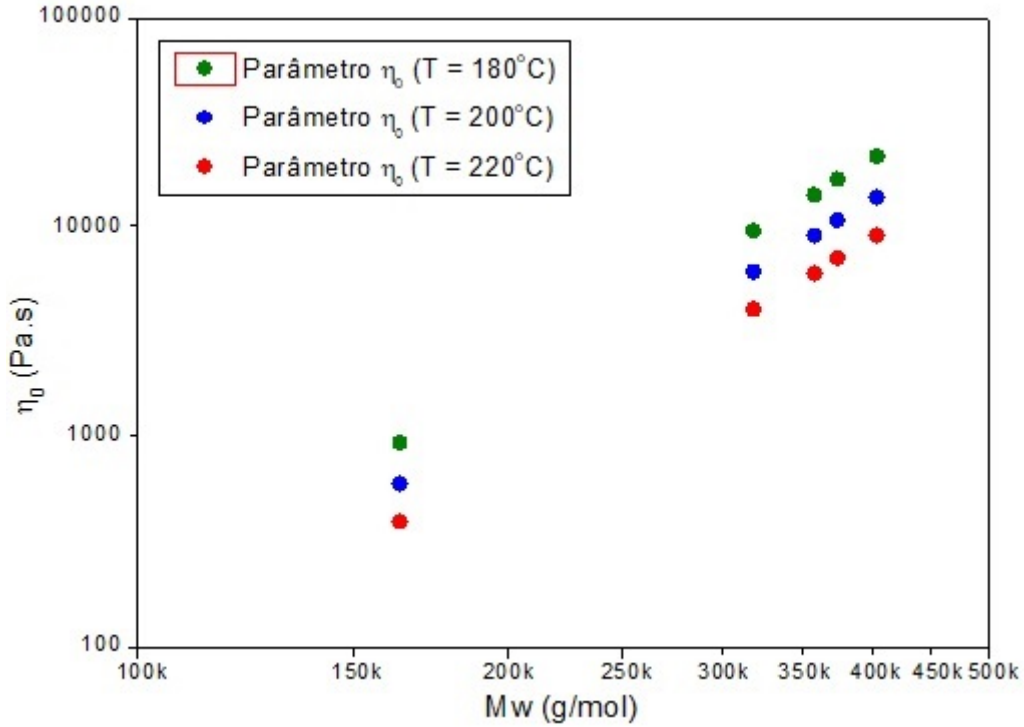


Figura 3.18: Variação do parâmetro  $\eta_0$  do modelo Cross com a temperatura e massa molar do *grade* de PP.

Como o parâmetro  $\eta_0$  depende de duas variáveis, não é possível utilizar o ajuste de curvas no *OriginPro 8* para obter os parâmetros do modelo. Para obter a função  $\eta_0(T, M_w)$ , foi proposta uma combinação de duas funções, sendo uma dependente apenas da massa molar média do polímero e outra dependente apenas da temperatura, com base na clássica função de Arrhenius:

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (3.3.4)$$

Assim, a função proposta para  $\eta_0(T, M_w)$  pode ser dada na forma:

$$\eta_0(T, M_w) = \eta_{00}(M_w) \exp\left[\alpha \left(\frac{1}{T}\right)\right] \quad (3.3.5)$$

Deve-se observar que a equação proposta é empírica, de maneira que o parâmetro  $E$  e a constante universal dos gases ideais,  $R$ , não devem ser interpretados fisicamente, de forma que, na função proposta para  $\eta_{00}(T, M_w)$ , o termo  $-\frac{E}{R}$  pode ser substituído por um parâmetro  $\alpha$  genérico.

Como discutido por SCHWAAB e PINTO (2007b) e SCHWAAB *et al.* (2007), a correlação entre os parâmetros  $\eta_{00}$  e  $\alpha$  pode ser muito alta, tornando difícil a

estimação. Dessa forma, é conveniente realizar uma reparametrização da função de Arrhenius, introduzindo uma temperatura de referência,  $T_{ref}$ , com o objetivo de anular a correlação entre os parâmetros dessa função, minimizando o erro relativo e melhorando o procedimento de estimação desses parâmetros. Dessa forma, a função proposta para  $\eta_0(T, M_w)$  pode ser definida como

$$\eta_0(T, M_w) = \eta_{00}(M_w) \exp \left[ \alpha \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (3.3.6)$$

Conduzindo-se o procedimento de estimação de parâmetros para diferentes valores de  $T_{ref}$ , obtém-se a temperatura de referência apresentada na Figura 3.19 e os resultados mostrados na Tabela 3.16. Observa-se na Figura 3.19 que o valor da temperatura de referência é de fato encontrado no ponto em que a correlação entre os parâmetros  $\alpha$  e  $\eta_{00}$  da função  $\eta_0(T, M_w)$  é nulo.

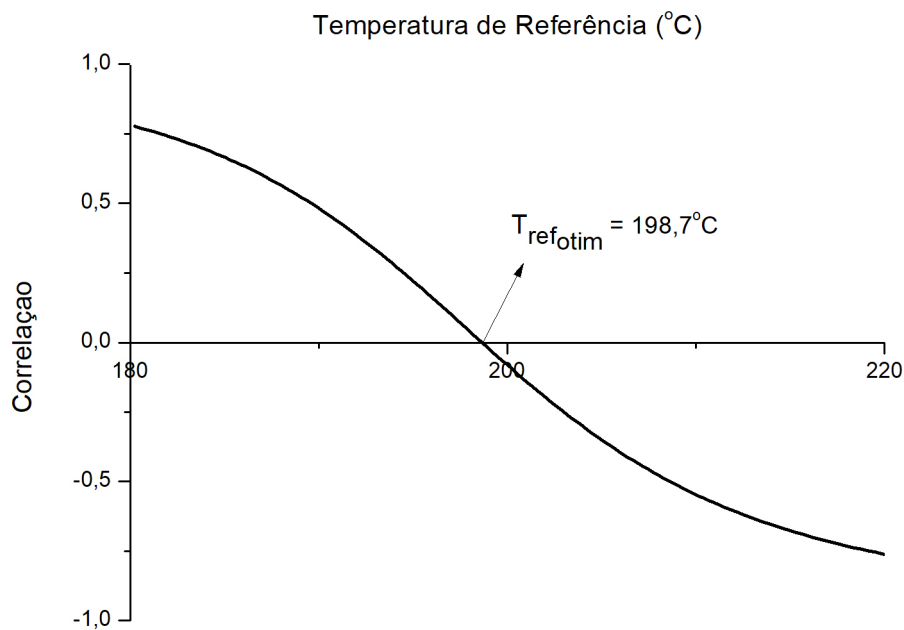


Figura 3.19: Correlação entre os parâmetros  $\alpha$  e  $\eta_{00}$  da função  $\eta_0(T, M_w)$  em função da temperatura de referência

Tabela 3.16: Parâmetros  $\eta_{00}$ ,  $\alpha$  e  $T_{ref}$  da função  $\eta_0(T, M_w)$

<i>Grade</i>	$\eta_{00}(\times 10^4)$ (Pa.s)	LI	LS	$\alpha$ ( $^{\circ}C$ )	LI	LS	$T_{ref}$ ( $^{\circ}C$ )
H125	0,059	0,059	0,060	856,8	846,0	867,7	198,7
H503HS	0,618	0,614	0,622		841,4	872,2	
H503	0,922	0,915	0,929		838,1	875,6	
H614 RJ	1,096	1,087	1,105		837,2	876,6	
H614 SP	1,407	1,395	1,420		836,3	877,4	

Com base na Tabela 3.16, é possível construir o gráfico do parâmetro  $\eta_{00}(M_w)$  para os distintos *grades* em estudo, como mostrado na Figura 3.20.

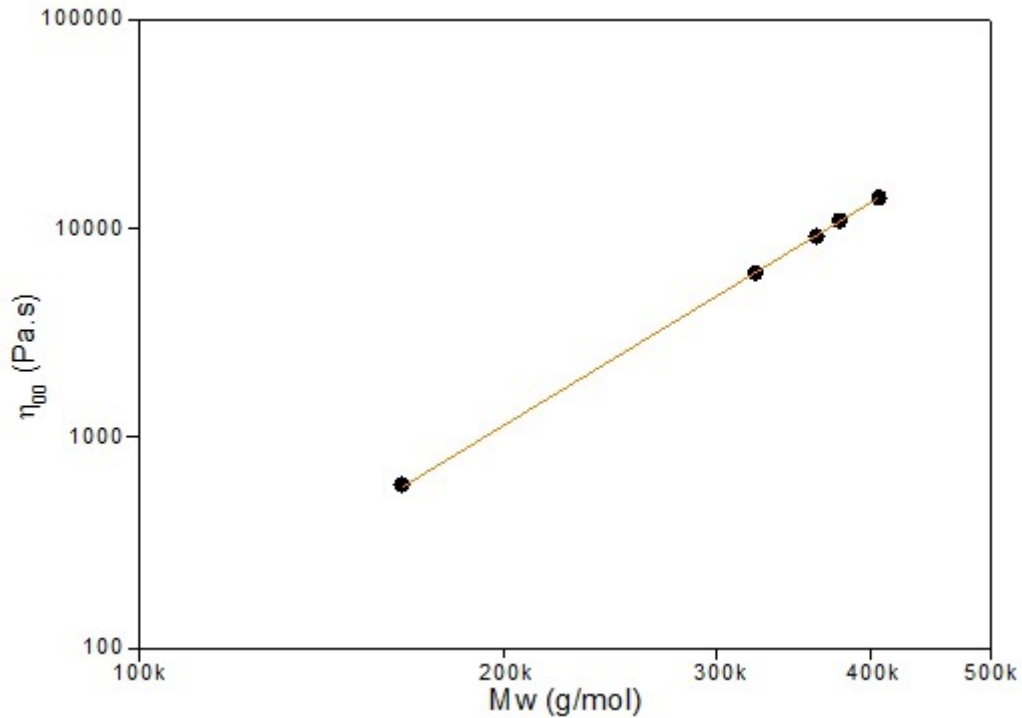


Figura 3.20: Parâmetro  $\eta_{00}$  - Modelo Cross

Assim como no caso do parâmetro  $\lambda$ , foi utilizada a ferramenta de ajuste de curvas no programa *OriginPro 8* para obter a função  $\eta_{00}(M_w)$ , que pode ser dada, respectivamente, nas formas exponencial e linear:

$$\eta_{00}(M_w) = 2,2 \times 10^{-16} M_w^{3,5337} \quad (3.3.7)$$

$$\log \eta_{00} = -15,6 + 3,5337 \log M_w \quad (3.3.8)$$

Com os parâmetros  $m$ ,  $\lambda$ ,  $\eta_{00}$ ,  $\alpha$  e  $T_{ref}$  determinados, pode-se escrever, finalmente, o modelo Cross desenvolvido com base nos *grades* analisados:

$$\eta(\omega, T, M_w) = \frac{2,2 \times 10^{-16} M_w^{3,5337}}{1 + [4,7 \times 10^{-25} M_w^{4,3294} \omega]^{0,77}} \exp \left[ 856,6 \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{198,7} \right) \right] \quad (3.3.9)$$

É importante observar que, como as curvas de escoamento foram obtidas como função da frequência angular do reômetro, a viscosidade obtida também é função dessa variável, ao invés da taxa de cisalhamento, como representado usualmente. Para obter a viscosidade como função da taxa de cisalhamento, deve-se recorrer à Equação (3.1.10), chegando-se na seguinte expressão para a viscosidade:

$$\eta(\dot{\gamma}, T, M_w) = \frac{2,2 \times 10^{-16} M_w^{3,5337}}{1 + [3,76 \times 10^{-26} M_w^{4,3294} \dot{\gamma}]^{0,77}} \exp \left[ 856,6 \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{198,7} \right) \right] \quad (3.3.10)$$

### 3.4 Modelo *Power Law* Modificado

Assim como feito para o modelo Cross, foram propostos ajustes das curvas reológicas dos distintos *grades* de PP nas diferentes temperaturas, com auxílio do modelo *Power Law* Modificado. As Figuras 3.21 a 3.25 apresentam representações gráficas da qualidade dos ajustes obtidos, em comparação com os dados experimentais. As Tabelas 3.17 a 3.21 apresentam os valores dos parâmetros estimados e os respectivos intervalos de confiança, mostrando que o procedimento de estimação foi efetuado de forma apropriada e que os parâmetros são significativos.

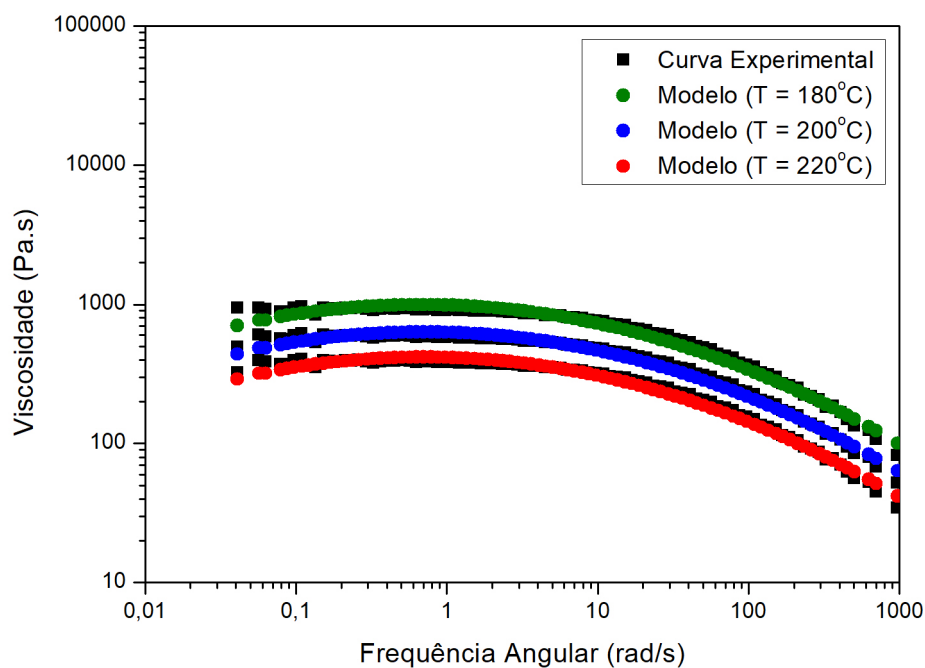


Figura 3.21: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H125;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.17: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H125;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$A (\times 10^3) (Pa.s^2)$	0,990	0,962	1,019	0,630	0,611	0,648	0,415	0,404	0,427
$b$	-0,033	-0,049	-0,016	-0,030	-0,044	-0,014	-0,030	-0,044	-0,015
$c$	-0,043	-0,046	-0,040	-0,044	-0,047	-0,041	-0,044	-0,047	-0,041

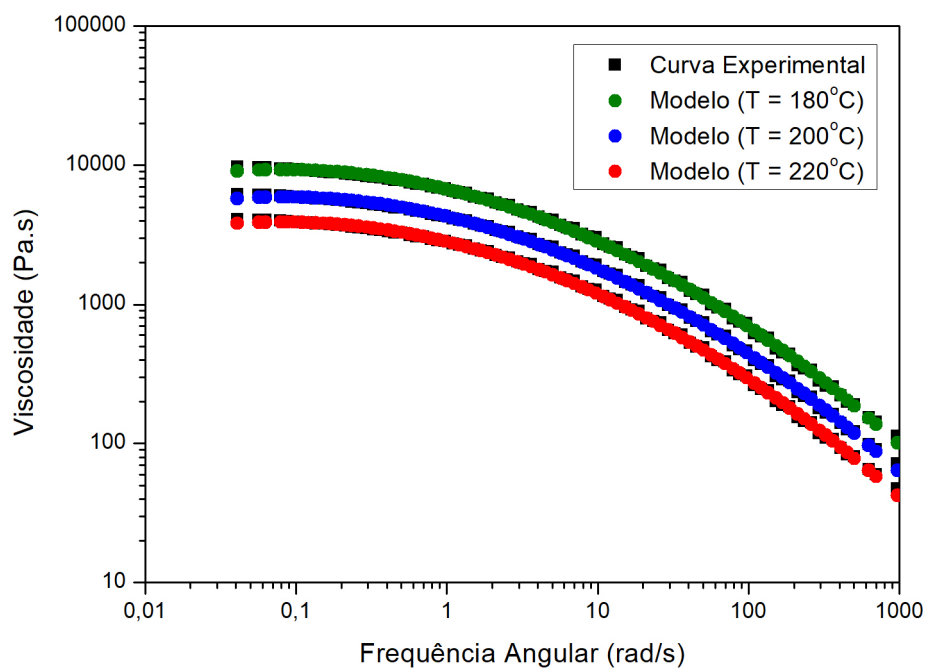


Figura 3.22: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H503HS;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.18: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H503HS;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$A (\times 10^3) (Pa.s^2)$	6,722	6,641	6,801	4,277	4,226	4,327	2,824	2,792	2,857
$b$	-0,257	-0,263	-0,252	-0,252	-0,262	-0,252	-0,257	-0,262	-0,251
$c$	-0,051	-0,052	-0,049	-0,051	-0,052	-0,050	-0,051	-0,052	-0,050



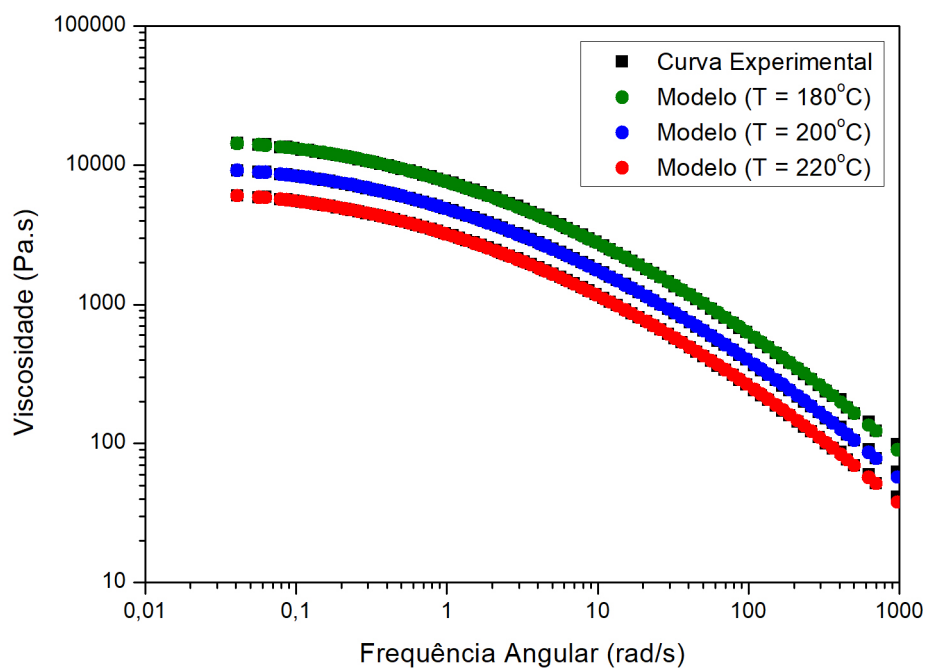


Figura 3.23: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H503;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.19: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H503;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$A (\times 10^3) (Pa.s^2)$	7,605	7,564	7,650	4,839	4,821	4,868	3,195	3,176	3,214
$b$	-0,340	-0,342	-0,337	-0,340	-0,343	-0,337	-0,340	-0,343	-0,337
$c$	-0,044	-0,044	-0,043	-0,044	-0,044	-0,043	-0,044	-0,044	-0,043

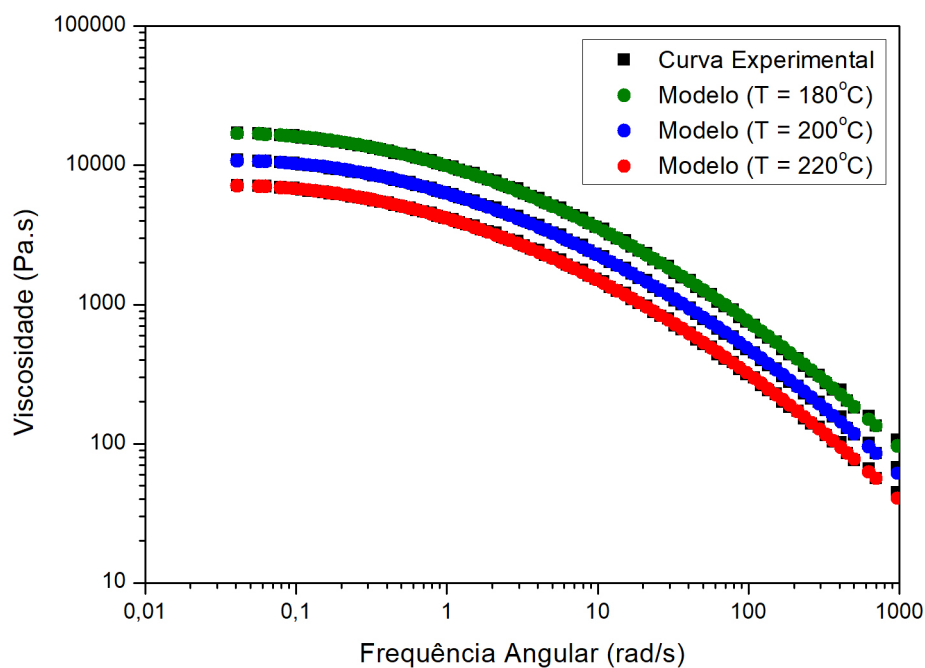


Figura 3.24: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H614 RJ;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.20: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H614 RJ;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$A (\times 10^3) (Pa.s^2)$	9,871	9,778	9,965	6,282	6,221	6,343	4,147	4,107	4,186
$b$	-0,328	-0,332	-0,324	-0,328	-0,332	-0,324	-0,328	-0,332	-0,324
$c$	-0,050	-0,050	-0,049	-0,050	-0,050	-0,049	-0,050	-0,051	-0,049

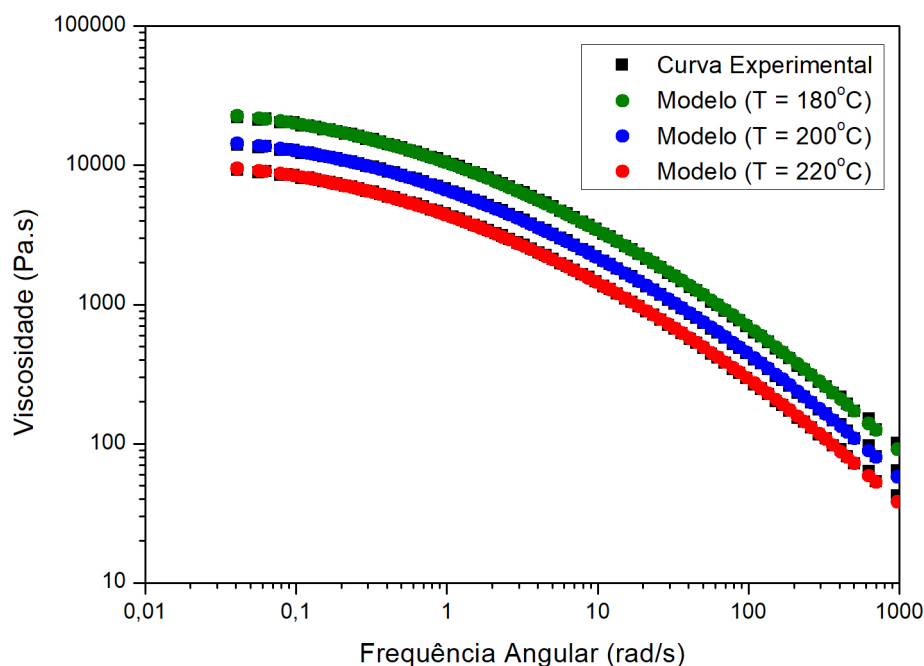


Figura 3.25: Ajuste obtido com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H614 SP;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Tabela 3.21: Parâmetros estimados com o modelo *Power Law* Modificado (*Grade* H614 SP;  $T = 180^{\circ}C, 200^{\circ}C, 220^{\circ}C$ )

Parâmetros	180°C			200°C			220°C		
	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS	Valor	LI	LS
$A (\times 10^4) (Pa.s^2)$	1,042	1,033	1,049	6,628	6,576	6,679	4,376	4,340	4,410
$b$	-0,383	-0,387	-0,380	-0,383	-0,387	-0,380	-0,383	-0,387	-0,380
$c$	-0,044	-0,045	-0,043	-0,044	-0,045	-0,043	-0,044	-0,045	-0,043

Com base na análise das Figuras 3.21 a 3.25 e no comportamento dos parâmetros  $A$ ,  $b$  e  $c$  mostrados nas Tabelas 3.17 a 3.21, percebe-se que os parâmetros obtidos são similares aos parâmetros do modelo Cross,  $\eta_0$ ,  $\lambda$  e  $m$ , respectivamente. Dessa forma, podem ser construídos os gráficos mostrados nas Figuras 3.26, 3.27 e 3.28.

A Figura 3.26 mostra que o parâmetro  $c$  não depende da temperatura do escoamento, mas depende, a princípio, da massa molar média do *grade* considerado, como o parâmetro  $m$  do modelo Cross. Analogamente, como a dependência com a massa molar média não é muito significativa, propõe-se que:

$$c \approx -0,0475 \quad (3.4.1)$$

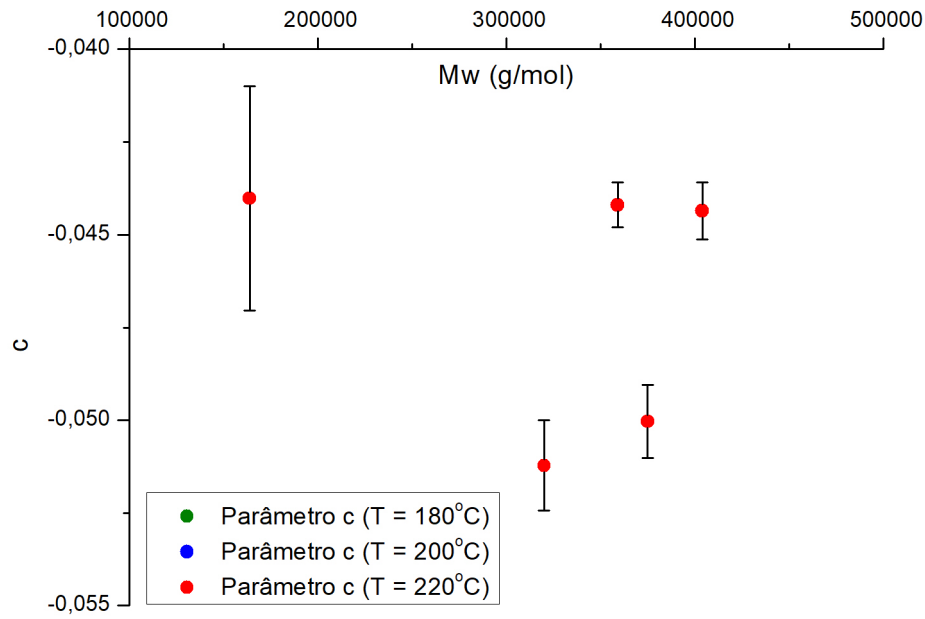


Figura 3.26: Variação do parâmetro  $c$  do modelo *Power Law* Modificado com a temperatura e massa molar do *grade* de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem.

A Figura 3.27 mostra que o parâmetro  $b$  não depende da temperatura do escoamento, mas depende da massa molar média do *grade* de PP considerado, assim como o parâmetro  $\lambda$  do modelo Cross, com forma funcional dada como  $b = b(M_w)$ . O ajuste da curva também foi feito no *OriginPro 8*, obtendo-se a seguinte função:

$$b(M_w) = -1,5 \times 10^{-6} M_w + 0,2 \quad (3.4.2)$$

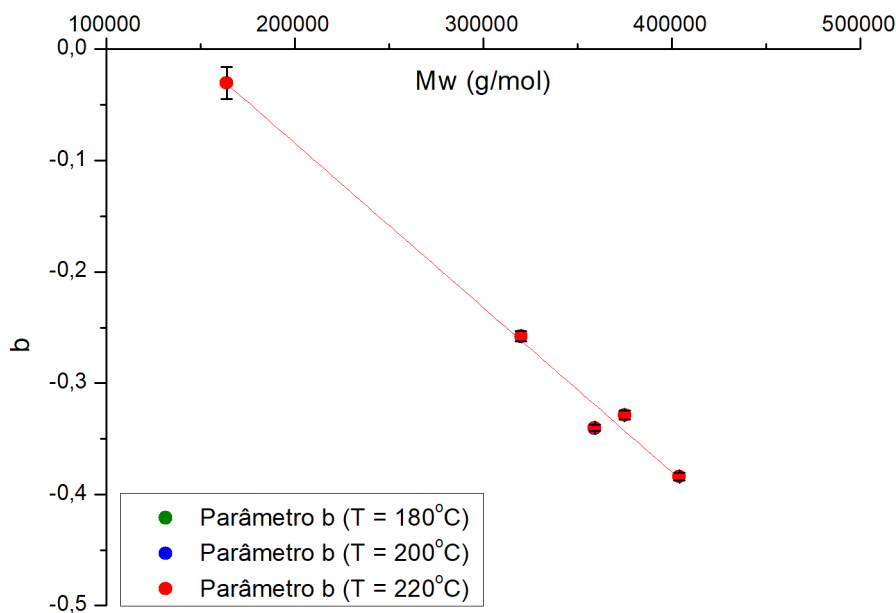


Figura 3.27: Variação do parâmetro  $b$  do modelo *Power Law* Modificado com a temperatura e massa molar do *grade* de PP. Os valores obtidos nas distintas temperaturas se sobrepõem.

A Figura 3.28 mostra que o parâmetro  $A$  depende da temperatura do escoamento e da massa molar média do *grade* de PP considerado, assim como o parâmetro  $\eta_0$  do modelo Cross, de modo que a forma funcional genérica do parâmetro é  $A = A(T, M_w)$ . Comparando as Figuras 3.18 e 3.28, observa-se que a primeira apresenta uma forma mais suave que a segunda, que parece apresentar uma espécie de descontinuidade entre os dois últimos e os dois penúltimos pontos. Assim, como o modelo Cross apresentado na presente dissertação ter sido obtido a partir do modelo Cross clássico, presente nos *softwares* comerciais mais usados, diferentemente do modelo *Power Law* Modificado, que requer implementação, parece haver motivos práticos concretos para escolher o uso do modelo Cross, em detrimento do uso do modelo *Power Law* modificado.

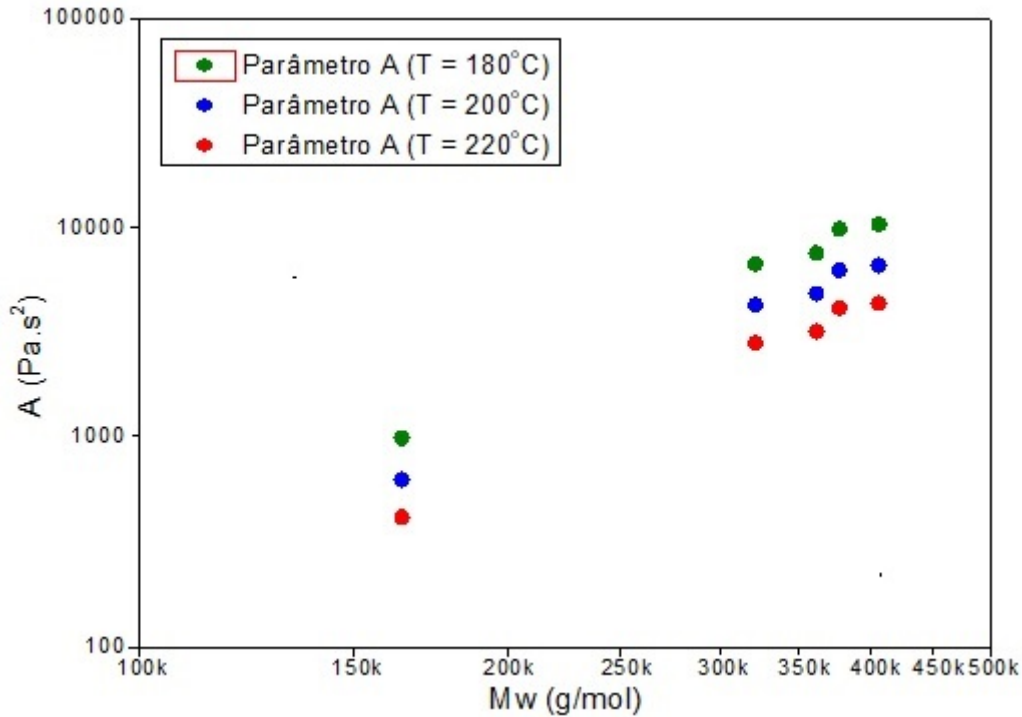


Figura 3.28: Variação do parâmetro  $A$  do modelo *Power Law* Modificado com a temperatura e massa molar do *grade* de PP.

A introdução da temperatura no modelo *Power Law* Modificado pode ser feita de modo similar à anterior, utilizando uma reparametrização da equação clássica de Arrhenius. Como a função  $\eta(T)$  é a mesma para os dois modelos, o gráfico da correlação com a temperatura de referência é o mesmo mostrado na Figura 3.19. Por outro lado, a função que depende da massa molar é diferente para cada modelo reológico, de forma que a função proposta para  $A$  pode ser dada por:

$$A(T, M_w) = A_0(M_w) \exp \left[ \alpha \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (3.4.3)$$

Como os parâmetros de cada modelo são diferentes, a Tabela 3.22 pode ser obtida, permitindo construir o gráfico do parâmetro  $A_0(M_w)$  como função dos *grades* disponíveis, como mostrado na Figura 3.29. Nota-se que  $\alpha$  é o mesmo para os dois modelos, embora os limites inferior e superior sejam diferentes.

Tabela 3.22: Parâmetros  $\eta_{00}$ ,  $\alpha$  e  $T_{ref}$  da função  $A_0(T, M_w)$

<i>Grade</i>	$\eta_{00}$ (Pa.s)	LI	LS	$\alpha$ ( $^{\circ}C$ )	LI	LS	$T_{ref}$ ( $^{\circ}C$ )
H125	638,8	629,6	644,0	856,8	829,8	883,9	198,7
H503HS	4307,2	4285,5	4328,6		844,9	868,8	
H503	4880,1	4866,1	4894,1		850,0	863,7	
H614 RJ	6342,6	6317,4	6367,8		847,5	866,3	
H614 SP	6676,8	6676,8	6676,8		856,8	856,8	

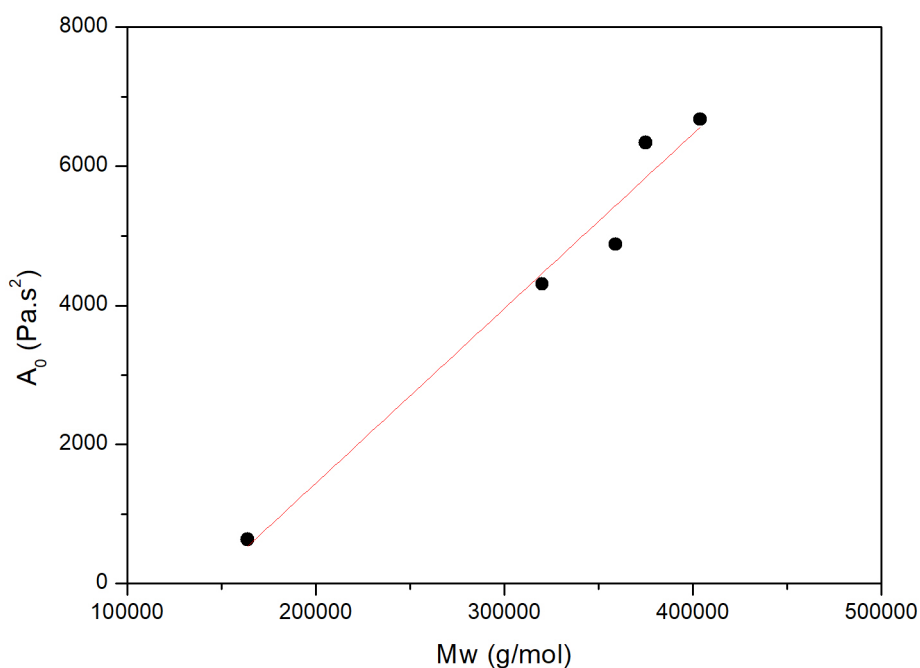


Figura 3.29: Variação do parâmetro  $A_0$  do modelo *Power Law* Modificado com a massa molar do *grade* de PP.

Assim como no caso do parâmetro  $b$ , foi utilizada a ferramenta de ajuste de curva do *OriginPro 8* para obter a função  $A_0(M_w)$ , que pode ser dada na forma

$$A_0(M_w) = 1,19 \times 10^{-9} M_w^{2,2765} \quad (3.4.4)$$

Com os parâmetros  $c$ ,  $b$ ,  $A_0$ ,  $\alpha$  e  $T_{ref}$  determinados, pode-se escrever, finalmente, o modelo *Power Law* Modificado desenvolvido com base nos *grades* analisados:

$$\eta(\omega, T, M_w) = 1,19 \times 10^{-9} M_w^{2,2765} \omega^{[-1,5 \times 10^{-6} M_w + 0,2 - 0,0475 \ln \omega]} \exp \left[ \alpha \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{198,7} \right) \right] \quad (3.4.5)$$

É importante observar que, como as curvas de escoamento foram fornecidas em função da frequência angular do reômetro, a viscosidade obtida também é função dessa variável, ao invés da taxa de cisalhamento, como é apresentada usualmente. Para obter a viscosidade como função da taxa de cisalhamento, deve-se recorrer à Equação (3.1.10), chega-se na seguinte expressão para a viscosidade:

$$\eta(\dot{\gamma}, T, M_w) = 1,19 \times 10^{-9} M_w^{2,2765} (0,08\dot{\gamma})^{[-1,5 \times 10^{-6} M_w + 0,2 - 0,0475 \ln (0,08\dot{\gamma})]} \exp \left[ 856,6 \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{198,7} \right) \right] \quad (3.4.6)$$

Deve-se observar que o modelo Cross, Equação (3.3.10), é de fácil utilização em *softwares* comerciais. Por outro lado, o modelo *Power Law* Modificado, Equação (3.4.6), requer implementação computacional independente.

### 3.5 Comentários Adicionais

Este capítulo apresentou o desenvolvimento de dois modelos reológicos multivariáveis, sendo um baseado no clássico modelo Cross e outro de natureza empírica baseado no modelo *Power Law*, com auxílio da ferramenta de estimação de parâmetros utilizando o pacote computacional ESTIMA, que usa uma função-objetivo de Mínimos Quadrados Ponderados e cujo método de resolução é baseado na técnica PSO acoplada com um procedimento de Gauss-Newton, como descrito na Seção 2.3.6 do Capítulo 2.

É importante enfatizar que não foram encontrados trabalhos na literatura, sobre PP ou qualquer outro polímero, que apresentem modelos de viscosidade que considerem mais de duas variáveis simultaneamente. Portanto, o presente trabalho desenvolveu modelos reológicos presumidamente inéditos dentro do universo das pesquisas realizadas, que abrangem variáveis impactantes no comportamento reológico do PP, tais como, temperatura, taxa de cisalhamento e massa molar média da resina de PP.



Inicialmente foram realizados ajustes para dois *grades* de PP na temperatura de  $180^{\circ}\text{C}$ , com o objetivo de identificar quais dos modelos reológicos analisados poderiam melhor se adequar às curvas experimentais de viscosidade.

Com base nos modelos Cross e *Power Law* Modificado, ambos contendo três parâmetros, foi possível concluir que um dos parâmetros não depende das variáveis analisadas; que outro parâmetro depende apenas da massa molar média do polímero; e que o terceiro parâmetro depende tanto da massa molar média do polímero, quanto da temperatura do escoamento. Portanto, cada parâmetro dos modelos reológicos é responsável pela introdução de uma determinada característica da curva de escoamento.

A escolha da função de Arrhenius na forma reparametrizada foi importante para representar a dependência da viscosidade com a temperatura, resultando em um parâmetro  $P$ , cuja forma funcional é dada por  $P(T, M_w) = f(M_w)f(T)$ . Com base nessa função e usando a relação entre frequência angular e taxa de cisalhamento, foi possível obter a viscosidade na forma funcional desejada para os dois modelos reológicos analisados:  $\eta(\dot{\gamma}, T, M_w)$ .

Ressalta-se a importância do desenvolvimento de um modelo reológico multi-variável, para tornar possível a simulação fluidodinâmica do processo de extrusão em condições mais compatíveis com a realidade do processo industrial.

# Capítulo 4

## Metodologia da Modelagem Matemática

### 4.1 Balanço de Massa e Energia

O balanço de massa em um volume de controle que engloba um tanque  $i$ , como mostrado na Figura 2.19, pode ser escrito como

$$\frac{dm_i}{dt} = f_{i-1} + b_{i+1} - f_i - b_i \quad (4.1.1)$$

Considerando que a dinâmica associada ao balanço de massa global é rápida, tendo em vista os pequenos volumes das seções da extrusora, o tempo de residência usualmente pequeno na extrusora e as variações pouco expressivas de viscosidade do fundido ao longo da extrusora, a hipótese de estado estacionário pode ser utilizada. Assim, de acordo com essa hipótese e substituindo  $b_i$ , com o auxílio da Equação (2.3.1), na Equação (4.1.1), chega-se em

$$(1 + \alpha_i)f_i - \alpha_{i+1}f_{i+1} - f_{i-1} = 0 \quad (4.1.2)$$

Essa equação pode ser representada na forma de um sistema matricial, como:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 + \alpha_1 & -\alpha_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 1 + \alpha_2 & -\alpha_3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 + \alpha_3 & -\alpha_4 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & -1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -\alpha_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 1 + \alpha_{N-1} \end{bmatrix}}_{C(N-1,N-1)} \underbrace{\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{N-1} \end{bmatrix}}_{f(N-1,1)} = \underbrace{\begin{bmatrix} f_0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_N f_0 \end{bmatrix}}_{D(N-1,1)} \quad (4.1.3)$$

A resolução do sistema de Equações 4.1.3 fornece os valores das vazões mássicas no sentido do escoamento,  $f_i$ , e no sentido contrário,  $b_i$ . Deve-se observar que a razão de *backflow* não é constante ao longo de toda a extrusora, já que o equipamento é constituído por regiões que apresentam diferentes graus de mistura. Assim, foram considerados três valores diferentes desse parâmetro, um para cada seção hipotética:  $\alpha_{feed} = 0$ ,  $\alpha_{metl} = 0,1$  e  $\alpha_{mix} = 0,5$ , de forma que os índices *feed*, *melt* e *mix* indicam, respectivamente, zona de alimentação, onde não há contrafluxo; zona de polímero fundido, onde existe um certo grau de contrafluxo, estipulado em 10%; e zona de mistura, onde existe um maior vazão de polímero no sentido contrário ao escoamento, sendo estipulado 50% de *backflow*. Deve ser feita uma observação quanto aos valores de *backflow* estipulados: como não foram encontrados trabalhos na literatura ou informações de processos industriais quanto ao grau de mistura de cada zona de uma extrusora de forma quantitativa, os parâmetros foram estipulados de maneira *ad hoc* para fins de ilustração do comportamento do equipamento, não havendo qualquer motivo prático que impeça a definição e uso de perfis distintos desse parâmetro para avaliar o desempenho de sistemas reais.

Assim como o balanço de massa, o balanço de energia em um tanque  $i$  pode ser escrito como

$$m_i c_{p_i} \frac{dT_i}{dt} = f_{i-1} c_{p_{i-1}} (T_{i-1} - T_i) + b_{i+1} c_{p_{i+1}} (T_{i+1} - T_i) + \Phi_i(\dot{\gamma}_i, T_i, \alpha_i, f_{i-1}, b_{i+1}) - hA_b(T_i - T_{c_i}) \quad (4.1.4)$$

Deve-se observar que a temperatura do parafuso não está presente na equação do balanço de energia, sendo que a transferência de calor ocorre apenas entre o polímero fundido e o barril. O modelo térmico assim desenvolvido teve como objetivo representar de forma simplificada a variação de temperatura em um processo de extrusão.

O termo de dissipação viscosa em todo o volume  $V_i$  da extrusora, considerando um escoamento unidimensional, pode ser escrito da seguinte forma simplificada com base em WHITE (2006):

$$\Phi_i = \eta(\dot{\gamma}_i, T_i, M_w) \dot{\gamma}_i^2 V_i \quad (4.1.5)$$

Na Equação (4.1.4),  $h$  é o coeficiente de transferência de calor,  $A_b$  é a área do barril onde ocorre troca térmica com a camisa, mantida na temperatura  $T_{c_i}$ , e  $\Phi_i$  é o termo de dissipação viscosa, que tem fundamental importância para conduzir as análises de escoamento de polímeros em extrusoras.

O coeficiente de transferência de calor,  $h$ , foi descrito na forma proposta no trabalho de EITZLMAYR *et al.* (2014), com o auxílio da seguinte correlação:

$$h = \frac{k}{2R_s} \left[ 26,8 \left( \frac{4\omega R_s^2 \rho}{\mu} \right)^{0,838} \left( \frac{\mu c_p}{k} \right)^{0,38} \right] \quad (4.1.6)$$

Nessa correlação,  $R_s$  é o raio do parafuso,  $\omega$  é a velocidade de rotação do parafuso,  $k$  é a condutividade térmica do polímero,  $c_p$  é o calor específico do polímero a pressão constante e  $\mu$  é a viscosidade do polímero, escrita na forma da função obtida a partir do modelo Cross,  $\eta(\dot{\gamma}, T, M_w)$ .

O termo de dissipação viscosa deve ser separado em um termo tangencial e um termo axial, devido aos movimentos do parafuso responsáveis pela mistura radial do polímero e movimentação axial da entrada (zona de alimentação) até a saída (molde) da extrusora.

A proposição do termo de dissipação viscosa tangencial considera a taxa de cisalhamento como uma razão entre duas grandezas finitas na forma:

$$\dot{\gamma}_{ji} = \frac{dv_i}{dx_j} \approx \frac{\Delta v_i}{\Delta x_j} \quad (4.1.7)$$

Na região do espaçamento entre a rosca do parafuso e o barril, chamado em inglês de *clearance*, as seguintes aproximações podem ser feitas:  $\Delta v_i \approx \omega R_s$  e  $\Delta x_j \approx R_b - R_s$ . Assim, a taxa de cisalhamento causada pela rotação do parafuso pode ser aproximada por

$$\dot{\gamma}_{tangencial} = \frac{\omega R_s}{R_b - R_s} \quad (4.1.8)$$

Nessa equação,  $R_b$  é o raio do barril. Assim, de acordo com a Equação (4.1.5), o

termo de dissipação viscosa tangencial, incluindo uma constante empírica de ajuste e correção  $C_1$ , pode ser dado por:

$$\Phi_{tangencial_i} = C_1 \eta(\dot{\gamma}_i, T_i, M_w) \left[ \frac{\omega R_s}{R_b - R_s} \right]^2 V_i \quad (4.1.9)$$

A proposição do termo de dissipação viscosa axial pode ser feita com base em duas considerações principais: 1) perfil de velocidade parabólico genérico na região entre o barril e o parafuso; e 2) velocidade nula nas superfícies do barril e do parafuso. Essas hipóteses têm o objetivo de simplificar a obtenção da taxa de cisalhamento, visto que hipóteses mais rigorosas são consideradas nos estudos de simulação usando ferramentas de CFD. Com base nessas hipóteses, o perfil de velocidades genérico, com as devidas condições de contorno, pode ser dado por:

$$\begin{aligned} v_z(r) &= A + Br + Cr^2 \\ v_z(R_b) &= 0 \\ v_z(R_s) &= 0 \\ v_z\left(\bar{R} = \frac{R_b + R_s}{2}\right) &= V_{max} \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Na terceira condição de contorno da Equação (4.1.10),  $V_{max}$  é a velocidade máxima do perfil parabólico, que pode ser calculada com a Equação (4.1.12). Por meio de manipulações algébricas, obtém-se o perfil de velocidades do polímero na extrusora, que pode ser expresso por:

$$v_z(r) = V_{max} \left[ 1 - \left( \frac{2r - (R_b + R_s)}{R_b - R_s} \right)^2 \right] \quad (4.1.11)$$

A velocidade máxima pode ser calculada a partir da forma integral da vazão mássica, na forma:

$$\dot{m} = \int_{R_s}^{R_b} \rho v_z(r) 2\pi r dr \quad (4.1.12)$$

Resolvendo a integral e isolando  $V_{max}$ , chega-se a:

$$V_{max} = \frac{3\dot{m}}{2\pi\rho(R_b^2 - R_s^2)} \quad (4.1.13)$$

Assim, o perfil de velocidades pode ser escrito, como função da densidade do

polímero, dos raios do parafuso e do barril e da vazão mássica, como

$$v_z(r) = \frac{3\dot{m}}{2\pi\rho(R_b^2 - R_s^2)} \left[ 1 - \left( \frac{2r - (R_b + R_s)}{R_b - R_s} \right)^2 \right] \quad (4.1.14)$$

Com o perfil de velocidades, a taxa de cisalhamento pode ser obtida por derivação em relação ao raio:

$$\dot{\gamma}(r) = \frac{dv_z(r)}{dr} = \frac{-4V_{max}}{R_b - R_s} \left[ \frac{2r - (R_b + R_s)}{R_b - R_s} \right] \quad (4.1.15)$$

Como  $\dot{\gamma}(R_b) = -\dot{\gamma}(R_s)$ , a taxa de cisalhamento axial pode ser escrita como

$$|\dot{\gamma}_{axial}| = \frac{4V_{max}}{R_b - R_s} = \frac{6\dot{m}}{\pi\rho(R_b + R_s)(R_b - R_s)^2} \quad (4.1.16)$$

Portanto, o termo de dissipação viscosa axial, incluindo uma constante de ajuste e correção  $C_2$ , pode ser obtido:

$$\Phi_{axial_i} = C_2\eta(\dot{\gamma}_i, T_i, M_w) \left[ \frac{6\dot{m}}{\pi\rho(R_b + R_s)(R_b - R_s)^2} \right]^2 V_i \quad (4.1.17)$$

## 4.2 Metodologia do Estudo de CFD

O estudo de CFD desse trabalho foi realizado em um *cluster* equipado com 2 processadores Intel Haswell 8-Cores E5-2640V3 2.6GHz (16 cores no total), 64GB RAM (8x 8GB DDR4 DIMM 2133MHz) e 1 HD 1TB SATA 7.2K rpm 6Gb/s 3.5”.

Inicialmente foram conduzidos alguns tutoriais recomendados no Guia de Tutoriais do *Polyflow*, ANSYS (2019). A condução desses tutoriais teve como objetivo a ambientação no *Workbench*, que é o ambiente de trabalho do ANSYS. Dentre os principais passos para esse desenvolvimento, incluem-se a definição de domínios e condições de contorno, além das ferramentas oferecidas pelo ANSYS para tratamento de dados na etapa de pós-processamento.

Os trabalhos disponíveis na literatura sobre simulação de extrusoras utilizando técnicas de CFD não reproduzem o equipamento inteiro porque, mesmo no caso das pequenas extrusoras, apresentam seções diferentes e de grande complexidade, de modo que tornam a simulação computacional quase sempre inviável. Por esse motivo, todos os artigos encontrados durante a pesquisa bibliográfica descrevem estudos sobre pequenas seções de extrusoras de laboratório. Nesses trabalhos, geralmente a

validação é baseada em aparato experimental. Dessa forma, como a presente dissertação não envolveu qualquer trabalho experimental e como não foi possível obter dados industriais relativos à geometria de extrusoras industriais reais, a referência principal usada para a condução do estudo de CFD apresentado foi o artigo de WANG (2013), usado também com o objetivo de validar a simulação computacional desenvolvida no presente trabalho. O parafuso usado por WANG (2013), mostrado na Figura 4.1, foi representado no pacote CAD *SpaceClaim* para ser utilizado no estudo de CFD desta dissertação e suas medidas principais são as seguintes:

- Comprimento =  $60\text{ mm}$
- Diâmetro do parafuso =  $17\text{ mm}$
- Diâmetro interno do barril =  $20,2\text{ mm}$
- Altura da rosca (*flight*) =  $1,2\text{ mm}$
- Distância entre a superfície do parafuso e o barril =  $1,6\text{ mm}$
- Distância entre a rosca e o barril =  $0,4\text{ mm}$

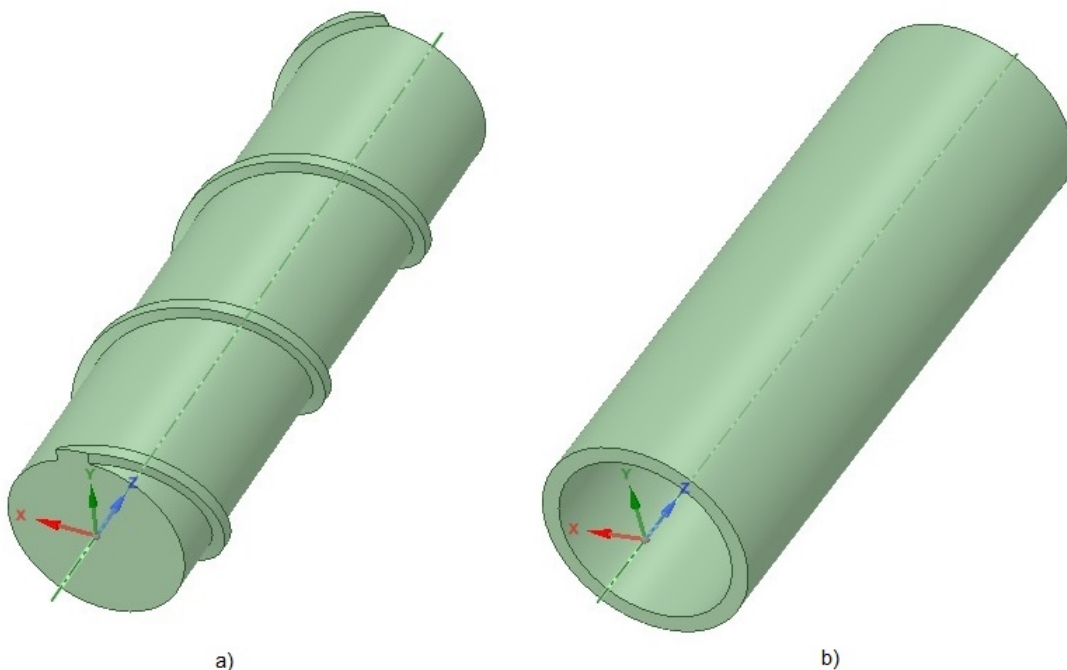


Figura 4.1: Sistema utilizado na simulação computacional com base no artigo de WANG (2013), formado por a) domínio do parafuso (sólido) e b) domínio do fluido envolvendo o parafuso (líquido).

Como pode ser observado na Figura 4.1, foram construídas duas geometrias, sendo uma representando o corpo do parafuso (superfície e rosca) e outra representando o domínio do fluido; ou seja, o local por onde o fluido escoava durante a passagem pelo parafuso. A superfície externa da geometria na Figura 4.1b é a superfície interna do barril, pois o fluido está confinado entre o parafuso e o barril. Além disso, os eixos podem ser identificados como axial (eixo  $Z$ ) e radial (eixos  $X$  e  $Y$ ), sendo o eixo  $Y$  usado como referência para a análise dos resultados obtidos.

A Figura 4.2 mostra um desenho em duas dimensões das geometrias da Figura 4.1 superpostas. Percebe-se que o corpo do parafuso, como mostrado na Figura 4.1a, é representado em azul claro, enquanto o domínio do fluido, como mostrado na Figura 4.1b, tem seus contornos (superfícies interna e externa) representados pelas circunferências em preto. Na Figura 4.2 também estão indicadas algumas medidas importantes, especialmente os pontos  $Y = 8,5 \text{ mm}$  e  $Y = 9,9 \text{ mm}$  em que foram feitas algumas visualizações, como discutido no próximo capítulo.

- Em  $Y = 8,5 \text{ mm}$  a partir da origem, observa-se a superfície do parafuso, como mostrado na Figura 4.1a;
- Em  $Y = 9,7 \text{ mm}$  a partir da origem; ou seja,  $1,2 \text{ mm}$  acima do ponto  $Y = 8,5 \text{ mm}$ , observa-se a altura da rosca;
- Em  $Y = 10,1 \text{ mm}$  a partir da origem, ou seja,  $0,4 \text{ mm}$  acima da rosca, observa-se a superfície externa do domínio de fluido, como mostrado na Figura 4.1b;
- Em  $Y = 9,9 \text{ mm}$  observa-se a distância média entre a rosca e o barril a partir da origem.



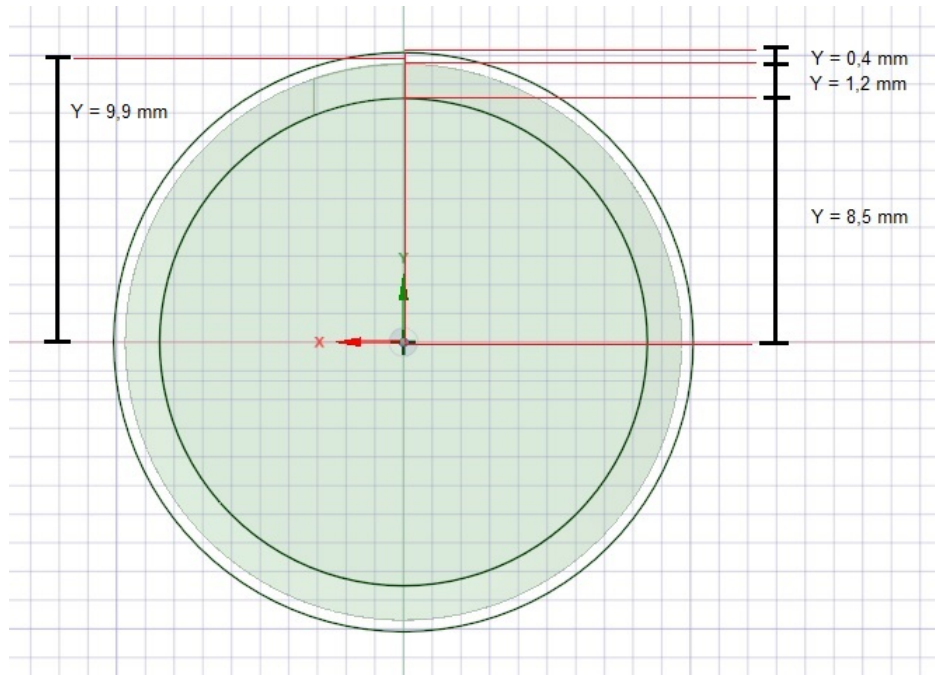


Figura 4.2: Algumas medidas importantes do parafuso utilizado para conduzir o estudo de CFD.

Percebe-se que a união das duas geometrias, necessária para a condução das simulações, faz com que a rosca do parafuso ocupe o mesmo espaço do domínio do fluido. Para resolver esse problema, fez-se uso da bem conhecida técnica de superposição de malhas. Essa técnica é descrita detalhadamente nos trabalhos de WOO *et al.* (2003), de NAKASUMI *et al.* (2008), de SELLITTO *et al.* (2014) e de GIGLIOTTI e PINHO (2015).

De modo a contextualizar o tema, descreve-se brevemente a representação da técnica MST usada na presente dissertação, na forma descrita no artigo de GIGLIOTTI e PINHO (2015) e mostrada na Figura 4.3, onde  $\Omega$  é o volume total ocupado por um determinado corpo deformável,  $\hat{\Omega}_A$  é o volume ocupado pela região  $A$  do corpo,  $\hat{\Omega}_B$  é o volume ocupado pela região  $B$  do corpo,  $\Omega_S$  é o volume ocupado pela região superposta entre as regiões  $A$  e  $B$ ,  $\Gamma$  é o contorno desse corpo e  $\vec{X}$  é o vetor posição do ponto  $P$  no sistema de coordenadas cartesianas.

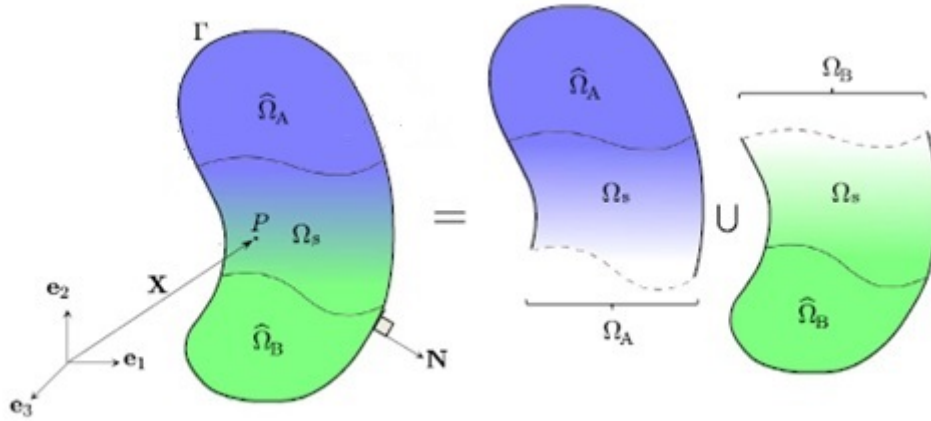


Figura 4.3: Representação esquemática da Técnica de Superposição de Malha (MST). Figura adaptada de GIGLIOTTI e PINHO (2015).

Em problemas em que a construção da geometria que representa a região de escoamento de fluido é complexa, a técnica de superposição de malha pode ser usada para contornar esse problema com base na criação de uma geometria definida pelo volume  $\Omega$  formada pela superposição entre os corpos definidos pelos volumes  $\Omega_A$  e  $\Omega_B$ . As principais vantagens do uso dessa técnica são a geração de malha de forma simplificada e não ser necessário o uso de ferramentas de deformação de malha que exigem formulações mais complexas e, portanto, um tempo de simulação maior. Por outro lado, a limitação mais relevante é que a velocidade nas vizinhanças de partes móveis não é bem resolvida (ANSYS, 2017a).

Para validar a convergência das malhas, os resultados (perfis de taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade e pressão) foram comparados com os dados apresentados no artigo de WANG (2013).

Após a validação da simulação do escoamento isotérmico, foi feita a análise considerando o sistema não-isotérmico. Esse tipo de simulação demanda configurações relacionadas à temperatura como, por exemplo, as condições de contorno dessa variável nas respectivas superfícies de controle da geometria em estudo:

- *Inlet*:  $T = 180^{\circ}C$  (simulação "não-isotérmico aq") e  $T = 200^{\circ}C$  (simulação "não-isotérmico resf")
- *InnerFluid*: fluxo térmico nulo
- *Outlet*: *outflow*
- *WallBarrel*:  $T = 200^{\circ}C$  (simulação "não-isotérmico aq") e  $T = 1800^{\circ}C$  (simulação "não-isotérmico resf")

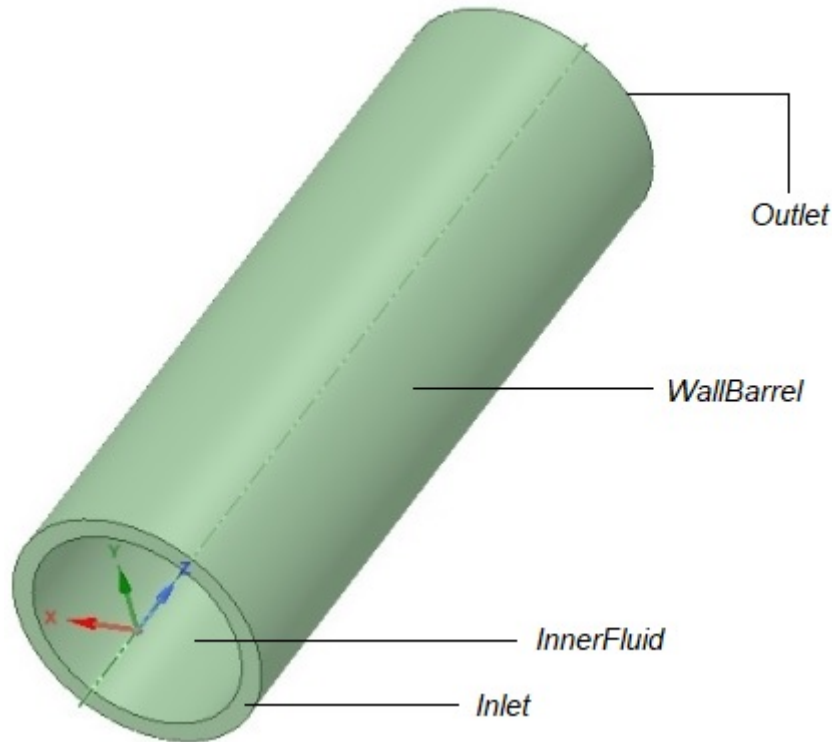


Figura 4.4: Contornos da simulação não-isotérmica.

A Figura 4.4 mostra o domínio de fluido com os respectivos contornos, com suas descrições listadas abaixo:

- *Inlet* é a entrada do polímero na extrusora;
- *InnerFluid* é a superfície interna do domínio de fluido, que se superpõe à superfície do corpo do parafuso;
- *Outlet* é a saída do polímero na extrusora;
- *WallBarrel* é a superfície externa do domínio de fluido, que pode estar superposta à superfície interna do barril, caso ele faça parte da geometria.

As temperaturas de  $180^{\circ}C$  e  $200^{\circ}C$  foram escolhidas porque são próximas às temperaturas dos barris. A escolha do fluxo térmico nulo é natural, visto que não existem fluxos de calor externos ao processo. Por fim, a configuração *outflow* indica que as variáveis na saída da extrusora devem ser calculadas pelo programa.

A condição de contorno térmica do parafuso foi definida da seguinte maneira:

- $T_{screw} = 100^{\circ}C$  (valor padrão do *Polyflow*)
- $T_{screw} = T_{barrel} = 200^{\circ}C$  (simulação "não-isotérmico aq")

- $T_{screw} = T_{barrel} = 180^{\circ}C$  (simulação "não-isotérmico resf")

As condições de contorno para as simulações não-isotérmicas conduzidas neste trabalho são resumidas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Temperaturas do barril ( $T_{barrel}$ ), da entrada ( $T_{inlet}$ ) e do parafuso ( $T_{screw}$ ) para as simulações não-isotérmicas realizadas neste trabalho

Tipo de Simulação	Simulação aq ( $T_{barrel} > T_{inlet}$ )		Simulação resf ( $T_{barrel} < T_{inlet}$ )	
	aq 1	aq 2	resf 1	resf 2
$T_{barrel}$	200	200	180	180
$T_{inlet}$	180	180	200	200
$T_{screw}$	100	200	100	180
<b>Sentido da transferência de calor (barril, entrada e parafuso, respectivamente)</b>	↓	↓	-	-
	↓↓	-	↑ e ↓↓	↑ e ↓
	-	↑	-	-

As setas apresentadas em cada caso de estudo na Tabela 4.1 representam o sentido da transferência de calor e o hífen representa as regiões (barril, entrada ou parafuso) que apenas recebem calor. As setas duplas indicam os casos em que há maior diferença de temperatura e, portanto, maior troca de calor que nos casos indicados pelas setas simples. Por exemplo, na simulação "aq 1", o polímero, inicialmente a  $180^{\circ}C$ , recebe calor do barril referente a um gradiente de  $20^{\circ}C$  de temperatura e fornece calor para o parafuso referente a um gradiente de  $80^{\circ}C$  de temperatura. O parafuso apenas recebe calor do barril e do polímero. Além disso, os termos "aq" e "resf" indicam extrusão com aquecimento e com resfriamento, respectivamente. O estudo do caso aquecido é especificado por  $T_{barrel} > T_{inlet}$ , ou seja, a temperatura é transferida do barril para o polímero ao longo do parafuso; enquanto o estudo do caso resfriado é especificado por  $T_{barrel} < T_{inlet}$ , ou seja, a direção da transferência de calor é do polímero para o barril ao longo do parafuso.

A representação não-isotérmica contempla as simulações do tipo 1 e a representação quasi-isotérmica contempla as simulações do tipo 2, caracterizadas pelo fato do polímero apresentar a mesma temperatura do barril e do parafuso.

# Capítulo 5

## Resultados e Discussão

### 5.1 Resultados da Modelagem Matemática a Parâmetros Concentrados

#### 5.1.1 Análise de Sensibilidade

A partir dos balanços de massa e energia e dos dados geométricos e de operação de uma extrusora, torna-se possível realizar uma análise de sensibilidade por meio da perturbação de algumas variáveis envolvidas, com o objetivo de verificar o comportamento de algumas variáveis frente a essas perturbações. A avaliação do comportamento da temperatura do polipropileno tem como objetivo verificar se a temperatura de degradação do polímero não é ultrapassada durante a extrusão e também obter o perfil de temperaturas ao longo do processo, pois essa medição geralmente só é feita em alguns pontos específicos da extrusora, como na entrada e na saída, por exemplo.

Em uma extrusora industrial, o auxílio de simulações utilizando um modelo matemático adequado e com um modelo reológico desenvolvido a partir dos dados experimentais dos polímeros permite o entendimento do que ocorre durante o processo de extrusão. Como não foram obtidos dados reais de construção e operação das extrusoras industriais usadas para processar os *grades* de polipropileno estudados nesta dissertação, buscaram-se informações em *sites* de fabricantes e de venda de extrusoras industriais, de modo a usar dados de um processo de extrusão industrial no modelo matemático desenvolvido. As variáveis de entrada para a simulação do modelo matemático são mostrados na Tabela 5.1 com as respectivas fontes bibliográficas, sendo que os valores destacados em negrito representam os valores padrões usados nas simulações. Por exemplo, a análise de sensibilidade da vazão de alimentação foi

feita variando os valores dessa variável (500 *kg/h*, 2000 *kg/h* e 4000 *kg/h*) com os valores padrões fixos de 300 *rpm* para a rotação do parafuso, 404 *kg/mol* para a massa molar de PP e 0,001 para a constante de correção.

Tabela 5.1: Dados de entrada do modelo matemático a parâmetros concentrados.

Variável (unidade)	Valor	Fonte
Número de tanques	500	Valor empírico
Comprimento (m)	4,32	Coperion ZSK 92 MC18 <i>Twin Screw Extruder</i>
Vazão de alimentação (kg/h)	500 <b>2000</b> 4000	- Mc Neil Akron 1400mm <i>Single Screw Extruder</i> - Ikegai <i>Two Axis Extruder</i> - Coperion <i>Laboratory Extruder</i> STS 25 MC11
Razão de <i>backflow</i>	$\alpha_{feed} = 0$ $\alpha_{melt} = 0,1$ $\alpha_{mix} = 0,5$	Valores empíricos
Temperatura de entrada ( $^{\circ}C$ )	180	Simulação CFD
Temperatura do barril ( $^{\circ}C$ )	233,5	Braskem (média)
Rotação do parafuso (rpm)	<b>300</b> 600 1000	- Ikegai <i>Two Axis Extruder</i> - Coperion <i>Laboratory Extruder</i> STS 25 MC11 - Coperion ZSK MC18 <i>Twin Screw Extruder</i>
Raio do parafuso (mm)	63,5	- Ikegai <i>Two Axis Extruder</i>
Raio do barril (mm)	64	Relação descrita por RAUWENDAAL (2014)
Massa molar PP (kg/mol)	164 <b>404</b>	Braskem
Constante de correção	0,01 <b>0,001</b> 0,0001	Valores empíricos

A Tabela 5.2 mostra as propriedades físicas comuns dos dois *grades* de polipropileno (H125 e H614 SP) usados na simulação computacional via CFD. Deve-se observar que a densidade utilizada refere-se à densidade dos *grades* no estado sólido em temperatura ambiente.

Tabela 5.2: Propriedades físicas do polipropileno usado nas simulações.

<b>Propriedade Física</b>	<b>Valor</b>	<b>Fonte</b>
Densidade ( $kg/m^3$ )	905	BRASKEM (2020)
Calor específico ( $J/molK$ )	$c_p(T) = 0,15 T + 42,956$	PRATA (2009)
Condutividade térmica ( $W/mK$ )	0,19	MAIER e CALAFUT (1998)

Utilizando os valores mostrados na Tabela 5.1, obtêm-se os gráficos mostrados nas Figuras 5.1 a 5.12. Nota-se que as simulações têm como objetivo analisar o perfil de temperaturas ao longo da extrusora, cujo comprimento foi normalizado entre 0 e 1, considerando três casos para cada simulação: inclusão apenas do termo de dissipação viscosa tangencial, inclusão apenas do termo de dissipação viscosa axial e inclusão de ambos os termos de dissipação viscosa.

As constantes de correção  $C_1$  e/ou  $C_2$ , introduzidas, respectivamente, nas Equações (4.1.9) e (4.1.17), são representadas nas Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 apenas como  $C$  para efeito de simplificação, já que os valores nas simulações foram mantidos iguais. Assim, nas simulações com o termo de dissipação viscosa tangencial, a constante é  $C_1$ , enquanto nas simulações com o termo de dissipação viscosa axial, a constante é  $C_2$ ; e nas simulações com os ambos os termos, as duas constantes estão presentes.

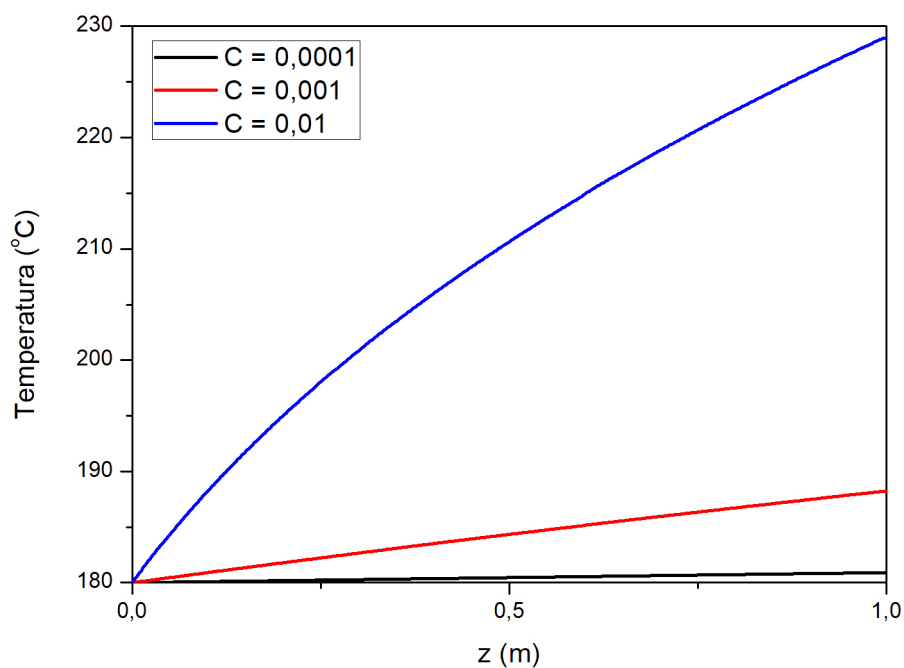


Figura 5.1: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da constante de correção - dissipação viscosa tangencial.

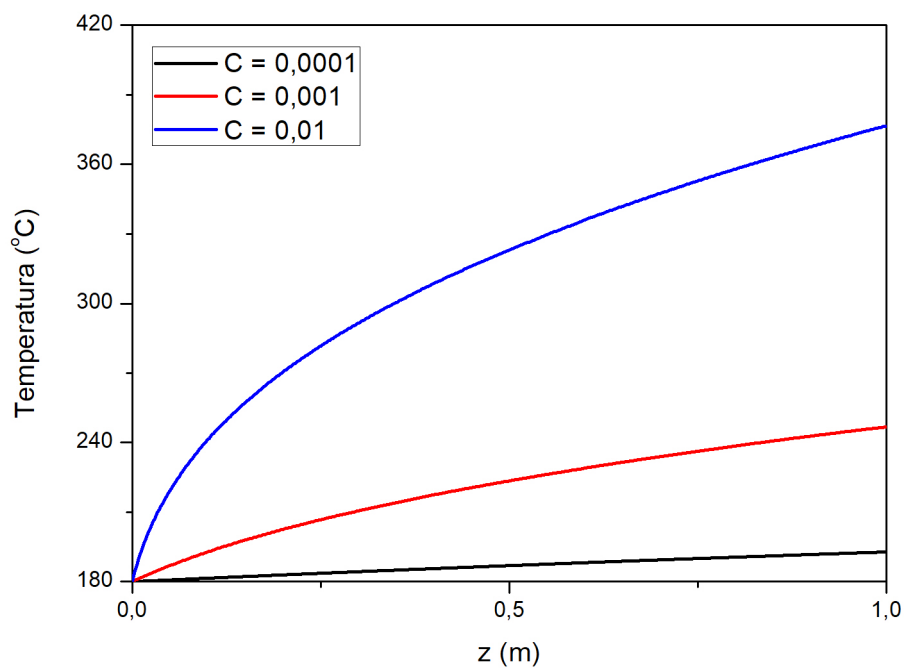


Figura 5.2: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da constante de correção - dissipação viscosa axial.



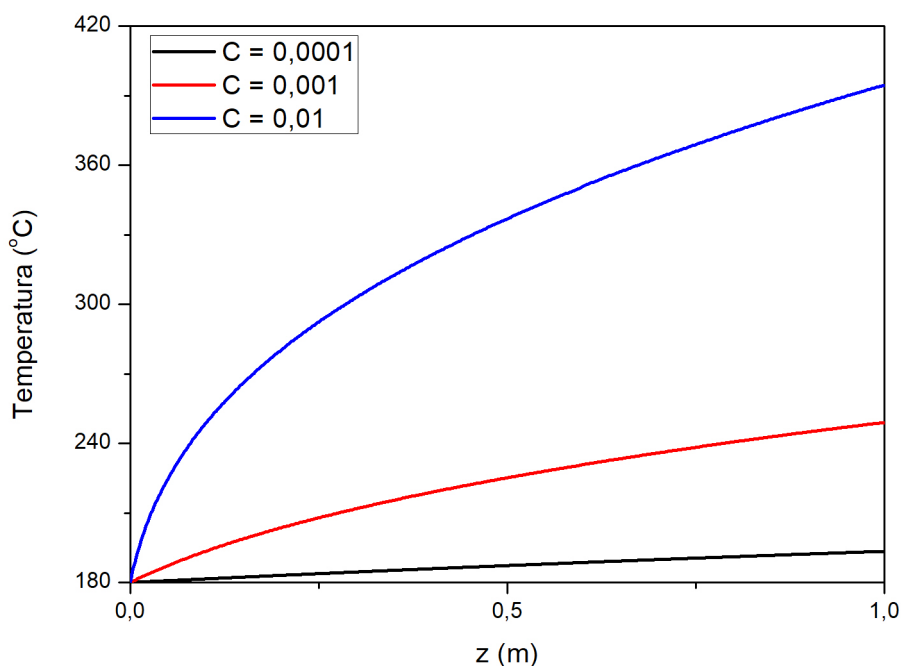


Figura 5.3: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da constante de correção - dissipação viscosa tangencial e axial.

Como pode ser observado nas Figuras 5.1 e 5.2, o aumento da ordem de grandeza das constantes de correção  $C_1$  e  $C_2$  causa forte influência no aumento da temperatura do polímero ao longo da extrusora, tanto nas simulações que consideram  $\Phi_{tangencial}$ , quanto nas simulações que consideram  $\Phi_{axial}$ . Isso se deve ao fato de que essa constante está diretamente ligada aos termos de dissipação viscosa. No caso das simulações que consideram apenas o termo de dissipação viscosa tangencial (Figura 5.1), a constante de correção com o valor  $C = 0,01$  leva a uma temperatura máxima na saída da extrusora em torno de  $230^{\circ}C$ . Por outro lado, quando apenas a dissipação axial é considerada (Figura 5.2), a temperatura ultrapassa  $360^{\circ}C$ , ficando acima da temperatura de degradação do polipropileno,  $T_d = 320^{\circ}C$  (RABELLO e DE PAOLI, 2000). A Figura 5.3, que considera os termos tangencial e axial de dissipação viscosa simultaneamente, mostra que o termo axial domina o termo tangencial, visto que o perfil de temperatura é próximo ao da Figura 5.2. Esses resultados mostram que os termos de dissipação empíricos apresentados superestimam os efeitos reais de dissipação e precisam ser ajustadas aos dados de planta com os parâmetros  $C_1$  e  $C_2$ . Os termos axiais dominam as simulações porque grandes vazões de polímero precisam ser transportados através de seções transversais extremamente estreitas. Apesar disso, o modelo pode ser útil para conduzir simulações de sistemas reais, desde que o trabalho de ajuste do modelo seja con-

duzido antes. A menor taxa de dissipação real pode estar associada a diferentes efeitos, como escorregamento do fundido nas superfícies internas da extrusora e a variação da viscosidade com as taxas de cisalhamento locais. Esses resultados mostram também a importância do desenvolvimento e implementação de modelos de escoamento detalhados para capturar todos os efeitos da operação.

Como mostrado na Figura 5.4, o aumento da vazão de alimentação causa diminuição na temperatura da massa de PP fundido ao longo da extrusora. Isso pode ser explicado observando-se a Equação (4.1.4) (balanço de energia), já que a variável  $f$  só aparece em um termo. Assim, conforme a vazão é aumentada, o tempo de residência do polímero na extrusora é reduzido, de forma que o calor transferido do barril para o fluido não é suficientemente alto para compensar o aumento da velocidade com que a massa de PP fundido passa pelo equipamento. Consequentemente, a temperatura do polímero é menor quanto maior for a vazão alimentada. Por outro lado, a Figura 5.5 mostra o efeito oposto na presença de dissipação axial: quanto maior a vazão, maior é a temperatura ao longo da extrusora. Isso pode ser explicado observando-se a Equação (4.1.17), que mostra que a dissipação viscosa axial é diretamente proporcional ao quadrado da vazão mássica de alimentação,  $f \equiv \dot{m}$ . A Figura 5.6 mostra como o perfil de temperaturas muda com a variação da vazão de alimentação, considerando os termos tangencial e axial da dissipação viscosa. Assim como na análise de sensibilidade da constante de correção, percebe-se que o termo de dissipação axial domina o termo de dissipação tangencial. Esse resultado fica evidente não só devido aos efeitos opostos dos dois termos de dissipação sobre o comportamento do perfil de temperaturas, mas também por causa dos valores máximos de temperatura alcançados: quando somente a dissipação tangencial está presente, a diferença entre as temperaturas máximas alcançadas nos casos com menor e maior vazão é aproximadamente igual a  $20^{\circ}C$ , enquanto quando a dissipação total é incluída na simulação, essa diferença fica em torno de  $10^{\circ}C$ , seguindo o comportamento do caso em que somente o termo axial é considerado. Como os efeitos observados nas Figuras 5.5 e 5.6 são muito mais representativos da operação de equipamentos industriais, parece correto admitir que os termos de dissipação viscosa axial dominam o escoamento e refletem melhor a dissipação de calor no interior do equipamento, sendo mais adequados para a formulação dos modelos de escoamento nas extrusoras em modelos a parâmetros concentrados.

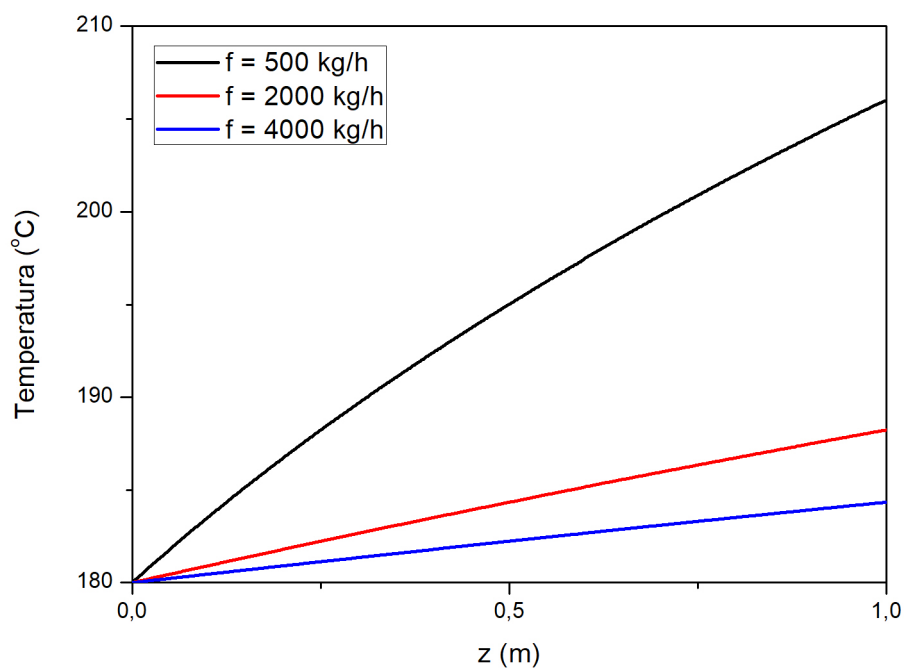


Figura 5.4: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da vazão de alimentação - dissipação viscosa tangencial.

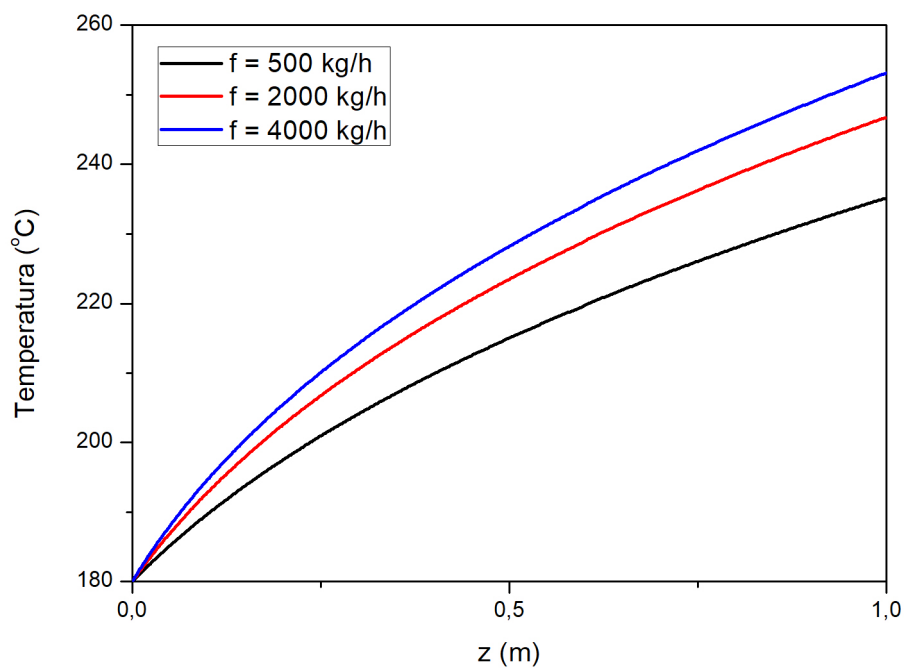


Figura 5.5: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da vazão de alimentação - dissipação viscosa axial.

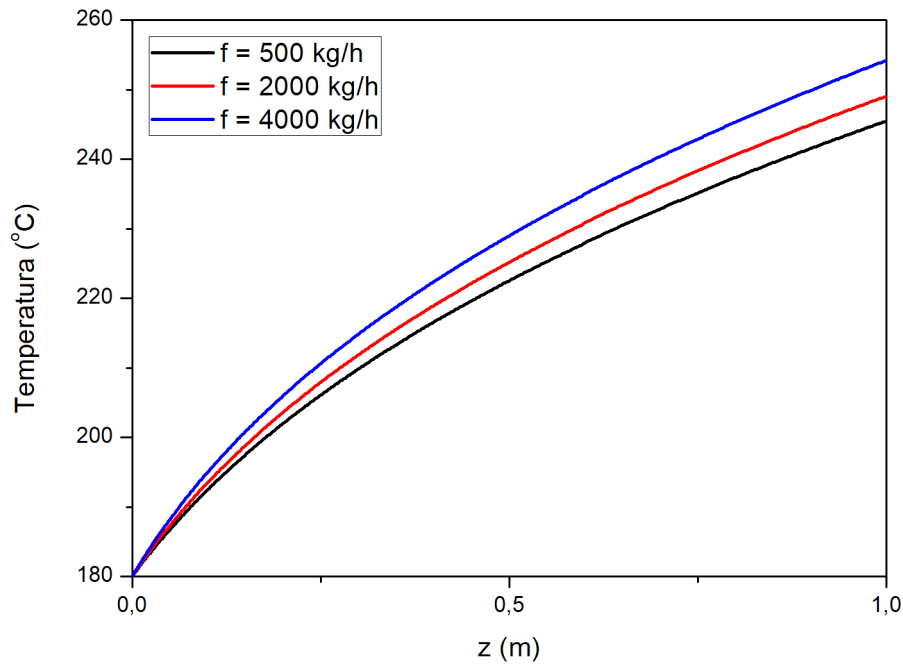


Figura 5.6: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da vazão de alimentação - dissipação viscosa tangencial e axial.

Assim como no caso da vazão de alimentação, a análise de sensibilidade em relação à velocidade de rotação do parafuso da extrusora mostra comportamentos diferentes nos casos em que somente a dissipação tangencial e somente a dissipação axial são analisadas. A Figura 5.7 mostra que a temperatura do polímero na extrusora é maior quanto maior for a velocidade de rotação do parafuso. Esse resultado pode ser explicado observando-se a Equação (4.1.9), que mostra que a dissipação viscosa tangencial é diretamente proporcional ao quadrado da variável analisada. Por outro lado, a Figura 5.8 mostra o comportamento do perfil de temperaturas quando somente o termo de dissipação viscosa axial está presente. Esse resultado já podia ser esperado, pois esse modo de dissipação de calor não depende explicitamente da velocidade de rotação do parafuso, como fica evidente ao se observar a Equação (4.1.17), que não considera essa variável em seus termos. É importante observar que quando se considera somente a dissipação axial, a temperatura alcançada na saída da extrusora (em torno de  $250^{\circ}\text{C}$ ) é maior que quando apenas a dissipação tangencial é considerada (em torno de  $210^{\circ}\text{C}$ ). A Figura 5.9 mostra o perfil de temperaturas para o caso em que são considerados os termos tangencial e axial de dissipação viscosa na análise de sensibilidade da velocidade de rotação do parafuso da extrusora. Pode-se perceber que existe domínio do termo de dissipação axial, assim como no caso das variáveis constante de correção e vazão de alimentação. Esse

resultado mostra que as temperaturas máximas alcançadas na saída da extrusora para as diferentes velocidades de rotação do parafuso são apenas um pouco maiores que as apresentadas na Figura 5.8 e diferem de aproximadamente  $5^{\circ}C$  para valores muito distintos da variável analisada, diferentemente do caso em que somente o termo de dissipação viscosa tangencial é considerado, no qual os valores de temperatura alcançados diferem em torno de  $10^{\circ}C$ . Deve-se considerar, no entanto, que no ambiente real de produção a vazão da massa polimérica aumenta com a velocidade de rotação do parafuso. Se esse efeito for considerado explicitamente no termo de dissipação viscosa axial, o efeito observado será similar ao descrito nas Figuras 5.4 a 5.6, relacionadas ao efeito do aumento da vazão sobre os perfis de temperatura ao longo da extrusora, dado que os termos de dissipação viscosa axial dominam o escoamento.

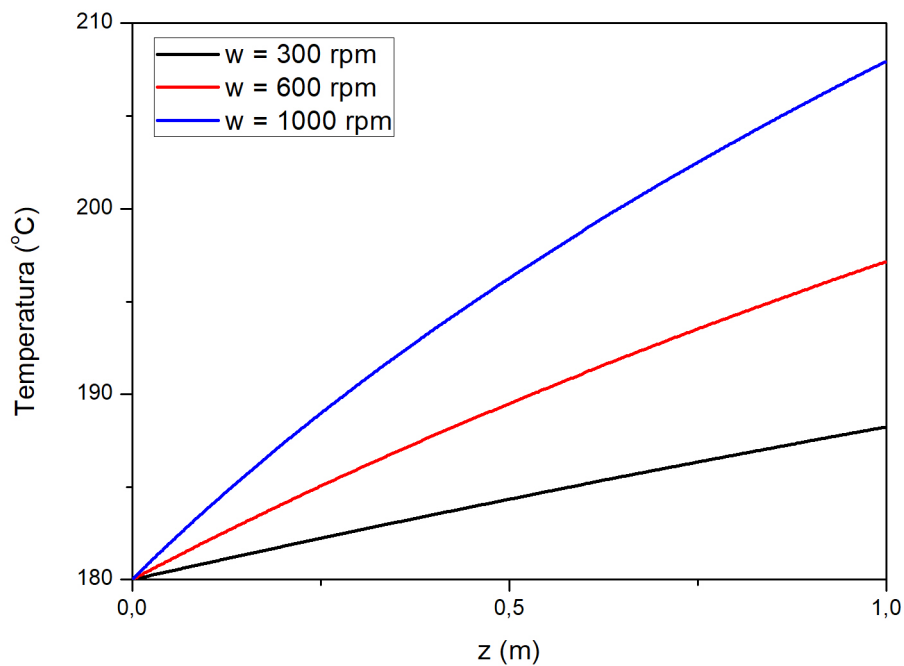


Figura 5.7: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da rotação do parafuso - dissipação viscosa tangencial.

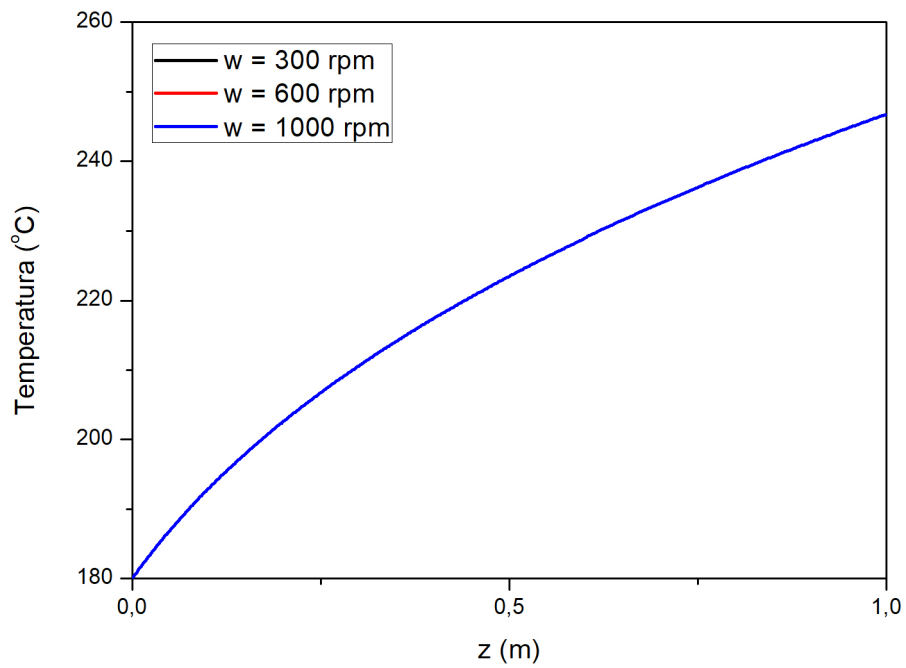


Figura 5.8: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da rotação do parafuso - dissipação viscosa axial.

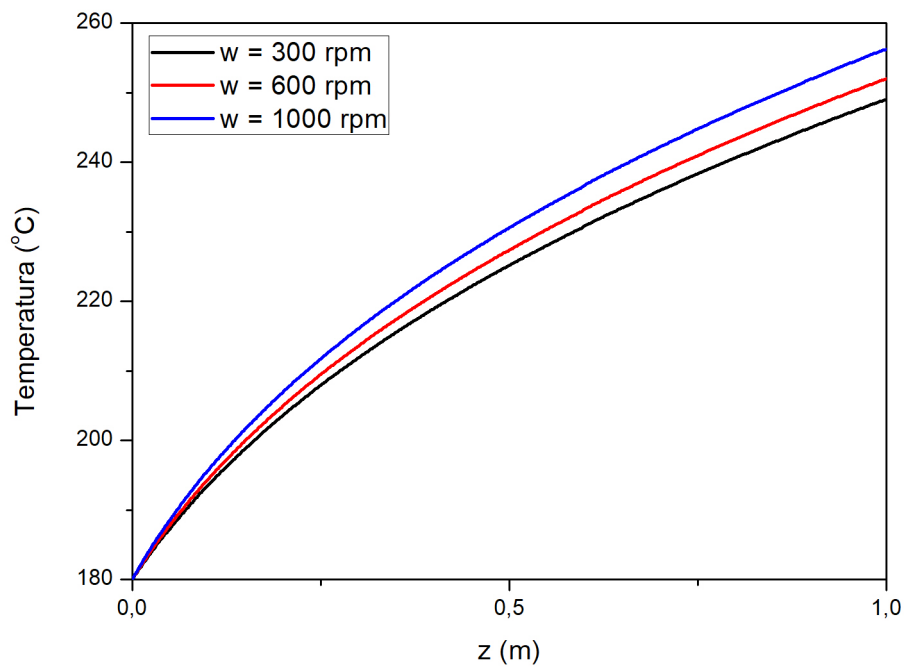


Figura 5.9: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da rotação do parafuso - dissipação viscosa tangencial e axial.

A última análise de sensibilidade realizada tem como objetivo estudar os efeitos da variação da massa molar do polipropileno sobre o comportamento do perfil de temperaturas de uma extrusora industrial com base nos dados da Tabela 5.1. A Figura 5.10 mostra o efeito de dois *grades* de polipropileno, um com menor e outro com maior massa molar média, na temperatura ao longo da extrusora, considerando somente a dissipação viscosa tangencial na simulação. O resultado mostra que o polímero pesado provoca o surgimento de temperaturas mais altas que o de menor massa molar, como já poderia ser esperado. Entretanto, como é possível perceber no gráfico, a diferença de temperaturas entre os *grades* é muito pequena, em torno de  $2^{\circ}\text{C}$ . Deve-se notar também o perfil aproximadamente linear da temperatura que se desenvolve ao longo da extrusora.

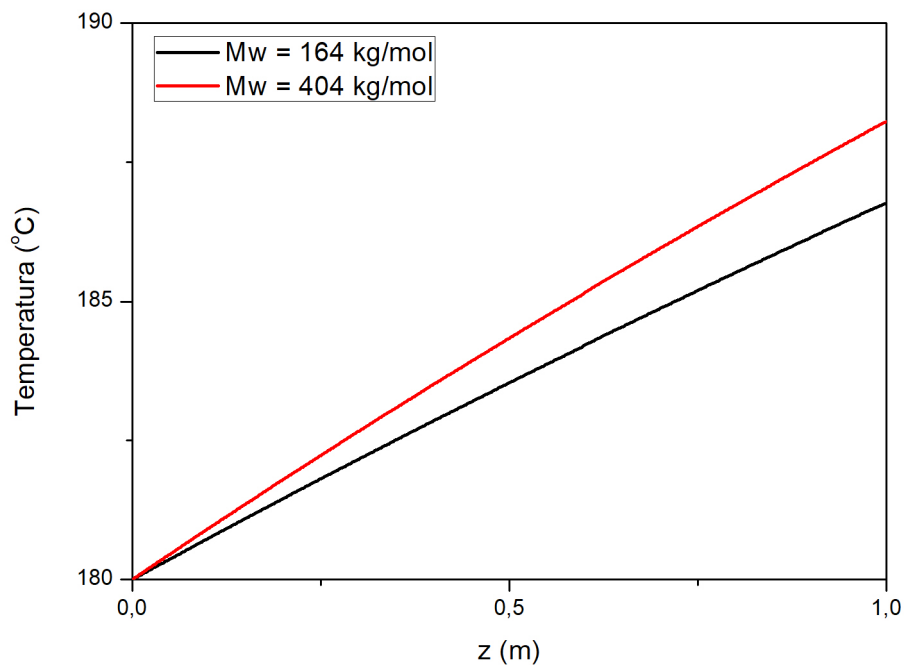


Figura 5.10: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da massa molar média de PP - dissipação viscosa tangencial.

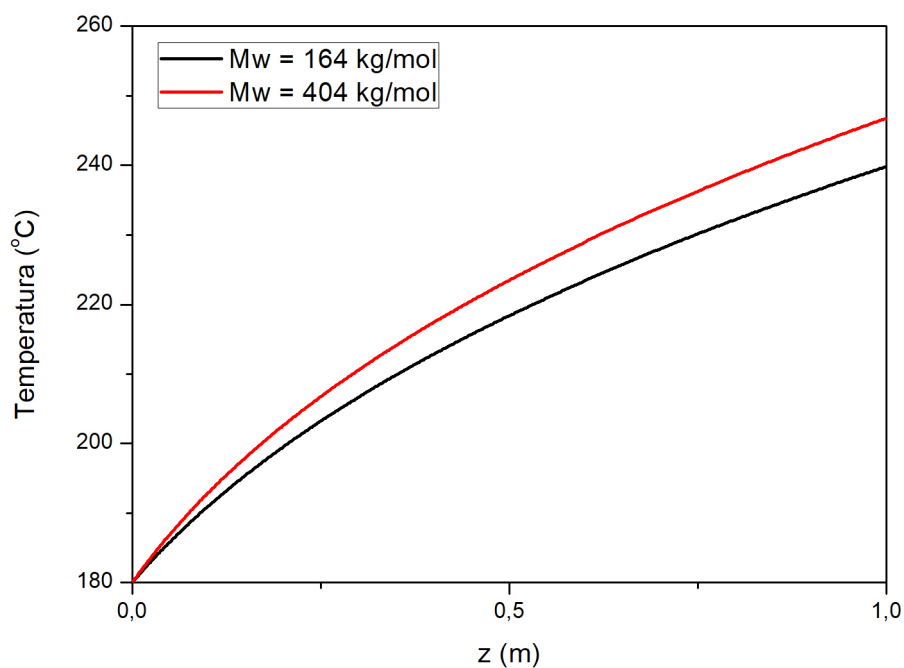


Figura 5.11: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da massa molar média de PP - dissipação viscosa axial.

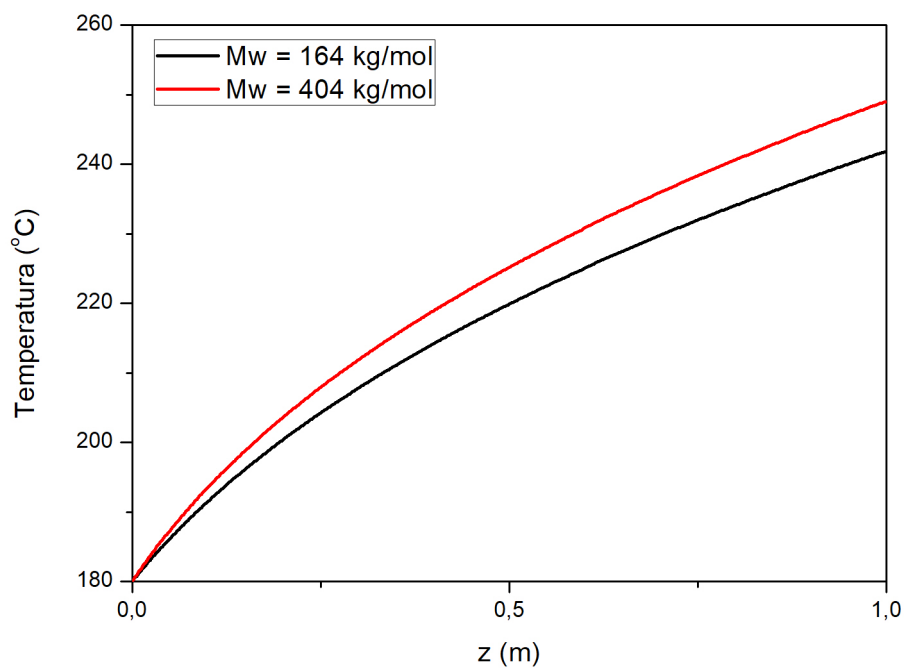


Figura 5.12: Perfis de temperatura obtidos para diferentes valores da massa molar média de PP - dissipação viscosa tangencial e axial.



A Figura 5.11 apresenta o perfil de temperaturas obtido quando se varia a massa molar média do polipropileno para o caso em que se considera apenas a dissipação viscosa axial. A principal diferença desse gráfico para o mostrado na Figura 5.10 é que a temperatura alcançada pelos *grades* de polipropileno da Figura 5.11 são muito mais altas, ficando em torno de  $250^{\circ}C$  para o polímero com maior massa molar média. Esse resultado mostra uma vez mais que a dissipação viscosa axial exerce papel dominante em relação à dissipação viscosa tangencial. Nota-se também que a diferença entre as temperaturas máximas dos dois *grades* são bem maiores no caso da dissipação axial, indicando diferenças expressivas e superiores a  $10^{\circ}C$  entre os perfis obtidos para os dois *grades* considerados. Portanto, esperam-se diferenças significativas entre as taxas de cisalhamento e os termos de dissipação quando ocorrem mudanças de *grade* na planta, o que justifica plenamente a hipótese de que diferentes *grades* afetem o desgaste da extrusora com diferentes intensidades. A Figura 5.12, em que são considerados os termos tangencial e axial de dissipação viscosa na simulação, mostra um perfil de temperaturas similar à Figura 5.11, indicando que, no caso da análise de sensibilidade da massa molar média de polipropileno, a dissipação de calor devido ao escoamento axial domina o termo referente ao escoamento tangencial.

### 5.1.2 Comentários Adicionais

Esta seção abordou o estudo de simulação de uma extrusora industrial com base em modelos simplificados a parâmetros concentrados que envolvem balanços de massa e energia. Em particular foram realizados alguns estudos de sensibilidade dos perfis de temperatura a variações de algumas variáveis importantes no processo de extrusão: intensidade dos termos de dissipação viscosa, vazão de polímero, velocidade de rotação do parafuso e massa molar média do PP. A modelagem fenomenológica apresentada não é inovadora no sentido matemático da abordagem proposta, visto que outros trabalhos já publicados, como aquele apresentado por EITZLMAYR *et al.* (2014), fizeram uso de modelos similares, principalmente para estudo das trocas de calor que ocorrem entre barril, polímero e parafuso, e foram validados por experimentos. A despeito disso, o presente documento propôs um modelo a parâmetros concentrados simples e derivou expressões semi-empíricas úteis para descrever as taxas de cisalhamento e, portanto, os termos de dissipação viscosa associados às componentes do escoamento tangencial e axial.

Uma diferença importante entre a abordagem proposta nessa seção e aquelas apresentadas em outros trabalhos encontrados na literatura é que o presente trabalho utiliza dados de extrusoras industriais para conduzir as análises, ao invés de dados

oriundos de extrusoras de laboratório. Dessa forma, os resultados apresentados puderam ser analisados com o objetivo de compreender a operação de processos de indústrias.

Com base nos estudos de sensibilidade realizados, foi possível concluir que o termo de dissipação viscosa causada pelo escoamento axial é mais importante que os efeitos viscosos causados pelo escoamento tangencial. Essa conclusão é importante porque permite caracterizar melhor o modelo que deve ser empregado para representar o termo de dissipação em simulações conduzidas com o modelo a parâmetros concentrados.

Observou-se que o modelo aproximado de dissipação proposto resulta em superestimação dos efeitos viscosos, provavelmente por conta de efeitos de escorregamento nas paredes internas e variação da viscosidade com as taxas locais de cisalhamento no interior da extrusora. Por isso, a introdução de fatores de correção estimados com dados reais é importante. No caso da constante de correção, observou-se que os valores devem se situar ao redor de 0,01 para gerar perfis de temperatura condizentes com aqueles observados no processo real.

Em relação à vazão mássica de alimentação, as temperaturas do escoamento aumentam com a vazão de polímero como esperado, quando o escoamento é dominado pelos termos de dissipação axial. O fato da dissipação axial dominar a dissipação tangencial também afeta a importância do efeito da velocidade de rotação do parafuso sobre o perfil de temperaturas ao longo da extrusora, de forma que o aumento da velocidade de rotação não causa grandes alterações na temperatura máxima na saída do equipamento, quando a vazão mássica de polímero é mantida constante. Esse efeito, contudo, não é realista, dado que o aumento da velocidade de rotação provoca aumento da vazão mássica de polímero, o que pode ser inserido explicitamente no termo de dissipação viscosa axial. Nesse caso, o efeito do aumento da velocidade de rotação do parafuso é similar ao efeito do aumento da vazão mássica de polímero.

Finalmente, os estudos de simulação mostram que o aumento da massa molar média do polímero pode provocar aumento expressivo do termo de dissipação viscosa, levando ao aumento de temperaturas e possivelmente afetando o desgaste da extrusora. Com base no exposto, parece razoável admitir que o desgaste provocado pela operação de extrusão no parafuso aumente com a vazão, a velocidade de rotação e a massa molar média do polímero.

## 5.2 Resultados das Simulações de CFD

### 5.2.1 Análise de Convergência de Malhas

O trabalho de WANG (2013), usado como principal referência desta dissertação para o estudo de CFD, estudou a operação de uma extrusora no processo de extrusão isotérmica do policloreto de vinila (PVC), cuja reologia é descrita pelo modelo Cross com os seguintes parâmetros:  $\eta_0 = 0,47 \times 10^5 Pa.s$ ,  $\lambda = 0,26 s$  e  $n = 0,65$ . Além disso, o autor estudou o efeito causado por quatro variáveis (velocidade longitudinal, pressão, taxa de cisalhamento e viscosidade) ao longo do processo de extrusão em dez pontos da extrusora, de modo que as simulações conduzidas no presente trabalho podem ser validadas por esse artigo.

O estudo de convergência de malhas foi realizado em duas etapas. Primeiramente foi feita a análise de duas malhas para o parafuso (52k e 74k) utilizando a malha do domínio de fluido com 239 mil nós. Em seguida foi feita a análise de quatro malhas para o domínio do fluido (133k, 165k, 201k e 239k) utilizando a malha do parafuso convergida. O estudo de convergência do parafuso foi realizado utilizando a malha mais fina, para que os cálculos capturassem as variações das principais variáveis em todos os pontos da geometria. As malhas são assim denominadas porque o símbolo "k" representa a unidade de milhar; ou seja, a malha 52k possui 52 mil nós. A Tabela 5.3 mostra o tempo de simulação para cada malha com a utilização de 16 núcleos em paralelo para os cálculos.

Tabela 5.3: Tempo de simulação associado às malhas do parafuso.

Malha	Tempo de Simulação (min)
52k	20
74k	21

As Figuras 5.13 até 5.16 mostram os gráficos comparativos da taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade axial e pressão, respectivamente, em 10 pontos do parafuso para as malhas de 52 mil e 74 mil nós. Esses valores foram calculados pelo *solver* do *Polyflow* no ponto  $Y = 9,9 mm$ , que é a metade da distância entre a rosca e o barril, como mostrado na Figura 4.2. Esse ponto foi escolhido porque é o mesmo em que as análises de WANG (2013) foram realizadas. Observa-se a convergência das malhas para todas as variáveis, dado que não foram observadas diferenças expressivas para quaisquer das variáveis analisadas com as duas malhas. Deve-se observar também que a natureza oscilatória das soluções diz respeito à natureza da configuração geométrica da extrusora, uma vez que a distância entre o

barril e o parafuso muda, à medida que se avança ao longo do passo do parafuso.

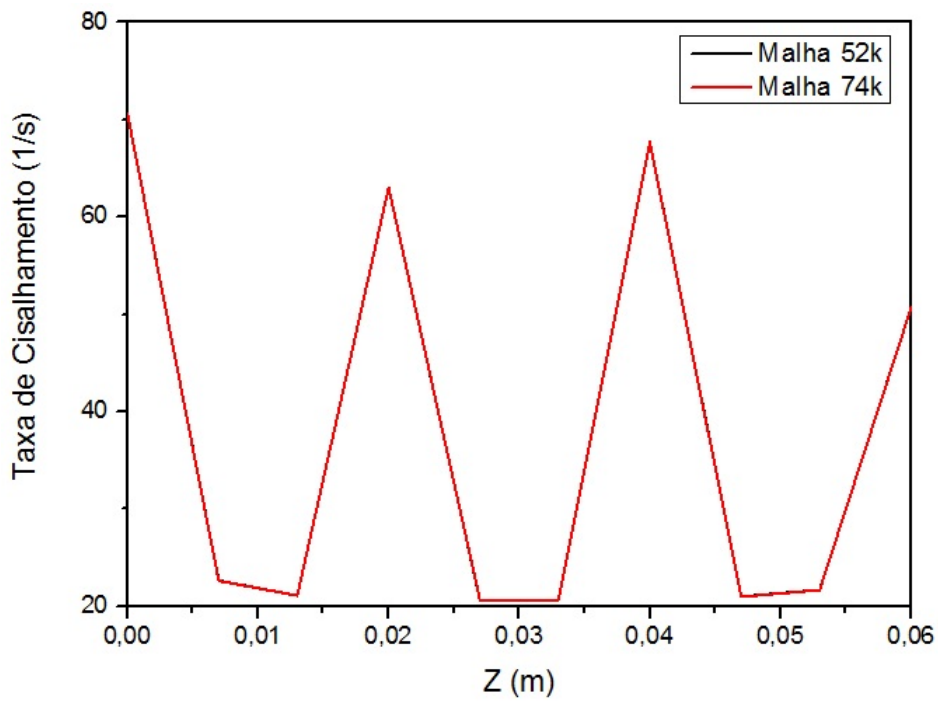


Figura 5.13: Taxa de cisalhamento em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

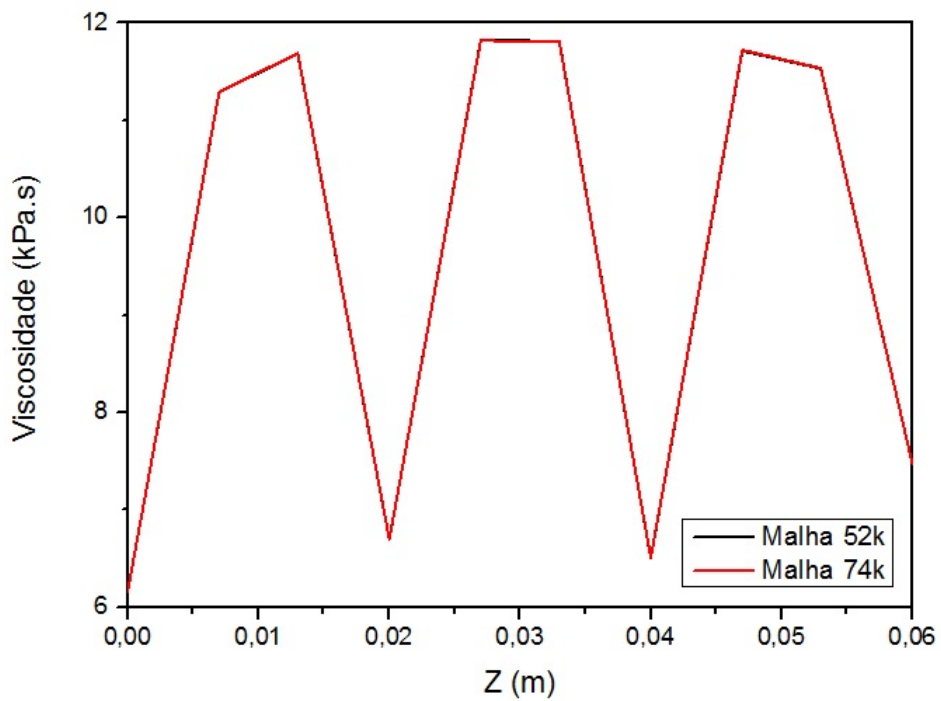


Figura 5.14: Viscosidade em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

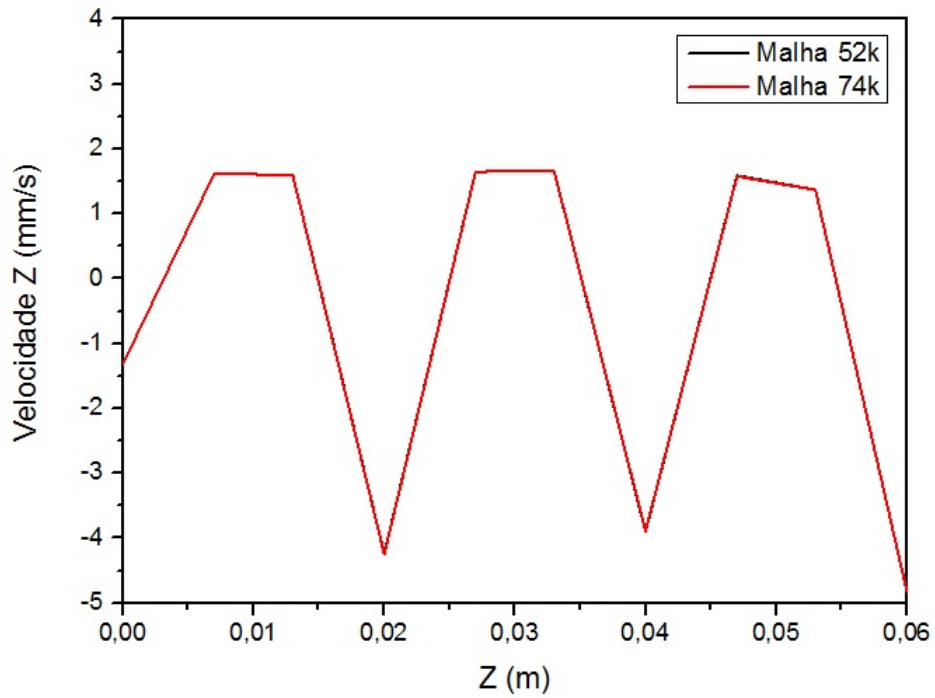


Figura 5.15: Velocidade axial em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

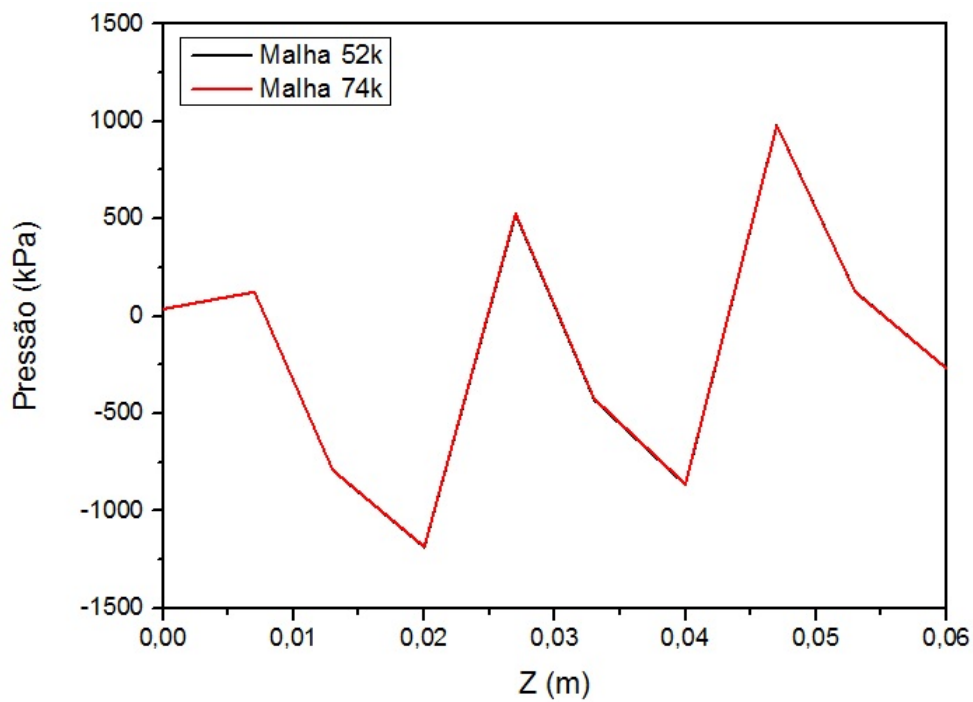


Figura 5.16: Pressão em 10 pontos do parafuso para as malhas 52k e 74k (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

Considerando que os resultados de simulação entre as duas malhas foram praticamente os mesmos, optou-se por utilizar a malha mais grossa, com 52 mil nós.

Após o estudo da malha do parafuso, foi realizada análise de convergência da malha do domínio de fluido utilizando a malha 52k do parafuso. A Tabela 5.4 mostra o tempo de simulação para cada malha, com a utilização de 16 núcleos em paralelo para os cálculos.

Tabela 5.4: Tempo de simulação das malhas do domínio de fluido.

Malha	Tempo de Simulação (min)
133k	8
165k	11
201k	14
239k	20

As Figuras 5.17, 5.20, 5.23 e 5.26 mostram os perfis da taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade axial e pressão, respectivamente, ao longo do parafuso. Esses são os resultados obtidos por WANG (2013) e usados para validar as simulações realizadas nesta dissertação. As Figuras 5.18, 5.21, 5.24 e 5.27 mostram os perfis da taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade axial e pressão, respectivamente, ao longo do parafuso para as quatro malhas testadas e para o trabalho de referência. As Figuras 5.19, 5.22, 5.25 e 5.28 mostram o parafuso estudado com planos de corte transversal nos seguintes pontos do eixo axial: 0, 10 *mm*, 20 *mm*, 30 *mm*, 40 *mm*, 50 *mm* e 60 *mm*. Observa-se também nessas figuras uma linha amarela ao longo do eixo *Z* (axial) no ponto  $(X, Y) = (0; 9, 9)$  *mm* do plano de corte, em que são obtidos os perfis das variáveis analisadas.

Pode ser observado na Figura 5.18 que a convergência em relação às malhas utilizadas neste trabalho só parece ter sido atingida com as maiores malhas (239k e 201k). Na comparação entre as malhas do artigo e deste trabalho, a convergência é maior com o uso da malha 239k, sendo a diferença observada praticamente nula em alguns pontos do domínio. A análise de convergência das malhas para a taxa de cisalhamento mostrou que a malha com 239k pode ser validada pelo trabalho de WANG (2013), o que pode ser comprovado observando-se que, apesar de existirem alguns pontos do parafuso em que as diferenças percentuais entre a malha com 239k e a do artigo de referência são mais discrepantes, o erro médio é de apenas 1,65%. Como pode ser observado na Figura 5.18, quanto mais refinada é a malha numérica, maior é a convergência com a malha do artigo de referência. Observa-se também que as curvas das malhas de 239k e do trabalho de WANG (2013) estão superpostas na maior parte do gráfico, comprovando essa afirmação.

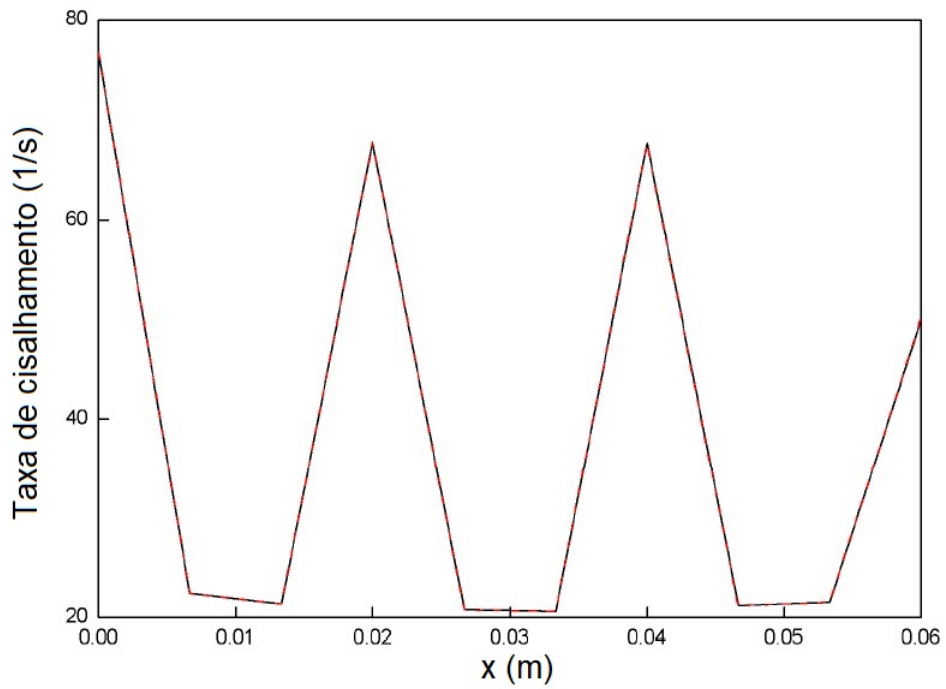


Figura 5.17: Perfil da taxa de cisalhamento ao longo do parafuso obtida no trabalho de WANG (2013).

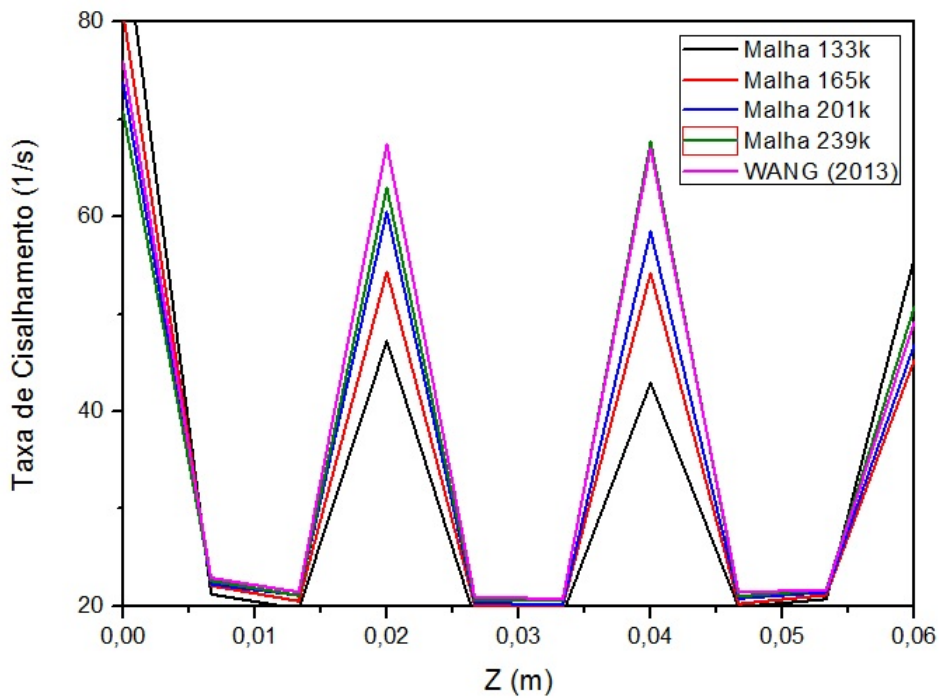


Figura 5.18: Comparação do perfil da taxa de cisalhamento ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação.

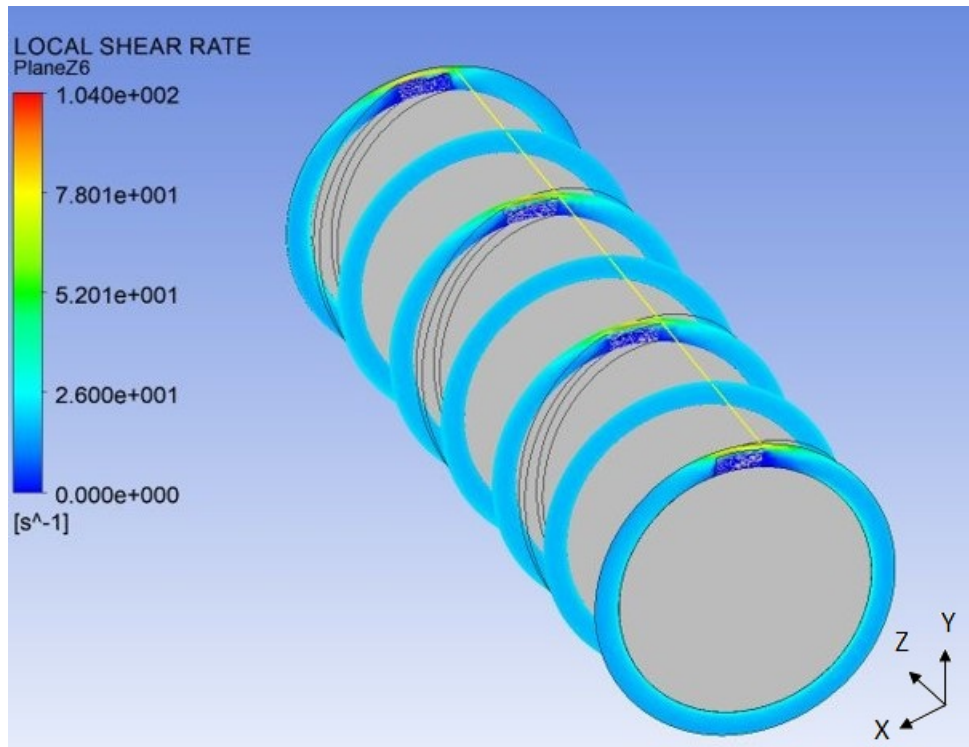


Figura 5.19: Planos de corte em  $XY$  ao longo do eixo  $Z$  nos pontos  $0, 10\text{ mm}, 20\text{ mm}, 30\text{ mm}, 40\text{ mm}, 50\text{ mm}$  e  $60\text{ mm}$  e linha em  $(X, Y) = (0; 9, 9)\text{ mm}$  para a taxa de cisalhamento.

Pode ser observado na Figura 5.21 que a convergência em relação às malhas utilizadas neste trabalho parece ter sido atingida uma vez mais para as maiores malhas (239k e 201k), em que a diferença é de 0,17%. Na comparação entre as malhas do trabalho de WANG (2013) e desta dissertação, a convergência é maior com a malha 239k, com diferença máxima da ordem de  $-0,19\%$ . A análise de convergência das malhas para a viscosidade mostrou que a malha de 239k pode ser validada pelo artigo de referência, o que pode ser comprovado observando-se que, apesar de existirem alguns pontos do parafuso em que as diferenças percentuais entre as malhas com 239k e do artigo de referência são mais discrepantes, o erro médio é de apenas  $-0,27\%$ . Nota-se também que, assim como no caso da taxa de cisalhamento, as curvas das malhas com 239k e do trabalho de WANG (2013) estão superpostas na maior parte do gráfico.



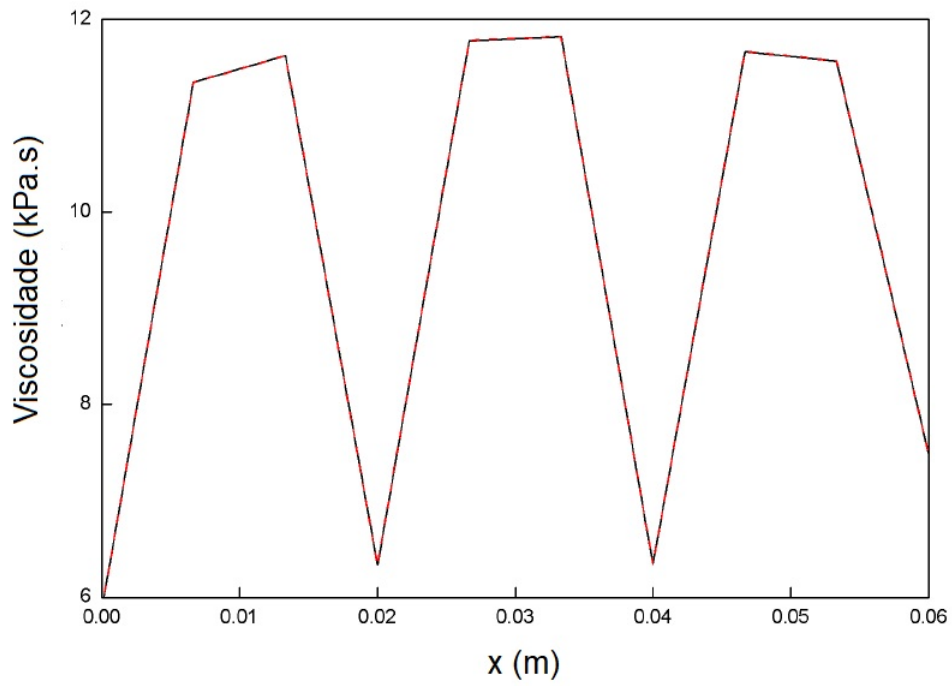


Figura 5.20: Perfil da viscosidade ao longo do parafuso obtido no trabalho de WANG (2013).

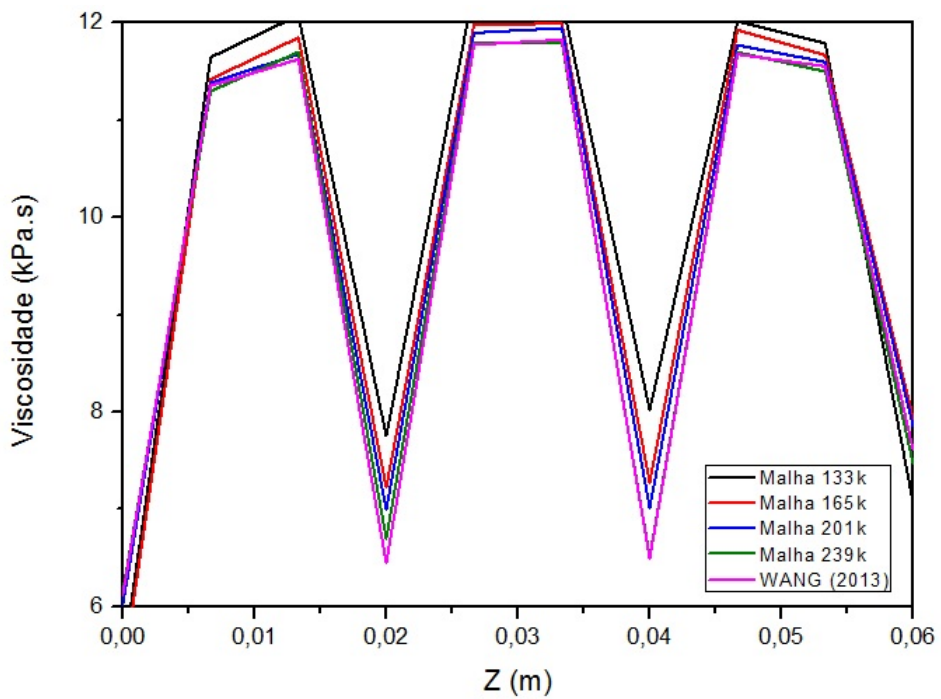


Figura 5.21: Comparação do perfil da viscosidade ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação

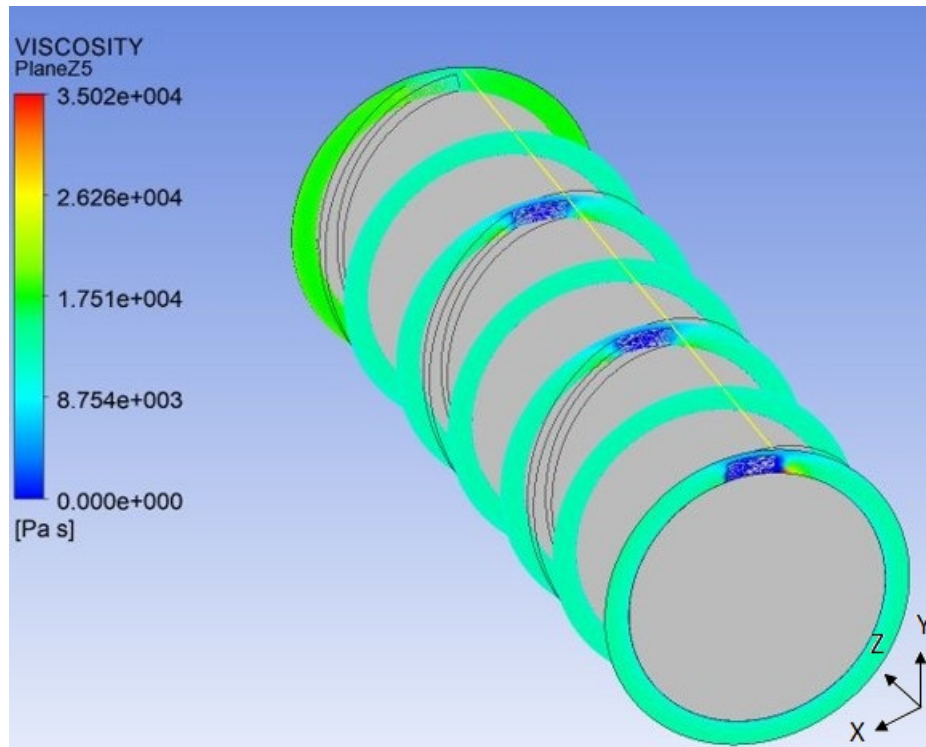


Figura 5.22: Planos de corte transversal ao longo do eixo  $Z$  nos pontos  $0, 10\text{ mm}, 20\text{ mm}, 30\text{ mm}, 40\text{ mm}, 50\text{ mm}$  e  $60\text{ mm}$  e linha em  $(X, Y) = (0; 9, 9)\text{ mm}$  para a viscosidade

A partir da Figura 5.24 observa-se que, diferente dos casos da taxa de cisalhamento e da viscosidade, há regiões em que as curvas das malhas com 239k e do trabalho de WANG (2013) apresentam diferenças significativas, resultando em um erro médio de  $-22,4\%$ . Entretanto, a análise de convergência das malhas para a velocidade axial mostrou que a malha com 239k pode ser validada pelo trabalho de WANG (2013), o que pode ser explicado observando-se que, em outras regiões do parafuso, houve total convergência numérica, podendo ser considerada suficiente para garantir a validade da malha.

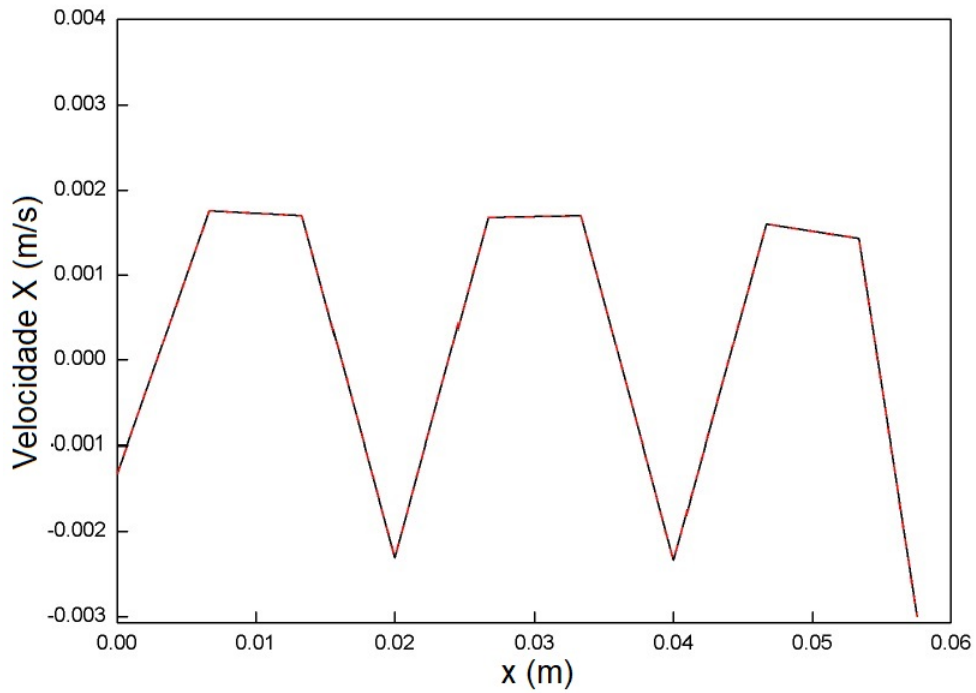


Figura 5.23: Perfil da velocidade axial ao longo do parafuso do trabalho de WANG (2013). Nota-se que o autor usou o eixo longitudinal como sendo o eixo  $X$  e a velocidade axial como velocidade  $X$ .

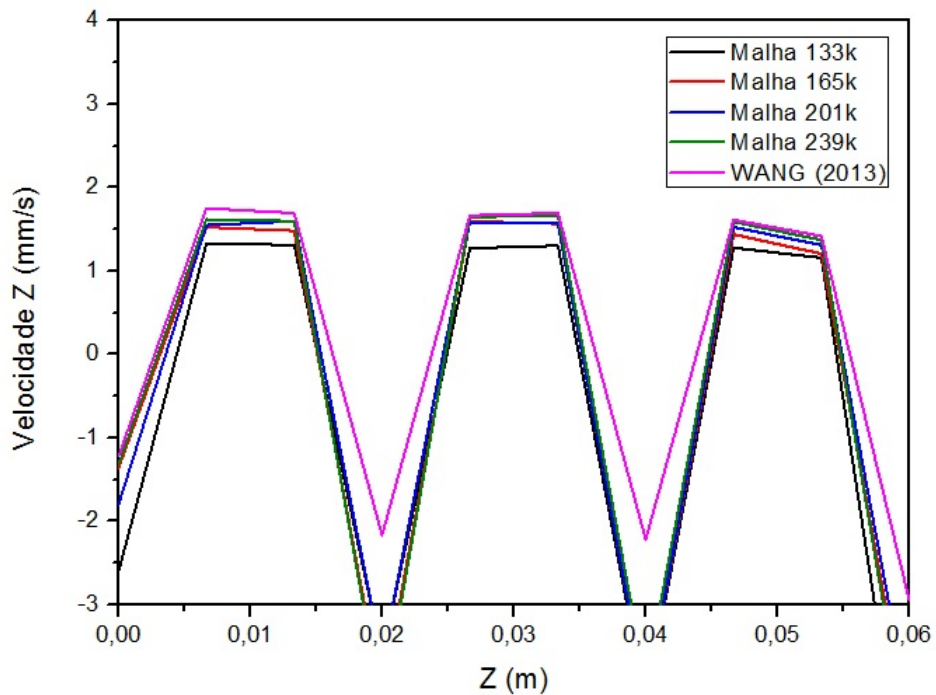


Figura 5.24: Comparação do perfil da velocidade axial ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação.

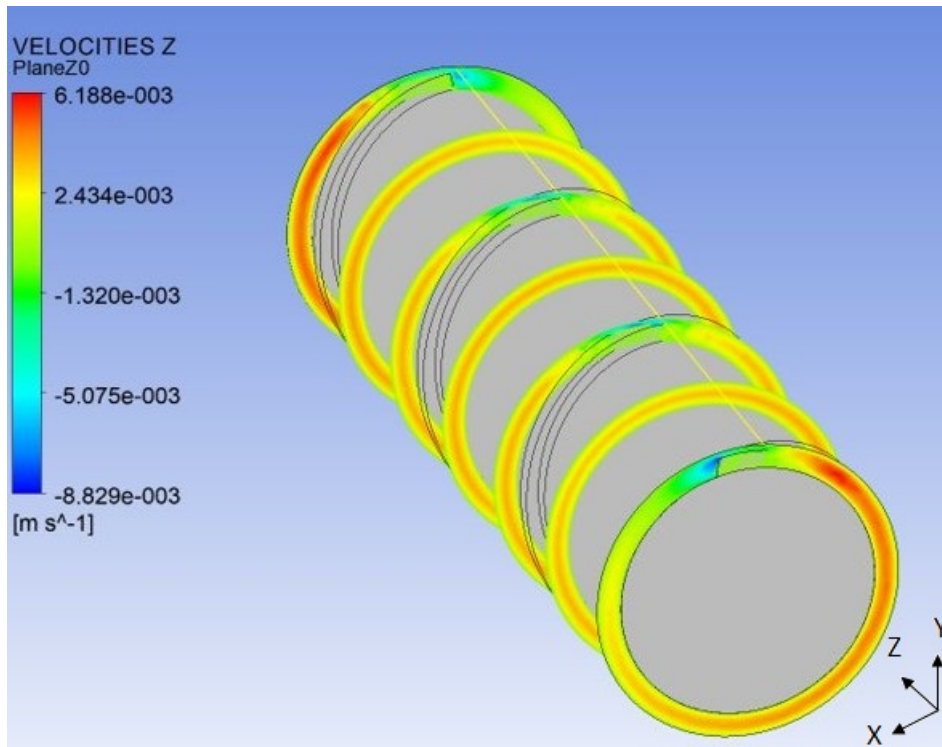


Figura 5.25: Planos de corte transversal ao longo do eixo  $Z$  nos pontos 0, 10  $mm$ , 20  $mm$ , 30  $mm$ , 40  $mm$ , 50  $mm$  e 60  $mm$  e linha em  $(X, Y) = (0; 9, 9) mm$  para a velocidade axial

A análise de convergência das malhas para a pressão mostrou que a malha com 239k pode ser validada pelo artigo de referência. Nota-se que, apesar de existirem alguns pontos do parafuso em que as diferenças percentuais são mais discrepantes, o erro médio é de 10,1%. Como pode ser observado na Figura 5.27, quanto mais refinada é a malha numérica, maior é a convergência com a malha do artigo de referência. Observa-se também que, assim como nos casos da taxa de cisalhamento e da viscosidade, as curvas das malhas com 239k e do trabalho de WANG (2013) estão superpostas na maior parte do gráfico, comprovando essa afirmação.

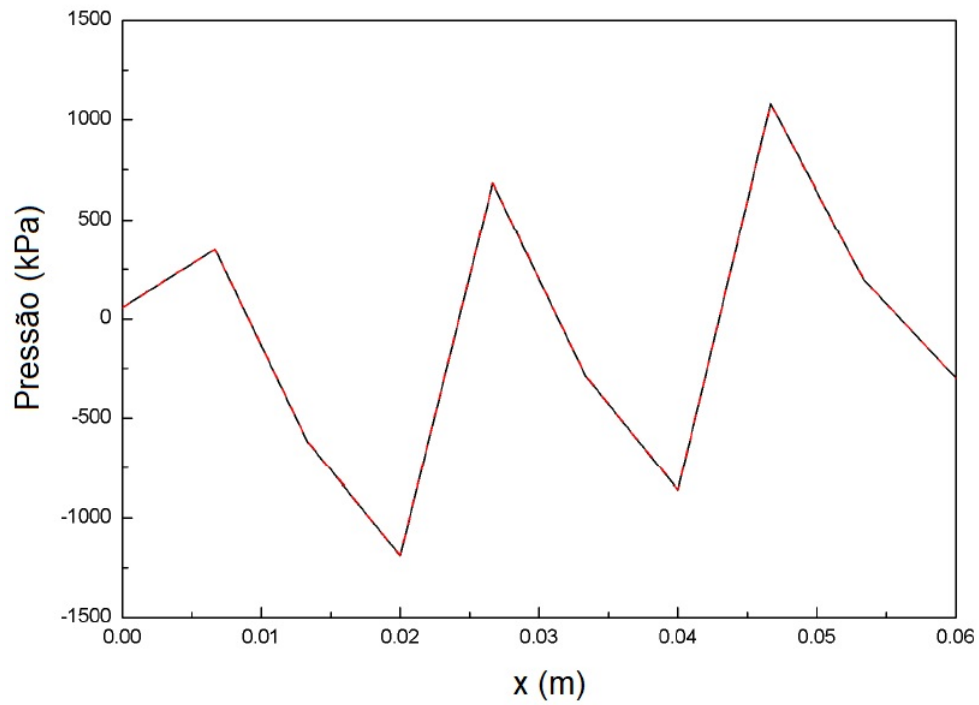


Figura 5.26: Perfil da pressão ao longo do parafuso do trabalho de WANG (2013).

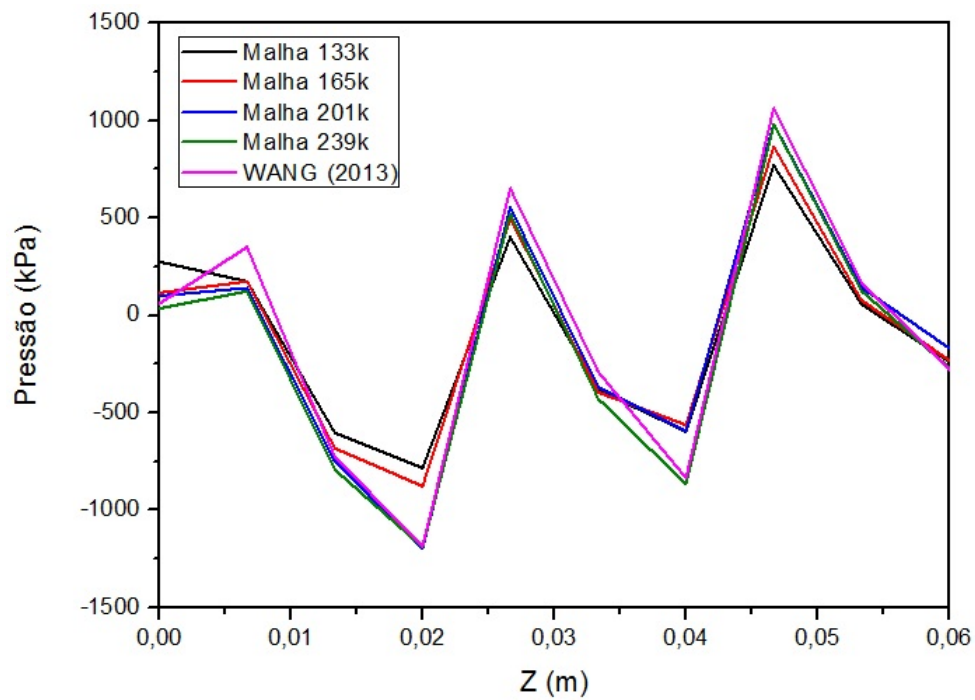


Figura 5.27: Comparação do perfil da pressão ao longo do parafuso entre o trabalho de WANG (2013) e as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação.

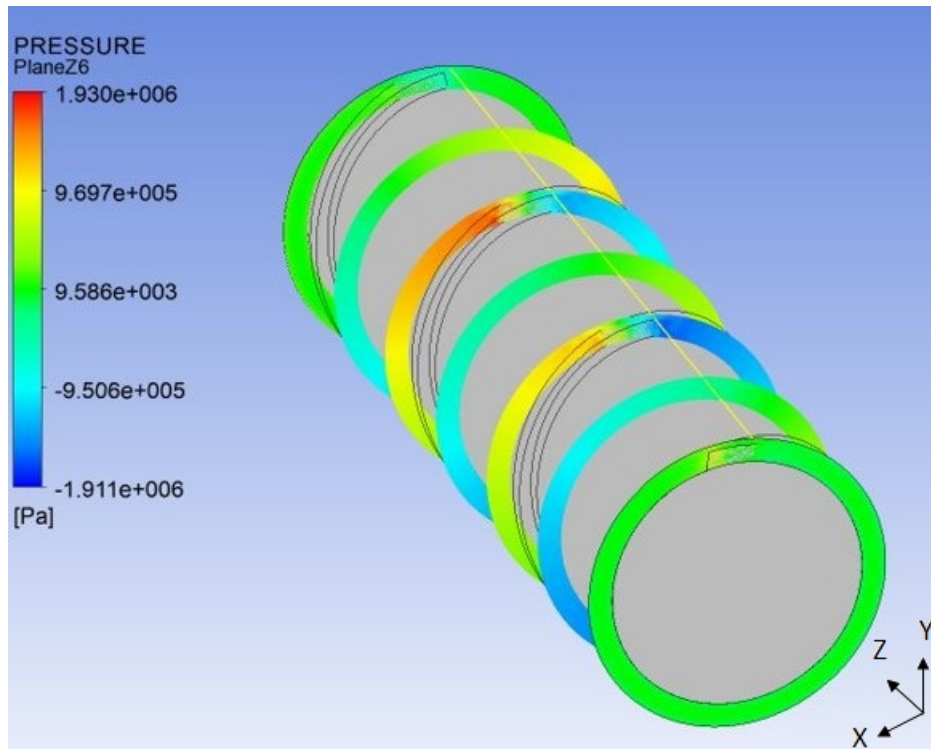


Figura 5.28: Planos de corte transversal ao longo do eixo  $Z$  nos pontos  $0, 10 \text{ mm}, 20 \text{ mm}, 30 \text{ mm}, 40 \text{ mm}, 50 \text{ mm}$  e  $60 \text{ mm}$  e linha em  $(X, Y) = (0; 9, 9) \text{ mm}$  para a pressão.

Baseado no estudo de validação, é possível admitir que a implementação do modelo foi feita de forma consistente e comparável àquela documentada por WANG (2013). Dessa forma, considerando como validada a implementação realizada neste trabalho com base no artigo desse autor, é possível obter a tensão de cisalhamento, em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ , multiplicando-se os valores da taxa de cisalhamento e da viscosidade no mesmo ponto. Como resultado, obtém-se o gráfico mostrado na Figura 5.29. Pode-se observar que a tensão de cisalhamento e, portanto, os esforços feitos sobre o parafuso, variam com a posição, indicando claramente que diferentes regiões do parafuso estão sujeitas a diferentes tensões, o que pode justificar o desenvolvimento maior de desgaste em certos pontos do equipamento do que em outros.

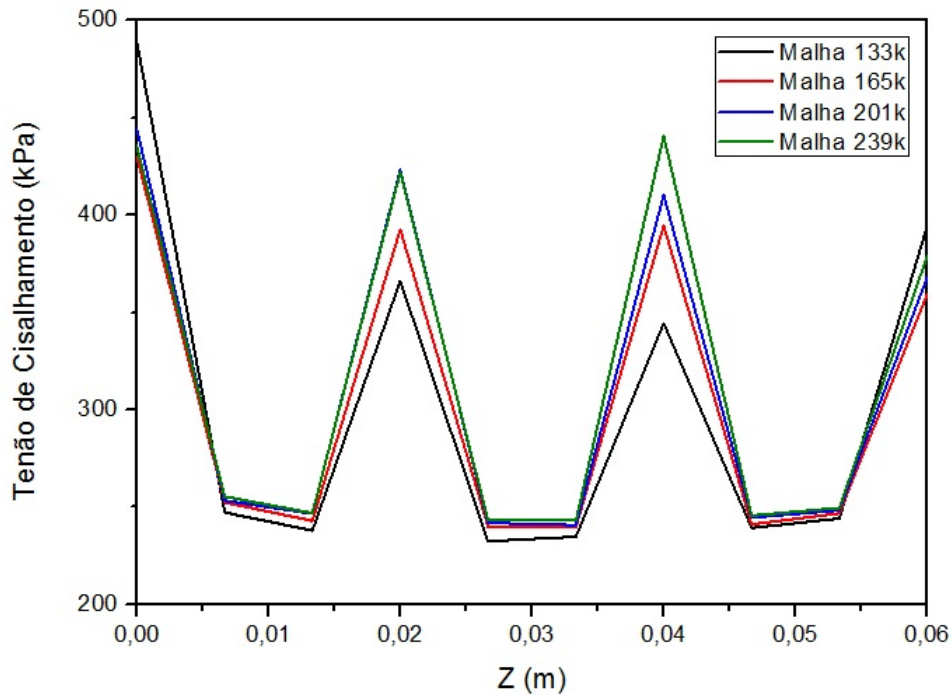


Figura 5.29: Comparação do perfil da tensão de cisalhamento ao longo do parafuso entre as malhas do domínio de fluido utilizadas nesta dissertação (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ )

Como o artigo de referência não aborda resultados da tensão de cisalhamento, a validação com base nessa variável não pode ser feita. Entretanto, pela análise das outras grandezas, foi possível concluir que a malha com 239k é satisfatória para a simulação desse parafuso.

## 5.2.2 Simulações não-Isotérmicas

Como o trabalho de WANG (2013) não aborda simulações não-isotérmicas, esta seção não apresenta qualquer referência para validação dos resultados. Observa-se que, para um resultado mais acurado, deveria ser feita preferencialmente outra análise de convergência de malha. Contudo, devido à similaridade da geometria, optou-se por conduzir as simulações não-isotérmicas com a malha convergida utilizada no estudo anterior.

Com base na metodologia de pesquisa das simulações, resumida na Tabela 4.1, obtiveram-se os resultados apresentados nas Figuras 5.30 até 5.38. A Figura 5.30 mostra o perfil de temperatura ao longo do parafuso para os quatro casos analisados.



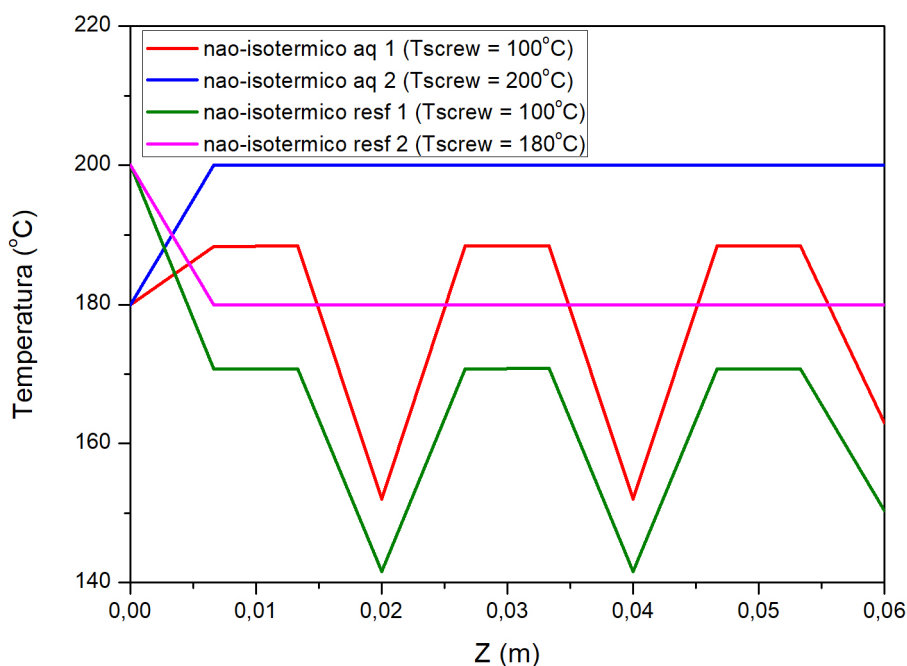


Figura 5.30: Perfil de temperaturas para os quatro casos não-isotérmicos (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

Pode ser observado que, no caso das simulações totalmente não-isotérmicas ("aq 1" e "resf 1"), a temperatura ao longo do parafuso apresenta aumentos e reduções devido às transferências de calor envolvidas entre barril, polímero e parafuso, além de refletirem as mudanças de geometria do sistema. Por outro lado, no caso das simulações quasi-isotérmicas ("aq 2" e "resf 2"), como o fluido está delimitado pelo barril e pelo parafuso mantidos na mesma temperatura ( $200^{\circ}\text{C}$  para "aq 2" e  $180^{\circ}\text{C}$  para "resf 2"), é esperado que não haja variação significativa no escoamento ao longo do parafuso, de forma é possível observar que o polipropileno alcança temperaturas constantes e iguais às respectivas temperaturas das superfícies as quais está em contato, ou seja,  $200^{\circ}\text{C}$  para "aq 2" e  $180^{\circ}\text{C}$  para "resf 2".

As Figuras 5.31, 5.32, 5.33 e 5.34 mostram, respectivamente, os perfis da taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade  $Z$  e pressão ao longo do parafuso considerado para o caso isotérmico e para os quatro casos não-isotérmicos. Esses gráficos têm em comum o fato das curvas isotérmicas serem muito próximas das curvas referentes às simulações "aq 2" e "resf 2". Esse resultado é esperado devido ao forte caráter isotérmico das simulações do tipo 2, como observado na Figura 5.30.

A Figura 5.31 indica que a taxa de cisalhamento varia mais nos escoamentos isotérmicos, o que pode ser explicado observando-se que quando o efeito da tempe-



ratura não está presente, o fenômeno principal que age sobre o polímero é a força cisalhante devido ao escoamento ao longo do parafuso. Nos casos não-isotérmicos, a dissipação viscosa causada pelo aumento da temperatura faz com que o cisalhamento seja menor por conta das menores viscosidades oriundas da geração de calor causada pela interação entre fluido e parafuso. Portanto, os perfis de temperatura ao longo da extrusora podem afetar de forma incisiva o desgaste do equipamento. Além disso, é possível perceber na Figura 5.31 alguns picos de taxa de cisalhamento. Conforme observado na Figura 5.19, que mostra planos de corte ao longo do parafuso, esses picos ocorrem nas regiões em que o polímero escoava pela distância muito pequena entre a rosca e o barril (*clearance*). Conseqüentemente, a força sobre o fluido nesses locais é maior e, portanto, a taxa de cisalhamento apresenta valores maiores que em outras regiões do parafuso. Portanto, essas parecem ser as regiões mais suscetíveis ao desgaste.

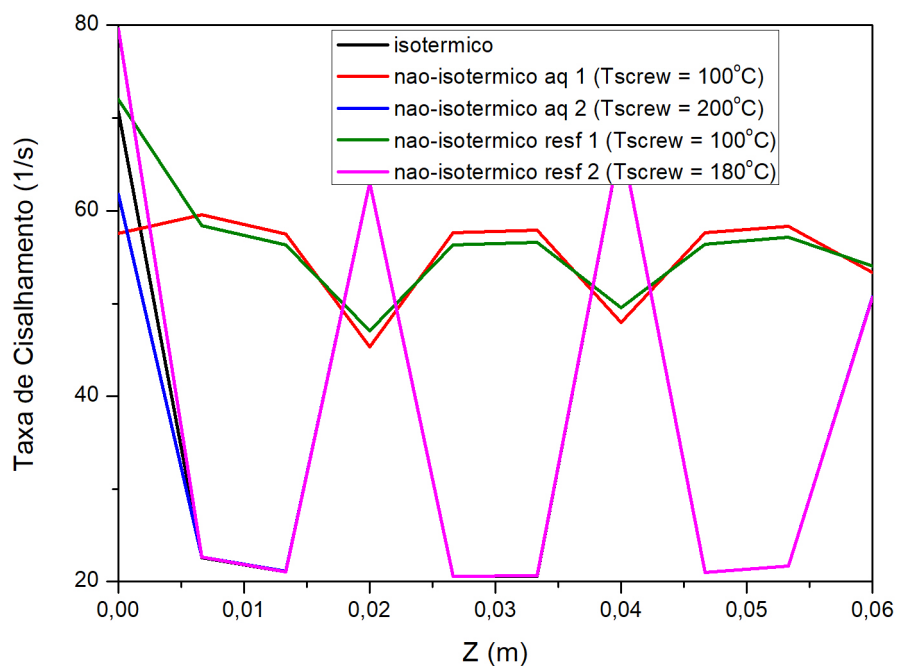


Figura 5.31: Perfis da taxa de cisalhamento nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

A explicação do comportamento da viscosidade pode ser explicado com base nos resultados obtidos para a taxa de cisalhamento. Como o polipropileno analisado é um polímero pseudoplástico, o aumento da taxa de cisalhamento reduz a viscosidade aparente, e vice-versa, como pode ser observado nas Figuras 5.31 e 5.32. Nas simulações do tipo 1, a variação da taxa foi menor que nas simulações do tipo 2 e, conseqüentemente, a variação da viscosidade apresentou comportamento oposto,

como esperado.

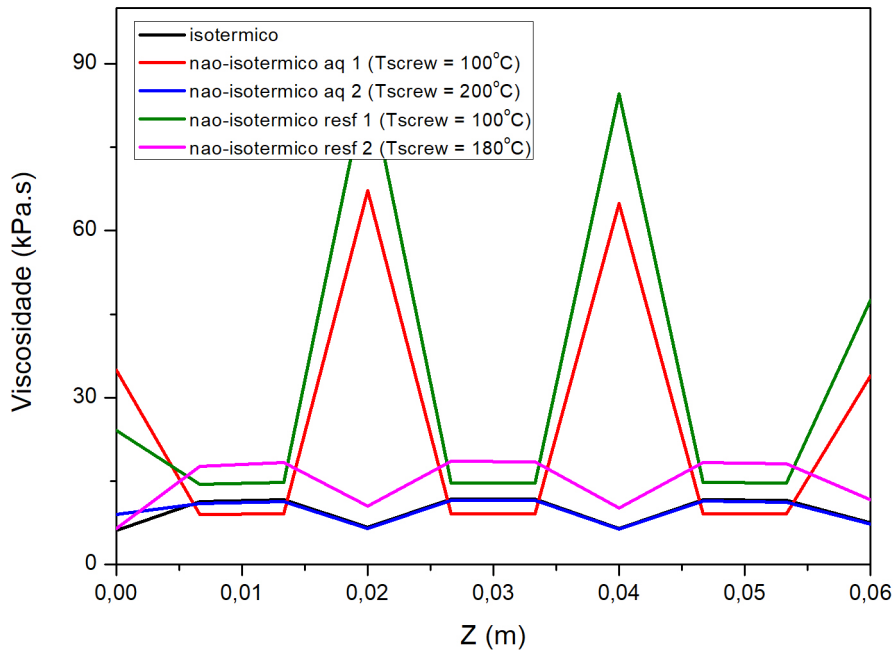


Figura 5.32: Perfis da viscosidade nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

O comportamento da viscosidade observado explica o comportamento da velocidade na Figura 5.33. Como a viscosidade das simulações do tipo 1 apresenta valores maiores que das simulações do tipo 2, o escoamento no primeiro caso é mais difícil, levando a velocidades menores que no segundo caso.

Em relação à pressão, cujo comportamento é mostrado na Figura 5.34, observa-se mais uma vez que as simulações do tipo 2 apresentaram resultados muito próximos ao do caso isotérmico, enquanto as simulações do tipo 1 apresentaram valores maiores por causa dos efeitos de dissipação viscosa, sendo que o calor liberado contribui para o aumento de pressão ao longo do parafuso.

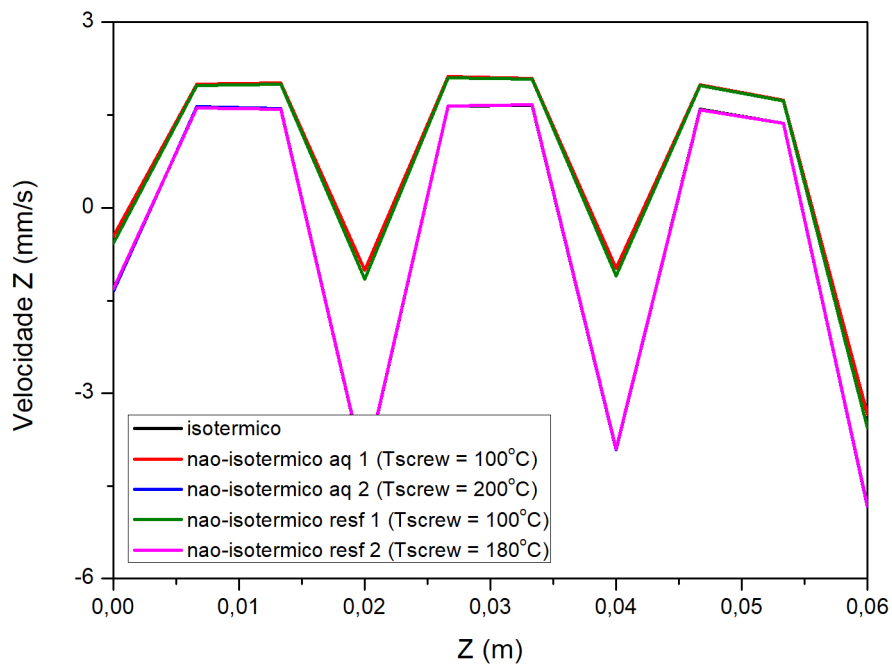


Figura 5.33: Perfis da velocidade axial nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

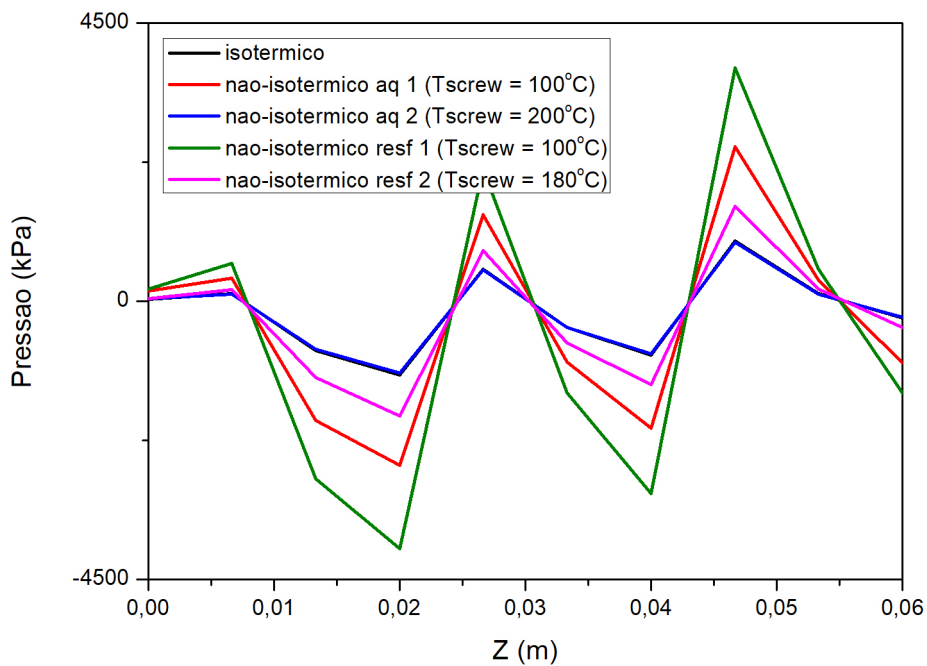


Figura 5.34: Perfis da pressão nos casos isotérmico e não-isotérmicos (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

A Figura 5.35 apresenta o perfil de dissipação viscosa para os quatro casos analisados. As simulações dos casos onde há resfriamento ("resf 1" e "resf 2") apresentam dissipação viscosa maior que nos casos onde há aquecimento ("aq 1" e "aq 2") porque na primeira situação o polímero flui em temperatura maior que a do barril e do parafuso, de forma que o fluxo polimérico é o principal responsável pela liberação de calor no sistema. Em seguida vem a dissipação viscosa para o caso "aq 1", já que a diferença de temperatura entre o polímero e o parafuso ( $180^{\circ}C$  e  $100^{\circ}C$ , respectivamente) é maior que a diferença de temperatura entre o polímero e o barril ( $180^{\circ}C$  e  $200^{\circ}C$ , respectivamente). Assim, a liberação de energia do polipropileno apresenta um saldo positivo, como pode ser observado no gráfico.

A dissipação de calor devida aos efeitos viscosos no caso "aq 2" é nula e isso pode ser explicado pelo fato de que o polipropileno está confinado, a uma temperatura menor ( $T = 180^{\circ}C$ ), entre duas regiões com temperaturas maiores que a do polímero e iguais entre si ( $T = 200^{\circ}C$ ), de forma que todo o calor do sistema é transferido homogeneamente para o fluido, não havendo, portanto, aumento significativo da temperatura por conta da dissipação.

A ordem decrescente de dissipação viscosa observada na Figura 5.35 ("resf 1" > "resf 2" > "aq 1" > "aq 2") pode ser visualizada resumidamente na Tabela 4.1 por meio da linha "sentido da transferência de calor".

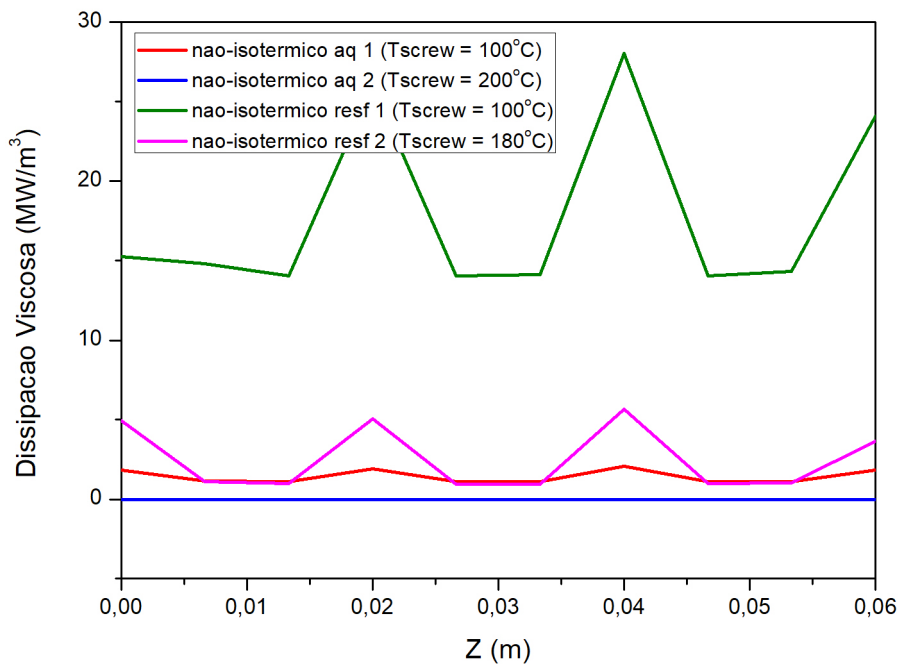


Figura 5.35: Perfis da dissipação viscosa nos casos não-isotérmicos (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

A análise da tensão de cisalhamento deve ser feita em  $Y = 8,5 \text{ mm}$  (Figura 5.36), na superfície do parafuso, e em  $Y = 9,9 \text{ mm}$  (Figura 5.37), na metade da distância entre a rosca do parafuso e o barril. Como esperado, a tensão de cisalhamento exibe comportamento muito diferente a depender do ponto em que é calculada, já que as diferentes regiões do parafuso causam efeitos distintos sobre o fluido em escoamento.

A análise da Figura 5.36, que mostra o perfil da tensão de cisalhamento na superfície do parafuso, permite concluir que a tensão é nula nos pontos por onde a rosca do parafuso passa, já que são regiões da geometria formadas por sólido e não fluido. Além disso, como esperado, as simulações do tipo 2 apresentam resultados muito próximos aos do caso isotérmico.

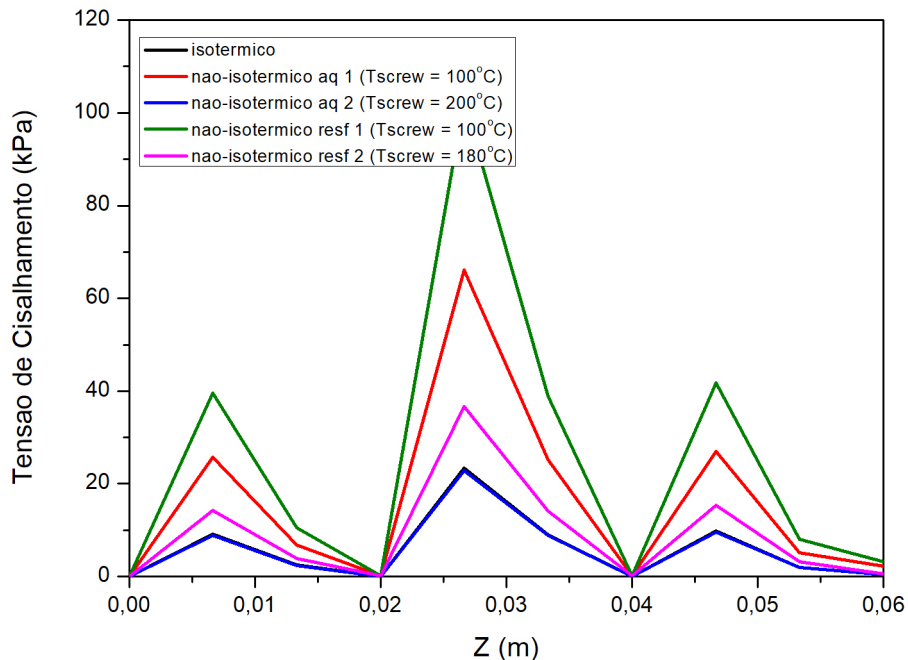


Figura 5.36: Perfis da tensão de cisalhamento nos casos isotérmico e não-isotérmico (em  $Y = 8,5 \text{ mm}$ ).

A Figura 5.37 apresenta o perfil da tensão de cisalhamento na metade da distância entre a rosca do parafuso e o barril. Observa-se que os valores máximos da tensão ocorrem nas regiões por onde passa a rosca do parafuso, já que o polímero escoar em uma região muito pequena, com apenas  $0,4 \text{ mm}$  de altura no caso do parafuso em estudo. Por esse motivo, os valores da tensão de cisalhamento em  $Y = 9,9 \text{ mm}$  são muito maiores que em  $Y = 8,5 \text{ mm}$ , como pode ser observado pela escala das Figuras 5.37 e 5.36, respectivamente.

A simulação isotérmica em  $Y = 9,9 \text{ mm}$  parece nula na Figura 5.37 por causa

da escala utilizada, mas a mudanças da escala para a faixa  $0 - 120 \text{ kPa}$  resulta no gráfico mostrado na Figura 5.38. Nota-se que, para o caso isotérmico, os perfis da tensão de cisalhamento ao longo do parafuso em  $Y = 8,5 \text{ mm}$  e em  $Y = 9,9 \text{ mm}$  é igual.

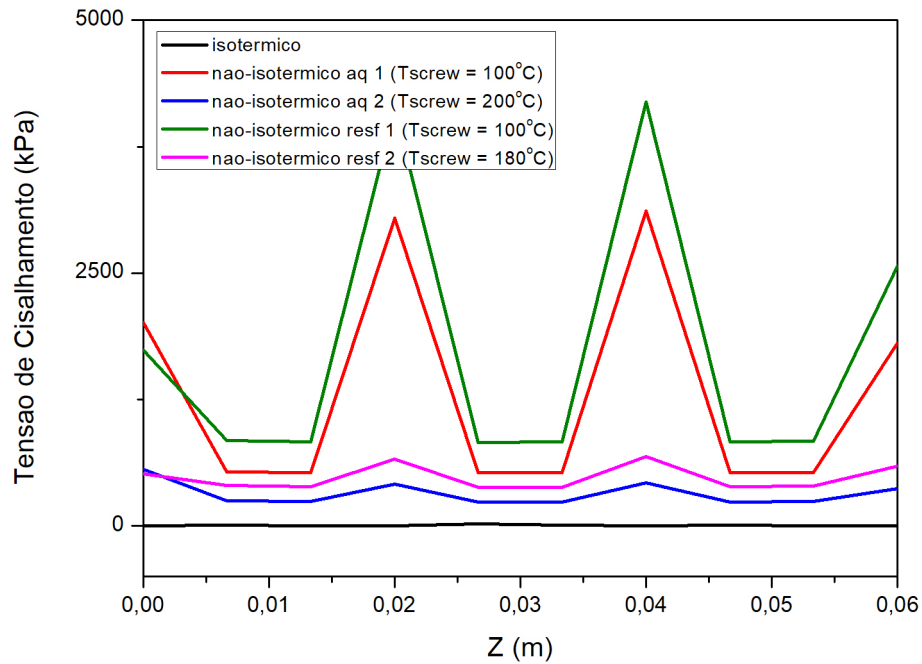


Figura 5.37: Perfis da tensão de cisalhamento nos casos isotérmico e não-isotérmico (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

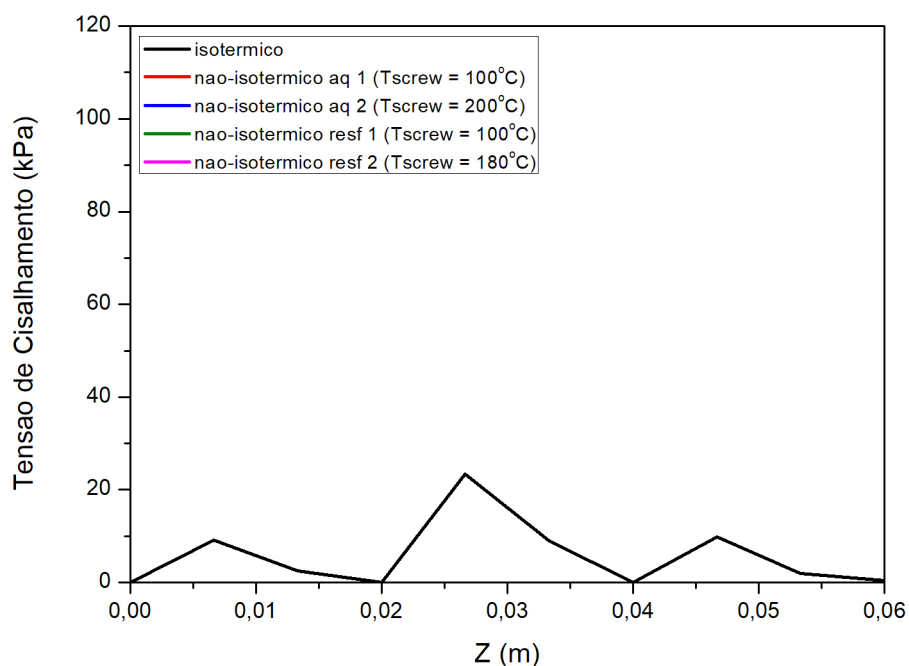


Figura 5.38: Perfis da tensão de cisalhamento no caso isotérmico (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

### 5.2.3 Comparação entre os *grades* H125 e H614 SP

Com base nos resultados das simulações isotérmica e não-isotérmica, estudou-se o comportamento não-isotérmico dos *grades* H125 e H614 SP, de menor e maior massa molar média, respectivamente, para os casos "aq 1" e "resf 1". Os resultados mostram os efeitos do escoamento de polipropileno em um processo de extrusão e as regiões do parafuso em que o cisalhamento é maior.

O perfil de temperaturas obtido, mostrado na Figura 5.39, é similar ao da Figura 5.30 e a análise pode ser feita de forma idêntica, pois ambas apresentam resultados muito similares ("aq 1" e "resf 1").

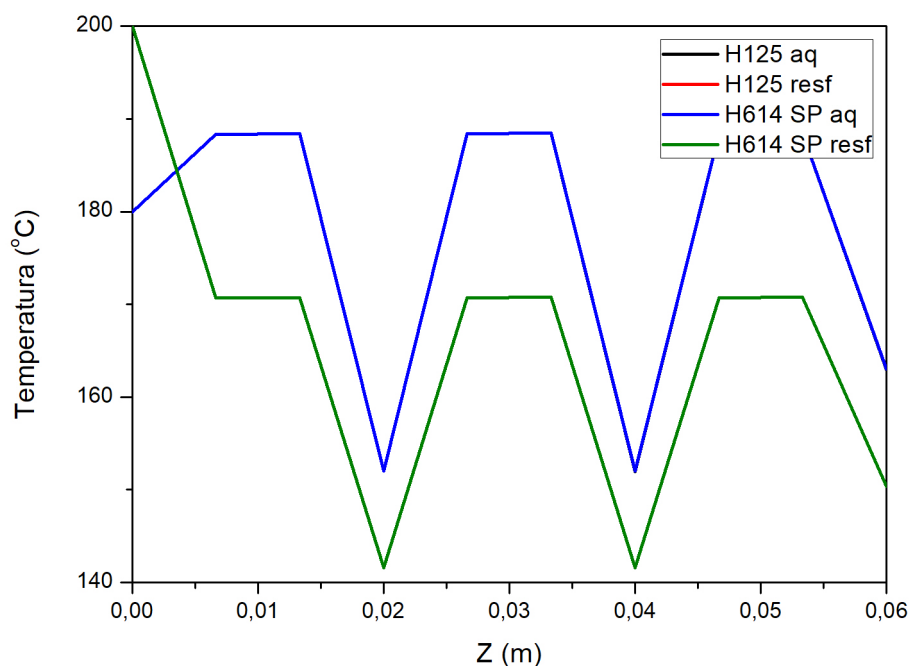


Figura 5.39: Perfis de temperatura nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

Na Figura 5.40 observa-se que, em ambas as simulações, o *grade* H614 SP apresentou ao longo do parafuso um perfil de taxa de cisalhamento com maior variação que o *grade* H125, o que pode ser explicado pelo fato da massa molar média do primeiro *grade* ser muito maior que a do segundo. Percebe-se também que a variação da taxa de cisalhamento obtida para o *grade* H125 é aproximadamente constante ao longo da geometria, indicando que o cisalhamento gerado por esse *grade* não varia muito com a região do parafuso por onde o polímero escoar. Por outro lado, como o *grade* H614 SP apresenta massa molar média muito maior que o *grade* H125, ao escoar entre a rosca do parafuso e o barril, nota-se uma significativa redução da taxa de cisalhamento. Esses dados reforçam a idéia de que o *grade* pode exercer influência significativa sobre o desgaste do equipamento, dado que o aumento da massa molar induz aparecimento de maiores tensões de cisalhamento e maior variação dessa variável ao longo da extrusora.



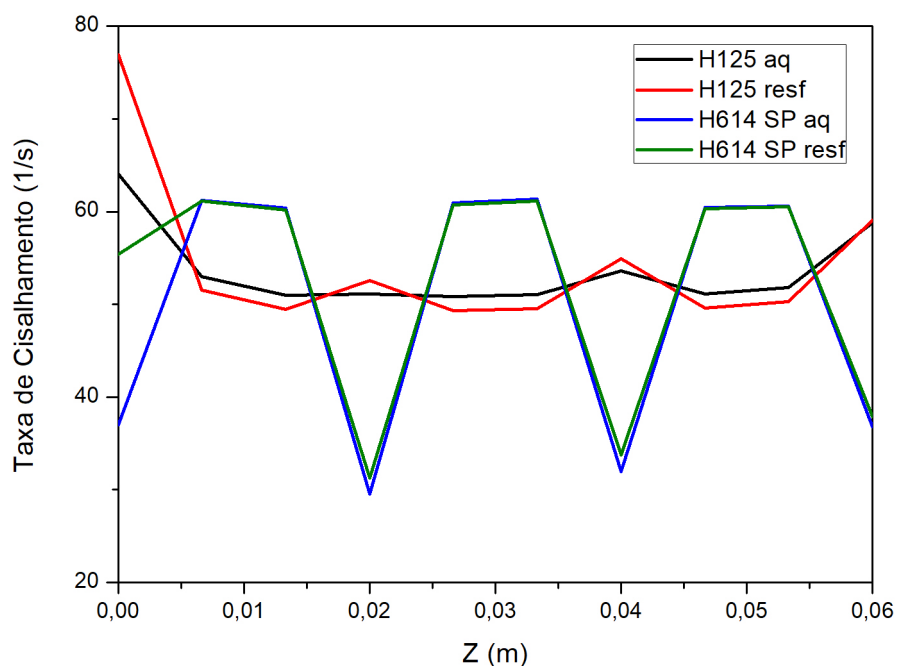


Figura 5.40: Perfis da taxa de cisalhamento nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

Como causa primordial do perfil da taxa de cisalhamento, mostra-se o perfil de viscosidade na Figura 5.41. Como o polipropileno é um fluido pseudoplástico, nas regiões em que a taxa de cisalhamento é baixa, a viscosidade é alta e vice-versa. Nota-se que o *grade* H125 apresenta viscosidade praticamente constante ao longo do parafuso devido à menor massa molar média.

A Figura 5.42 mostra o perfil da velocidade  $Z$  ao longo do parafuso. Observa-se que, para um mesmo *grade*, não existe diferença entre as simulações dos tipos "aq" e "resf". Isso acontece porque o fator dominante no comportamento da velocidade é a massa molar dos *grades*. Como esperado, o *grade* de polipropileno H614 SP apresenta massa molar média menor que o *grade* H125, de forma que oferece resistência ao escoamento maior e, portanto, resulta em variação de velocidade menor que a do *grade* H125.

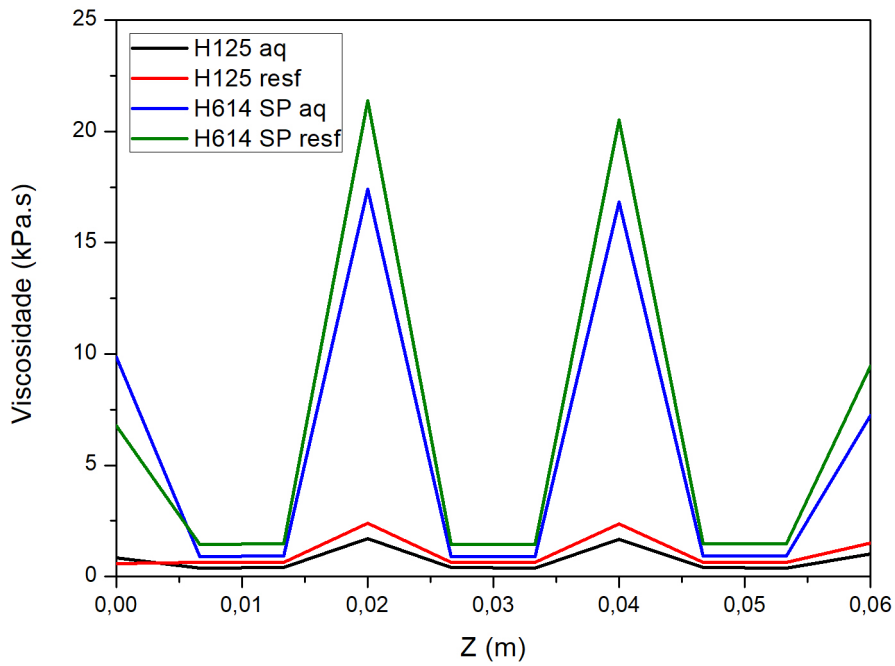


Figura 5.41: Perfis da viscosidade nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

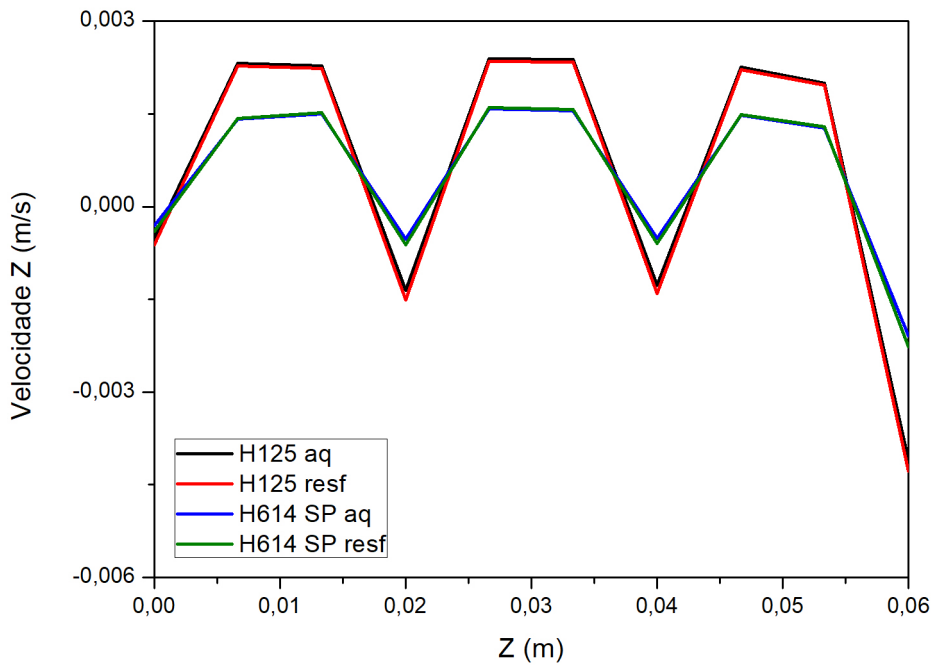


Figura 5.42: Perfis da velocidade axial nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

O comportamento da pressão ao longo do parafuso, mostrado na Figura 5.43, pode ser explicado com base na massa molar de cada *grade*. O *grade* com maior massa molar média, H614 SP, provoca pressões maiores, enquanto o *grade* com menor massa molar média, H125, leva a pressões menores. Nas regiões entre a rosca do parafuso e o barril, todos os *grades* apresentam picos de pressão, já que é um local em que o polímero escoava com mais dificuldade.

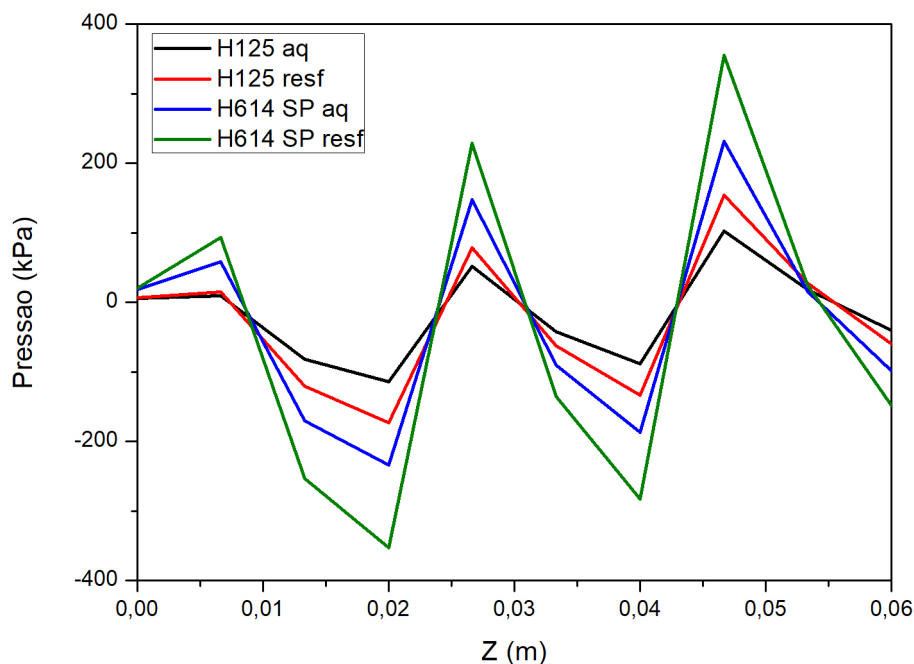


Figura 5.43: Perfis da pressão nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

Observa-se na Figura 5.44 que o *grade* H614 SP leva a valores de tensão de cisalhamento maiores que o *grade* H125. Esse resultado já podia ser esperado, já que o primeiro *grade* apresenta maior viscosidade, fazendo com que a tensão gerada sobre o parafuso seja naturalmente superior à tensão gerada pelo segundo. Nota-se também nessa figura que as tensões são nulas nas regiões onde a rosca está localizada e isso ocorre porque o perfil de tensão de cisalhamento foi calculado na superfície do parafuso.

Por outro lado, a Figura 5.45 mostra o perfil da tensão de cisalhamento ao longo do parafuso em  $Y = 9,9$ , entre a rosca e o barril. Diferentemente do caso da Figura 5.44, as regiões onde a rosca está localizada apresentam os maiores valores da tensão, já que são os locais onde o polímero escoava com mais dificuldade. Observa-se também a diferença entre os valores máximos de tensão entre os *grades*: as tensões geradas

no parafuso pelo *grade* H614 SP são aproximadamente sete vezes superior às tensões geradas pelo *grade* H125.

Além disso, nota-se, através da escala dos gráficos mostrados nas Figuras 5.44 e 5.45, a diferença da tensão de cisalhamento na superfície do parafuso e entre a rosca e o barril, respectivamente. No primeiro caso, a tensão máxima gerada pelos *grades* H614 SP e H125 são aproximadamente iguais a 11 *kPa* e 4 *kPa*, respectivamente. No segundo caso, essas tensões são aproximadamente iguais a 700 *kPa* e 150 *kPa*, respectivamente. Assim, é possível supor que o desgaste em uma extrusora pode ser menor quando são utilizados polímeros com menores viscosidades. Pode-se concluir também que os esforços viscosos na região entre a rosca do parafuso e o barril são muito superiores aos esforços viscosos na superfície do parafuso, o que pode explicar o fato dos desgastes serem maiores na rosca que na superfície do parafuso.

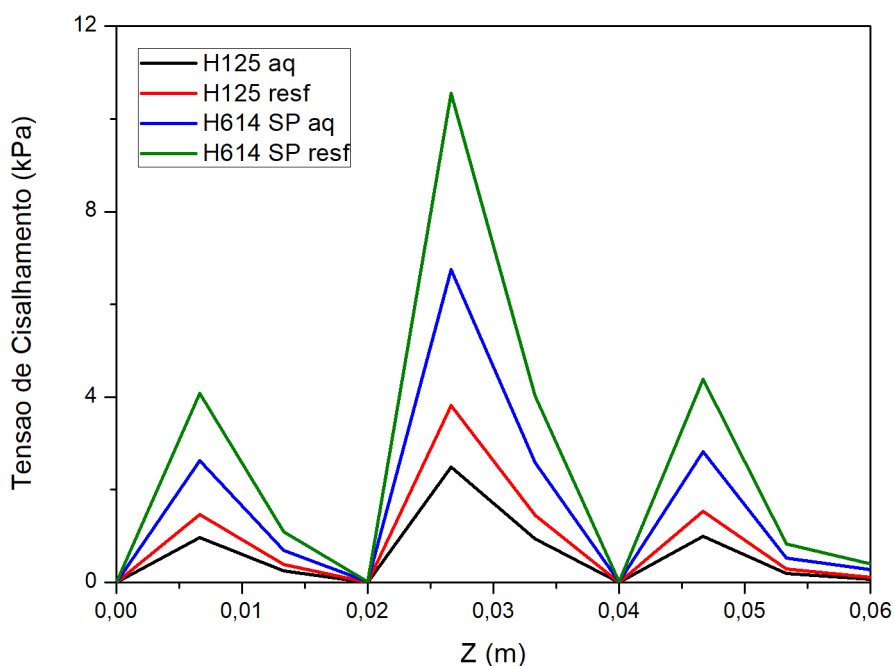


Figura 5.44: Perfis da tensão de cisalhamento nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 8,5 \text{ mm}$ ).

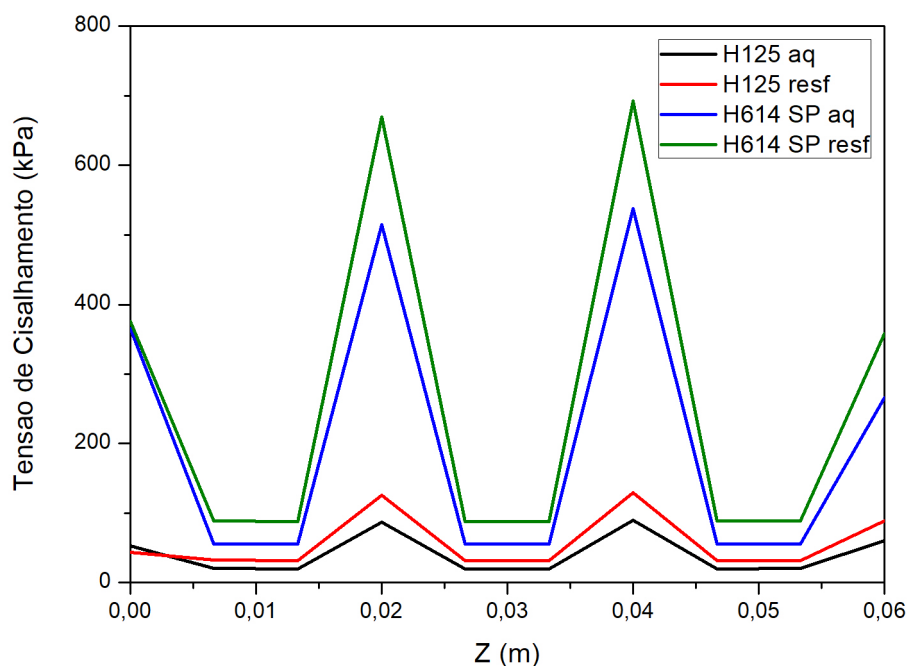


Figura 5.45: Perfis da tensão de cisalhamento nos dois casos não-isotérmicos para cada *grade* (em  $Y = 9,9 \text{ mm}$ ).

## 5.2.4 Comentários Adicionais

Inicialmente foi feito um estudo de convergência das malha do parafuso e do domínio do fluido, usando como referência o artigo de WANG (2013), com base na análise das variáveis taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade  $Z$  e pressão no ponto  $Y = 9,9 \text{ mm}$  em 10 pontos das malhas, para validar os resultados iniciais e possibilitar outros estudos. Assim, foram testadas duas malhas para o parafuso e quatro malhas para o domínio de fluido. As malhas do parafuso apresentaram, em geral, boa convergência em todos os pontos das malhas e para as quatro variáveis analisadas. Em relação às malhas do domínio de fluido, apesar de alguns pontos das malhas para as quatro variáveis analisadas terem apresentado alguma diferença, a maior parte dos pontos apresentou ótima convergência, de modo que é possível considerar as malhas como convergidas e condizentes com o trabalho de WANG (2013).

Como o processo de extrusão é fortemente dependente da temperatura, foram realizadas quatro simulações não-isotérmicas (Tabela 4.1), usando o modelo de Cross desenvolvido no Capítulo 3. As simulações isotérmicas foram incluídas no mesmo gráfico das simulações não-isotérmicas para efeito de comparação. Como esperado

por causa das condições selecionadas, as simulações "aq 2" e "resf 2" apresentaram um resultado muito próximo do comportamento isotérmico, enquanto as simulações "aq 1" e "resf 1" mostraram-se significativamente diferentes. Isso também pode ser observado com o auxílio das Figuras 5.37 e 5.38, que mostram os efeitos térmicos sobre a tensão de cisalhamento gerada sobre a rosca do parafuso. Em particular, observou-se que o parafuso e o barril exercem grande influência sobre os perfis de temperatura desenvolvidos e, conseqüentemente, sobre as viscosidades e taxas de cisalhamento. Em função do exposto, pode-se afirmar que as políticas de aquecimento e resfriamento da extrusora podem exercer grande influência sobre o desgaste das peças que constituem o equipamento.

Em última análise, foi feito um estudo comparativo entre um *grade* pouco viscoso e um muito viscoso, de forma a entender se a natureza do *grade* considerado pode afetar o desgaste do parafuso. Para isso, foram utilizadas as simulações não-isotérmicas "aq 1" e "resf 1". Como esperado, os comportamentos observados com os dois *grades* foram significativamente diferentes. As principais diferenças foram observadas em relação à tensão de cisalhamento. Observou-se que, assim como nas simulações não-isotérmicas analisadas, as maiores tensões foram obtidas na região entre a rosca do parafuso e o barril, sendo as tensões na superfície do parafuso muito inferiores. Além disso, obteve-se como resultado o fato do *grade* H614 SP gerar tensões de cisalhamento muito superiores ao *grade* H125, indicando que o processo de extrusão com um polímero muito viscoso pode induzir maior desgaste ao equipamento.

Um dado interessante que pode ser obtido com auxílio das Figuras 5.44 e 5.45 é a intensidade das tensões de cisalhamento entre os *grades* e entre as regiões analisadas:

- Superfície do parafuso: a tensão máxima gerada pelo *grade* H614 SP é aproximadamente 3 vezes superior à tensão máxima gerada pelo *grade* H125;
- Região entre rosca e barril (*clearance*): a tensão máxima gerada pelo *grade* H614 SP é aproximadamente 5 vezes superior à tensão máxima gerada pelo *grade* H125;
- *Grade* H614 SP: a tensão máxima gerada por esse *grade* na região entre a rosca e o barril é aproximadamente 70 vezes superior à tensão máxima gerada por ele na superfície do parafuso;
- *Grade* H125: a tensão máxima gerada por esse *grade* na região entre a rosca e o barril é aproximadamente 37,5 vezes superior à tensão máxima gerada por ele na superfície do parafuso.

Dessa forma, a minimização do desgaste pode ser alcançada se a operação do processo for conduzida de forma diferenciada para cada *grade* (por exemplo, utilizando o perfil térmico para manipular as tensões de cisalhamento desenvolvidas no equipamento). Contudo, independentemente do *grade* utilizado, parece lícito recomendar o revestimento da rosca do parafuso nos pontos em que as tensões causadas pelo cisalhamento são maiores.

# Capítulo 6

## Conclusão e Sugestões para Trabalhos Futuros

### 6.1 Conclusão

Observou-se inicialmente que existem diversas patentes e artigos sobre extrusão de polipropileno, sendo que a maior parte está relacionada ao uso do polímero como matéria-prima para formar algum produto. Existem alguns estudos que analisam a influência da extrusão sobre as características do polipropileno e poucos que analisam os efeitos associados a extrusoras ou seus componentes internos.

Os estudos sobre reologia de polipropileno se referem principalmente ao comportamento de diferentes tipos de polipropileno em determinadas condições de operação. Nenhum material foi encontrado sobre o desenvolvimento de modelos reológicos, especialmente os multivariáveis, cuja relevância é fundamental para o estudo mais detalhado do processo de extrusão de polímeros. Dessa forma, um dos objetivos da presente dissertação foi o desenvolvimento de um modelo reológico com dependência de três variáveis (taxa de cisalhamento, temperatura e massa molar média) a partir de dados experimentais disponíveis para diferentes *grades* de polipropileno. Inicialmente alguns modelos clássicos foram usados para estimação de parâmetros com o objetivo de avaliar que modelo poderia se ajustar melhor às curvas experimentais. Verificou-se que o melhor desempenho foi obtido com o modelo Cross. Por essa razão, estudos de estimação foram realizados de modo a acrescentar os efeitos de temperatura e de massa molar no modelo escolhido, obtendo-se um modelo Cross multivariável. Foi desenvolvido também um modelo reológico empírico com base no modelo *Power Law*, chamado de *Power Law* Modificado. O mesmo procedimento de estimação de parâmetros foi realizado para incluir os efeitos de temperatura e



massa molar média; entretanto, ainda que esse modelo tenha permitido obter um bom ajuste para as curvas experimentais, o desempenho obtido foi similar ao do modelo Cross e o seu uso em qualquer *software* de CFD exige implementação, o que traz uma importante desvantagem para sua aplicação.

Os estudos sobre desgaste de extrusoras são raros, sendo que o tipo de material mais relevante sobre esse tema é o fluxograma de resolução de problemas de desgaste em extrusoras industriais, em que o leitor identifica o problema de interesse e encontra o possível erro de forma bastante resumida. Com o objetivo de avaliar o efeito de condições de operação sobre o desgaste de extrusoras, uma modelagem matemática fenomenológica do tipo parâmetros concentrados e baseada em tanques de mistura foi realizada. Em particular, foi possível obter uma representação simplificada do processo de extrusão de polipropileno em uma extrusora industrial com base nos balanços de massa e energia. Para representar uma extrusora industrial, foram utilizadas informações obtidas em *sites* de compra e venda de extrusoras industriais e de fabricantes desses equipamentos para simular matematicamente a operação de uma extrusora real. Com esses dados, foi realizado um estudo de sensibilidade variando-se a vazão de alimentação, a rotação do parafuso, a massa molar de polipropileno e a constante de correção incluída nos termos de dissipação viscosa para considerar os desvios da idealidade. Foram estipulados valores constantes para a razão de *backflow* (para cada uma das três seções hipotéticas da extrusora), temperatura de entrada e temperatura do barril. Os raios do parafuso e do barril não foram incluídos na análise de sensibilidade. O principal resultado obtido, além de mostrar o domínio da dissipação viscosa axial em relação à dissipação viscosa tangencial sobre os perfis de temperatura da operação, está relacionado ao fato de que as condições de operação (vazão) e as características do *grade* processado podem influenciar muito os perfis de cisalhamento desenvolvidos e, portanto, o desgaste de peças que constituem extrusoras comerciais.

Observou-se também que estudos envolvendo simulação computacional via CFD estão relacionados principalmente à análise de grandezas envolvidas no escoamento de polímeros em extrusoras, de métodos numéricos aplicados às simulações e do tempo de residência e mistura em extrusoras. Nota-se que todos esses estudos têm em comum o fato de analisarem pequenas seções de extrusoras de laboratório.

O estudo de CFD foi realizado utilizando o *software Polyflow* da empresa ANSYS Inc., principalmente por ser um programa específico para a análise de escoamento de polímeros e por ser utilizado na maioria dos trabalhos encontrados sobre o tema. O primeiro passo do estudo de CFD foi a análise de convergência das malhas do parafuso e do domínio de fluido. Os resultados obtidos foram satisfatórios e a convergência de ambos foi alcançada e validada pelo artigo usado como principal

referência neste trabalho com base em simulações isotérmicas. Em seguida, foram realizadas simulações não-isotérmicas, incluindo dois casos de aquecimento e dois casos de resfriamento do polímero. Essas simulações foram comparadas com as simulações isotérmicas e os resultados mostraram que os efeitos térmicos podem ser muito significativos, como esperado, de forma que os efeitos não-isotérmicos devem ser necessariamente incluído nas simulações em que o objetivo é representar um processo de extrusão industrial.

Foram realizadas também simulações não-isotérmicas com o objetivo de comparar desempenhos obtidos com dois *grades* com diferentes massas molares médias, sendo um com menor e o outro com maior massa molar média. Como poderia ser esperado, os comportamentos observados com os dois *grades* foram muito distintos. Os principais resultados mostraram que a tensão de cisalhamento é muito maior na rosca do parafuso que em sua superfície, o que pode explicar eventuais desgastes nessa região de uma extrusora industrial. Observou-se também que a tensão gerada pelo polímero com maior massa molar média é muito superior à tensão gerada pelo polímero com menor massa molar média, de forma que é possível supor que o *grade* processado exerce forte influência sobre o desgaste do equipamento.

Deve-se observar, entretanto, que, apesar dos resultados alcançados indicarem alguns fatores que podem ter forte impacto na origem de desgaste em extrusoras, os perfis obtidos de taxa de cisalhamento, viscosidade, velocidade, pressão e temperatura podem ser muito diferentes em equipamentos industriais.

## 6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Podem ser sugeridas muitas linhas para trabalhos futuros nessa área, dentre as quais podem ser citados estudos de reologia, melhoria do modelo a parâmetros concentrados e condução de mais estudos de CFD.

Os estudos de reologia podem considerar, por exemplo, maior número de variáveis no modelo reológico obtido, principalmente o grau de taticidade do polipropileno, devido à sua importância para as características finais de uso do polímero após o processo de extrusão.

Em relação à modelagem matemática, é importante obter dados de uma extrusora industrial em operação para que o programa desenvolvido possa ser ajustado, de forma a ser usado no ambiente da indústria com o objetivo de monitorar operações reais. Além disso, sugere-se também o estudo da dinâmica do parafuso, de modo a avaliar os efeitos transientes e do tempo de residência no equipamento.

No caso envolvendo estudos de CFD, um estudo mais aprofundado do processo de extrusão real exige a inclusão do desenho detalhado da geometria do parafuso para que as simulações capturem os efeitos viscosos de forma mais realista possível. Além disso, sugere-se o estudo da interação sólido-fluido em ambiente computacional para representar o desgaste, permitindo um melhor entendimento desse processo até então pouco explorado nas literaturas técnica e científica.

# Referências Bibliográficas

- ALFARO, J. A. A., GRÜNSCHLOSS, E., EPPLE, S., et al., 2015, “Analysis of a Single Screw Extruder with a Grooved Plasticating Barrel – Part I : The Melting Model”, .
- ANDERSEN, P., 2017, “FUNDAMENTALS OF TWIN-SCREW COMPOUNDING : KNEADING BLOCK PERFORMANCE CHARACTERISTICS”, pp. 1083–1087.
- ANDREAS, T., 2015. “Device for wear characterisation and extruder assembly” . .
- ANSYS, 2017a, “ANSYS Polyflow User’s Guide”, , n. January.
- ANSYS, 2017b, “ANSYS Meshing User’s Guide”, , n. January.
- ANSYS, 2019, “ANSYS Polyflow Tutorial Guide”, , n. January.
- ARIFF, Z. M., ARIFFIN, A., JIKAN, S. S., et al., 2012, “Rheological Behaviour of Polypropylene Through Extrusion and Capillary Rheometry”, .
- ARIS, M., VINCENT, M., 2017, “Viscoelastic rheology in the melting and crystallization domain : Application to polypropylene copolymers”, doi: 10.1002/app.44690.
- AVRAY, M. D., ISAMBERT, A., 2010, “Development of a global mathematical model for reactive extrusion processes in corotating twin- screw extruders”, v. 28, n. 2004, pp. 769–774. ISSN: 1570-7946. doi: 10.1016/S1570-7946(10)28129-4.
- AZIZI, H., GHASEMI, I., 2003, “Reactive extrusion of polypropylene: Production of controlled-rheology polypropylene (CRPP) by peroxide-promoted degradation”, *Polymer Testing*, v. 23, n. 2, pp. 137–143. ISSN: 01429418. doi: 10.1016/S0142-9418(03)00072-2.

- BRASKEM, 2020. “Braskem”. Disponível em: <<https://www.braskem.com.br/busca-de-produtos?utm{ }source=Site{&}utm{ }medium=Menu{&}utm{ }campaign=Busca-de-Produtos>>.
- BUE, D., NØRGAARD, H., JAGENTEUFEL, R., et al., 2017, “Rheology of high melt strength polypropylene for additive manufacturing”, doi: 10.5185/amlett.2017.1450.
- CAMPBELL, G. A., SPALDING, M. A., 2013, “Analyzing and Troubleshooting Single-Screw Extruders”, .
- CANEVAROLO, S., 2000, “Chain scission distribution function for polypropylene degradation during multiple extrusions”, v. 709, pp. 71–76.
- CANEVAROLO, S., 2006, *Ciência dos Polímeros*, v. 1.
- CANEVAROLO, S., BABETTO, A. C., 2002, “Effect of Screw Element Type in Degradation of Polypropylene upon Multiple Extrusions”, v. 21, n. 4, pp. 243–249. doi: 10.1002/adv.10028.
- CHANG, D., WHITE, J. L., 2003, “Experimental study of maleation of polypropylene in various twin-screw extruder systems”, *Journal of Applied Polymer Science*, v. 90, n. 7, pp. 1755–1764. ISSN: 00218995. doi: 10.1002/app.12744.
- CHEN, A.-F., HUANG, H.-X., GUAN, W.-S., 2015, “Comparison of Superimposed Effects in High-Shear-Rate Capillary Rheology of Polystyrene , Polypropylene , and Linear Low-Density Polyethylene Melts”, doi: 10.1002/pen.
- CHIKHALIKAR, K., DESHPANDE, A., POL, H., et al., 2015, “Long Chain Branched Impact Copolymer of Polypropylene : Microstructure and Rheology”, doi: 10.1002/pen.
- COSTA, H. M., 2005, “Rheological properties of polypropylene during multiple extrusion Rheological properties of polypropylene during multiple extrusion”, , n. December 2017. doi: 10.1016/j.polymertesting.2004.06.006.
- CRAWFORD, C. B., QUINN, B., 2017, “Polypropylene: Physiochemical Properties and Degradation”, .
- CZECHOWSKA, J., ZIMA, A., CZECHOWSKA, J., et al., 2017, “Influence of magnesium and silver ions on rheological properties of hydroxyapatite / chitosan / calcium sulphate based bone cements”, , n. September. doi: 10.1016/j.ceramint.2017.08.197.

- DEWASME, L., THIRY, J., DEWASME, L., et al., 2016, “Modeling, sensitivity analysis and parameter identification of a twin screw extruder”, *IFAC-PapersOnLine*, v. 49, n. 7, pp. 1127–1132. ISSN: 2405-8963. doi: 10.1016/j.ifacol.2016.07.354. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ifacol.2016.07.354>>.
- DOUFAS, A. K., RICE, L., THURSTON, W., et al., 2013, “Shear and extensional rheology of polypropylene melts : Experimental and modeling studies Shear and extensional rheology of polypropylene melts : Experimental and modeling studies”, v. 95, n. May 2014. doi: 10.1122/1.3523626.
- DRABEK, J., ZATLOUKAL, M., 2016, “Evaluation of Thermally Induced Degradation of Branched Polypropylene by Using Rheology and Different Constitutive Equations”, doi: 10.3390/polym8090317.
- DRABEK, J., ZATLOUKAL, M., MARTYN, M., 2018, “Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics Effect of molecular weight on secondary Newtonian plateau at high shear rates for linear isotactic melt blown polypropylenes”, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 251, n. June 2017, pp. 107–118. ISSN: 0377-0257. doi: 10.1016/j.jnnfm.2017.11.009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2017.11.009>>.
- DURCZAK, K., 2017, “Adam Ekielski The use of wavelet analysis to assess the degree of wear of working elements of food extruders Wykorzystanie analizy falkowej do oceny stopnia zużycia elementów roboczych ekstruderów spożywczych \*”, v. 19, n. 4, pp. 560–564.
- EBEID, S., FIKRY, I., 2015, “Effect of Geometry and Rotational Speed on the Axial Pressure Profile of a Single Screw Extrusion”, , n. February 2015.
- EITZLMAYR, A., KHINAST, J., 2015a, “Co-rotating twin-screw extruders : Detailed analysis of conveying elements based on smoothed particle hydrodynamics . Part 1 : Hydrodynamics”, *Chemical Engineering Science*, pp. 1–19. ISSN: 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2015.04.055. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2015.04.055>>.
- EITZLMAYR, A., KHINAST, J., 2015b, “Co-rotating twin-screw extruders : Detailed analysis of conveying elements based on smoothed particle hydrodynamics . Part 2 : Mixing”, *Chemical Engineering Science*, v. 134, pp. 880–886. ISSN: 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2015.05.035. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2015.05.035>>.

- EITZLMAYR, A., KOSCHER, G., REYNOLDS, G., et al., 2014, “Mechanistic modeling of modular co-rotating twin-screw extruders”, *International Journal of Pharmaceutics*, v. 474, n. 1-2, pp. 157–176. ISSN: 0378-5173. doi: 10.1016/j.ijpharm.2014.08.005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijpharm.2014.08.005>>.
- EITZLMAYR, A., MATIC, J., KHINAST, J., 2017, “Analysis of Flow and Mixing in Screw Elements of Corotating”, v. 63, n. 6. doi: 10.1002/aic.
- EUSTERHOLZ, S., ELGETI, S., 2018, “CFD-based optimization in plastics extrusion”, *AIP Conference Proceedings*, v. 1960. ISSN: 15517616. doi: 10.1063/1.5034961.
- FADEYIBI, A., OSUNDE, Z. D., AGIDI, G., et al., 2016, “Design of single screw extruder for homogenizing bulk solids”, *Agricultural Engineering International: CIGR Journal*, v. 18, n. 4, pp. 222–231. ISSN: 16821130.
- FADIGAS, C. S., 2006, “Controlled Degradation of Polypropylene in Industrial Extruders”, pp. 552–570. doi: 10.1002/mame.200500424.
- FARD, A. S., ANDERSON, P. D., 2013, “Simulation of distributive mixing inside mixing elements of co-rotating twin-screw extruders”, *Computers and Fluids*, v. 87, pp. 79–91. ISSN: 00457930. doi: 10.1016/j.compfluid.2013.01.030. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2013.01.030>>.
- FEL, E., MASSARDIER, V., MÉLIS, F., et al., 2014, “Residence Time Distribution in a High Shear Twin Screw Extruder”, pp. 71–80.
- FELIX, M., RAINER, M., SOEREN, W., 2008. “Measuring device and method for measuring the level of erosion of drill holes for extruder screws.pdf” . .
- FERZIGER, J. H., PERIC, M., 2002. “Computational Methods for Fluid Dynamics” . .
- FOX, R., DEDIK, A., HOFFMANN, P., et al., 2005, “Influence of particle size on XRF wear analysis in plastics processing”, , n. January, pp. 218–224. doi: 10.1002/xrs.796.
- GIGLIOTTI, L., PINHO, S. T., 2015, “Multiple length / time-scale simulation of localized damage in composite structures using a Mesh Superposition Technique”, *COMPOSITE STRUCTURE*, v. 121, pp. 395–405. ISSN: 0263-8223. doi: 10.1016/j.compstruct.2014.11.005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruct.2014.11.005>>.

- GUPTA, S., YUAN, X., CHUNG, T. C. M., et al., 2016, “Influence of hydrogen bonding on the melt rheology of polypropylene”, *Polymer*, v. 107, pp. 223–232. ISSN: 0032-3861. doi: 10.1016/j.polymer.2016.11.027. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2016.11.027>>.
- HE, Q., HUANG, J., SHI, X., et al., 2017, “Numerical simulation of 2D unsteady shear-thinning non-Newtonian incompressible fluid in screw extruder with fictitious domain method”, *Computers and Mathematics with Applications*, v. 73, n. 1, pp. 109–121. ISSN: 0898-1221. doi: 10.1016/j.camwa.2016.11.005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.camwa.2016.11.005>>.
- JUERGEN, BECKER KLAUS; SCHULZ, N., 2003. “Method for determining wear in extrusion machines” . .
- JUNHONG, W., 2003, “Polyflow” , .
- KE, Z., ZHONGQI, H. E., SHUPAN, Y. I. N., et al., 2014, “Numerical simulation for exploring the effect of viscosity on single- screw extrusion process of propellant”, *Procedia Engineering*, v. 84, pp. 933–939. ISSN: 1877-7058. doi: 10.1016/j.proeng.2014.10.518. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.proeng.2014.10.518>>.
- KENNEDY, A. O., PENLINGTON, R., BUSAWON, K., et al., 2014, “A novel modeling approach to the mixing process in twin-screw extruders A Novel Modeling Approach to the Mixing Process in Twin- Screw Extruders”, v. 29, n. February 2015. doi: 10.1063/1.4873728.
- KETTEMANN, J., AVILA-ALFARO, J. A., BONTEN, C., 2019, “Experimental investigation and improved modeling of the melting process in single-screw extruders with a grooved plasticizing barrel”, *AIP Conference Proceedings*, v. 2055. ISSN: 15517616. doi: 10.1063/1.5084859.
- KHAN, J. G., DALU, R. S., GADEKAR, S. S., 2014, “DEFECTS IN EXTRUSION PROCESS AND THEIR”, v. 3, n. 3.
- KUMAR, A., GANJYAL, G. M., JONES, D. D., et al., 2008, “Modeling residence time distribution in a twin-screw extruder as a series of ideal steady-state flow reactors”, v. 84, pp. 441–448. doi: 10.1016/j.jfoodeng.2007.06.017.
- LAFLEUR, P., VERGNES, B., 2014, *Polymer Extrusion*. ISBN: 9781569905166.
- LEWANDOWSKI, A., WILCZYŃSKI, K., 2017, “Computer modeling for polymer processing co-rotating twin screw extrusion – nonconventional screw



- configurations”, *Mechanik*, , n. 4, pp. 282–287. ISSN: 0025-6552. doi: 10.17814/mechanik.2017.4.47.
- LEWANDOWSKI, A., WILCZYŃSKI, K., 2018, “General model of polymer melting in extrusion process”, , n. 6, pp. 444–452.
- LEWIS, R., NITHIARASU, P., SEETHARAMU, K., 2004, *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. John Wiley & Sons.
- LIU, K., KNEIDINGER, C., SCHAFFLER, G., et al., 2015, “Experimental analysis of the influence of pellet shape on single screw extrusion”, v. 41716, pp. 1–9. doi: 10.1002/app.41716.
- MACAULEY, N. J., HARKINJONES, E. M. A., MURPHY, W. R., et al., 1998, “The Influence of Extrusion Parameters on the Mechanical Properties of Polypropylene Sheet”, v. 3, n. 4.
- MAIER, C., CALAFUT, T., 1998, *Polypropylene: The Definitive User’s Guide and Data Book*. ISBN: 1884207588.
- MANRICH, S., 2005, *Processamento de Termoplásticos*.
- MAROUFKHANI, M., GOLSHAN, N., 2015, “Melt rheology of linear and long-chain branched polypropylene blends”, *Iranian Polymer Journal (English Edition)*, v. 24, n. 9, pp. 715–724. ISSN: 17355265. doi: 10.1007/s13726-015-0357-9.
- MARSCHIK, C., ROLAND, W., MIETHLINGER, J., 2018, “A Network-Theory-Based Comparative Study of Melt-Conveying Models in Single-Screw Extrusion :”, doi: 10.3390/polym10080929.
- MARSCHIK, C., OSSWALD, T. A., ROLAND, W., et al., 2019, “Numerical Analysis of Mixing in Block-Head Mixing Screws”, doi: 10.1002/pen.24968.
- MIKULIONOK, I., 2018, “Modeling the Proces of Polymers Processing in Twin-Screw Extruder”, pp. 35–44. doi: 10.15587/1729-4061.2018.139886.
- NAKASUMI, S., SUZUKI, K., OHTSUBO, H., 2008, “Crack growth analysis using mesh superposition technique and X-FEM”, , n. December 2007, pp. 291–304. doi: 10.1002/nme.
- NAKAYAMA, Y., TAKEMITSU, H., KAJIWARA, T., 2017, “Improving mixing characteristics with a pitched tip in kneading elements in twin-screw extrusion”, doi: 10.1002/aic.

- ORIGINLAB CORPORATION, 2009, “OriginPro 8.1 - Getting Started Booklet”, .
- PACHNER, S., AFFENZELLER, M., MIETHLINGER, J., 2017, “A Generalized 2D Output Model of Polymer Melt Flow in Single-Screw Extrusion”, , n. May. doi: 10.3139/217.3326.
- PARDO, N. S., ARISTIZÁBAL, R. E., 2017, “Análisis de Falla de los Bujes del Tornillo”, .
- PARK, S. Y., LYU, M. Y., 2018, “Simulation of Non-Isothermal Non-Newtonian Flow Behavior of PP for Various Injection Molding Screws and Comparison with Experimental Results”, *Macromolecular Research*, v. 26, n. 8, pp. 744–754. ISSN: 20927673. doi: 10.1007/s13233-018-6093-1.
- PRATA, D. M., 2009, “Reconciliação Robusta de Dados para Monitoramento em Tempo Real”, .
- QAMAR, S. Z., SHEIKH, A. K., ARIF, A. F. M., et al., 2007, “Monte Carlo simulation of extrusion die life”, v. 2, pp. 96–106. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2007.08.062.
- RABELLO, M., DE PAOLI, M. A., 2000, “Aditivación de Termoplásticos”, .
- RAINER, M., 2006. “Measuring device for detecting the state of wear of the bore walls of two interpenetrating housing bores”. .
- RAMOS, D., HELSON, M., 2007, “Degradation of polypropylene (PP) during multiple extrusions : Thermal analysis , mechanical properties and analysis of variance”, v. 26, pp. 676–684. doi: 10.1016/j.polymertesting.2007.04.003.
- RAUWENDAAL, C., 2014, *Polymer Extrusion*. ISBN: 9781569905166.
- RAUWENDAAL, C., 2016, “Effective troubleshooting of extrusion problems”, *AIP Conference Proceedings*, v. 1779, n. October. ISSN: 15517616. doi: 10.1063/1.4965491.
- REITZ, E., PODHAISKY, H., ELY, D., et al., 2013, “Residence time modeling of hot melt extrusion processes”, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, v. 85, n. 3, pp. 1200–1205. ISSN: 0939-6411. doi: 10.1016/j.ejpb.2013.07.019. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ejpb.2013.07.019>>.

- ROBINSON, M., CLEARY, P. W., 2019, “Effect of geometry and fill level on the transport and mixing behaviour of a co-rotating twin screw extruder”, pp. 227–247.
- ROLAND, W., 2018, “Heuristic Analysis of Viscous Dissipation in Single-Screw Extrusion”, doi: 10.1002/pen.24817.
- ROLAND, W., KOMMENDA, M., MARSCHIK, C., 2019, “Extended Regression Models for Predicting the Pumping Capability and Viscous Dissipation of Two-Dimensional Flows in Single-Screw Extrusion”, doi: 10.3390/polym11020334.
- SCHWAAB, M., PINTO, J. C., 2007a. “Análise de Dados Experimentais I: Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros”. a.
- SCHWAAB, M., PINTO, J. C., 2007b, “Optimum reference temperature for reparameterization of the Arrhenius equation . Part 1 : Problems involving one kinetic constant”, v. 62, pp. 2750–2764. doi: 10.1016/j.ces.2007.02.020.
- SCHWAAB, M., LEMOS, L. P., PINTO, J. C., 2007, “Optimum reference temperature for reparameterization of the Arrhenius equation . Part 2 : Problems involving multiple reparameterizations”, v. 63. doi: 10.1016/j.ces.2008.03.010.
- SCHWAAB, M., BISCAIA, E. C., MONTEIRO, J. L., et al., 2008, “Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 6, pp. 1542–1552. ISSN: 00092509. doi: 10.1016/j.ces.2007.11.024.
- SELLITTO, A., BORRELLI, R., CAPUTO, F., et al., 2014, “3D global-local analysis using mesh superposition method”, v. 578, pp. 505–508. doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.577-578.505.
- SINGH, S. K., MUTHUKUMARAPPAN, K., 2016, “Rheological Characterization and CFD Simulation of Soy White Flakes Based Dough in a Single Screw Extruder”, *Journal of Food Process Engineering*, v. 40, n. 2. ISSN: 17454530. doi: 10.1111/jfpe.12368.
- SMITS, A. J., HULTMARK, M., 2015, “Errors in parallel-plate and cone-plate rheometer measurements due to sample underfill”, doi: 10.1088/0957-0233/26/1/015301.

- STEPHAN, S., MARKUS, B., JOACHIM, W. E., et al., 2016, “Optimization of twin screw extrusion using CFD for polymer/nanoclay composites”, *AIP Conference Proceedings*, v. 1779. ISSN: 15517616. doi: 10.1063/1.4965472.
- SUGIMOTO, M., TANAKA, T., MASUBUCHI, Y., et al., 1998, “Effect of Chain Structure on the Melt Rheology of Modified Polypropylene”, .
- SUGIMOTO, M., HYUN, K., USHIODA, T., et al., 2006, “Melt rheology of long-chain-branched polypropylenes”, , n. October. doi: 10.1007/s00397-005-0065-z.
- SURESH, A., CHAKRABORTY, S., KARGUPTA, K., et al., 2008, “Low-dimensional models for describing mixing effects in reactive extrusion of polypropylene”, v. 63, pp. 3788–3801. doi: 10.1016/j.ces.2008.04.045.
- SWAIN, R., STANZIOLA, R., 1999. “Determination of wear in extruders and injection molding machines involves combining two different materials.pdf”. .
- SYKUTERA, D., WAJER, L., KO, A., et al., 2018, “The Influence of Processing Conditions on the Polypropylene Apparent Viscosity Measured Directly in the Mold Cavity”, v. 1700056, pp. 1–6. doi: 10.1002/masy.201700056.
- TA INSTRUMENT, 2019, “Rheology: Theory and Application”, .
- TAGLIAVINI, G., 2018, “CFD Simulation of a Co-rotating Twin-screw Extruder : Validation of a Rheological Model for a Starch-Based Dough for Snack Food”, pp. 1–13. doi: 10.1515/ijfe-2017-0116.
- TODA, K., 2008. “Extruder has residual lifetime judging unit which determines whether residual lifetime of thrust bearing”. .
- TRIPPE, J., SCHÖPPNER, V., 2019, “Modeling of the dissipation in the solid conveying section in single screw extruders Modeling of the Dissipation in the Solid Conveying Section in Single Screw Extruders”, v. 030036, n. February. doi: 10.1063/1.5088294.
- VANANDRUEL, N., 1995, “SIMULATION OF GLASS PROCESSES WITH POLYFLOW, A FINITE ELEMENT PROGRAM”, v. 40.
- VAUCHEL, P., KAAS, R., ARHALIASS, A., et al., 2010, “Dynamical modelling of a reactive extrusion process : Focus on residence time distribution in a fully intermeshing co-rotating twin-screw extruder and application to an alginate extraction process”, v. 65, pp. 3313–3321. doi: 10.1016/j.ces.2010.02.019.

- VERSTEEG, H., MALALASEKERA, W., 1995. “An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method” . .
- WANG, J., 2013, “Influence of Helical Grooved Structure on Mixing Process in a Single Screw Extruder”, *Key Engineering Materials*, v. 561, pp. 212–217. doi: 10.4028/www.scientific.net/kem.561.212.
- WHITE, F., 2006, *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill. ISBN: 007124493X.
- WIKIPEDIA, 2019. “Polypropylene”. Dezembro. Disponível em: <<https://en.wikipedia.org/wiki/Polypropylene>>.
- WILCZYŃSKI, K., WHITE, J. L., 2003, “Melting Model for Intermeshing Counter-Rotating Twin-Screw Extruders”, v. 43, n. 10, pp. 29–32.
- WILCZYŃSKI, K., KAMILA BUZIAK, KRZYSZTOF J. WILCZYŃSKI, et al., 2018, “Computer Modeling for Single-Screw Extrusion of Wood-Plastic Composites”, doi: 10.3390/polym10030295.
- WITTEK, P., PEREIRA, G. G., EMIN, M. A., et al., 2018, “Accuracy analysis of SPH for flow in a model extruder with a kneading element”, *Chemical Engineering Science*, v. 187, pp. 256–268. ISSN: 00092509. doi: 10.1016/j.ces.2018.05.007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.05.007>>.
- WOO, J., WOONG, J., HYUP, Y., 2003, “Efficient element analysis using mesh superposition technique”, v. 39, pp. 619–638.
- WU, T., YANG, F., KANG, J., et al., 2012, “Effect of Stereodefects Distribution on Rheological Behavior of Isotactic Polypropylene”, , n. December 2011, pp. 1838–1850. doi: 10.1080/00222348.2012.659985.
- XU, B., YU, H., TURNG, L. S., 2017, “Distributive mixing in a corotating twin screw channel using Lagrangian particle calculations”, *Advances in Polymer Technology*, v. 37, n. 6, pp. 2215–2229. ISSN: 10982329. doi: 10.1002/adv.21880.
- XU, B., LIU, Y., HE, L., et al., 2018, “Numerical study of mixing dynamics inside the novel elements of a corotating nontwin screw extruder”, *Advances in Polymer Technology*, v. 37, n. 7, pp. 2478–2496. ISSN: 10982329. doi: 10.1002/adv.21923.
- YILMAZ, O., EMRE, K., GUNER, F. S., et al., 2014, “A Comprehensive 3D Analysis of Polymer Flow through a Conical Spiral Extrusion Die”, v. 15, n. 1, pp. 84–90. doi: 10.1007/s12221-014-0084-4.

ZHANG, Y., JIANG, X., FAN, H., et al., 2018, “Optimization and Numerical Simulation of Outlet of Twin Screw Extruder”, *MATEC Web of Conferences*, v. 153, pp. 05004. doi: 10.1051/mateconf/201815305004.