

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Química
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

**Desenvolvimento de Modelos Simplificados
para o Estudo da Extrusão de Polímeros**

Dissertação de Mestrado

Leonardo de Alencastro Vignol

Porto Alegre

2005

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Química
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Desenvolvimento de Modelos Simplificados para o Estudo da Extrusão de Polímeros

Leonardo de Alencastro Vignol

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de Mestre
em Engenharia Química.

Área de conhecimento: Polímeros

Orientador:

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo

Co-Orientador:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Porto Alegre

2005

AGRADECIMENTOS

Eu gostaria de agradecer a:

Nilo Sérgio Medeiros Cardozo e Argimiro Resende Secchi, pelo comprometimento e pelos ensinamentos valiosos na orientação do trabalho;

Fernando Angiolini e Marcus Dal Pizzol, pela aposta, pela confiança e pelas oportunidades;

Cristiano Zago, Michele Fortes, Tiago Morais e Vinícius Grassi, pela amizade e pelo auxílio durante esses mais de 2 anos de trabalho juntos;

Guillermo, Leandro, Marcelo e Miguel, pelo auxílio na aquisição de dados experimentais para esse estudo;

André Muniz, Rossana Almeida e Tiago Finkler; pela valiosa ajuda para a realização deste trabalho.

Daniela Molina; pela companhia, pela amizade e pelo amor.

Dedico esse trabalho às pessoas que mais amo nesse mundo e que são a razão da minha vida: meu pai, meu amigo, meu ídolo e meu maior professor, Dorval Petrarca Vignol; minha mãe, minha amiga, meu orgulho e minha maior professora, Vera Lúcia de Alencastro Vignol, e minha irmã, minha amiga, e quem me ensinou os primeiros passos, Ana Letícia de Alencastro Vignol.

PUBLICAÇÕES ASSOCIADAS À DISSERTAÇÃO

- **Simulação do Processo de Extrusão de Poliestireno.** Publicado nos Anais do XV Congresso Brasileiro de Engenharia Química (COBEQ). Curitiba - PR, 2004.
- **Polystyrene Extrusion Simulation.** Submetido para publicação no Brazilian Journal of Chemical Engineering. 2004.
- **Evaluating Aspects of Polypropylene and Polystyrene Extrusion Via Simulation.** Publicado nos Anais do PPS 2004 Americas Regional Meeting. Florianópolis - SC, 2004.
- **Simplified Models for Single-Screw Extrusion Applications.** Aceito para publicação nos anais do ENPROMER. Rio de Janeiro - RJ, 2005.

SUMÁRIO

Índice de Figuras	II
Índice de Tabelas	V
Lista de Símbolos e de Siglas	VII
RESUMO	XVI
ABSTRACT.....	XVIII
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivo	2
1.3 Estrutura da Dissertação	3
2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1 Aspectos Gerais sobre o Processo de Extrusão de Polímeros	5
2.2 Relações Geométricas em uma Extrusora Convencional.....	11
2.3 Modelagem Matemática.....	14
2.3.1 Zona de Transporte de Sólidos.....	14
2.3.2 Zona de Plastificação.....	22
2.3.3 Zona de Transporte de Fluido.....	40
2.4 Simulação Computacional	42
3 MATERIAIS E MÉTODOS	44
3.1 Materiais	44
3.2 Metodologia	44
3.2.1 Extrusão	45
3.2.2 Simulação Computacional	52
3.2.3 Caracterização Reológica dos Materiais e Modelos Reológicos Utilizados...55	
3.2.4 Especificação das Características Geométricas da Extrusora no Simulador	61
3.2.5 Condições de Operação da Extrusora	61
3.2.6 Planejamento de Experimentos	63
3.2.7 Seleção de Variáveis por Regressão Multivariável.....	67
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	70

4.1	Obtenção de Dados de Extrusão Experimentais	70
4.2	Caracterização dos Materiais	75
4.2.1	Caracterização Reológica	75
4.2.2	Obtenção de Dados Físicos e Térmicos	82
4.3	Adequação das Predições do Simulador Comercial.....	90
4.4	Obtenção de Variáveis de Resposta de Extrusão via Simulação	96
4.5	Reformulação dos Modelos Simplificados e Estimação de seus Parâmetros .	105
4.6	Verificação e Validação dos Modelos Propostos	116
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	122
	Referências Bibliográficas	125

Índice de Figuras

Figura 2.1-1: Exemplos de artigos plásticos produzidos por extrusão.	5
Figura 2.1-2: Componentes básicos de uma extrusora convencional: (1) funil de alimentação; (2) motor de acionamento do parafuso; (3) barril da extrusora; (4) elementos de aquecimento do barril; (5) sistema de resfriamento do barril; (6) matriz da extrusora, (7) bomba de água.....	6
Figura 2.1-3: Representação esquemática de uma extrusora de parafuso único.	7
Figura 2.1-4: Zonas funcionais de uma extrusora de parafuso único.....	7
Figura 2.1-5: Exemplos de projetos de parafusos.	9
Figura 2.1-6: Parafuso com seção do tipo barreira.	9
Figura 2.1-7: Curvas características de uma extrusora de 90 mm e de uma matriz plana de 2000 mm de largura na extrusão de uma amostra de PP.	10
Figura 2.2-1: Características geométricas de uma extrusora convencional.....	11
Figura 2.2-2: Representação idealizada do canal do parafuso da extrusora.	13
Figura 2.3-1: Zonas de fluxo no funil de uma extrusora.	15
Figura 2.3-2: Forças que agem em um elemento diferencial do leito sólido.	18
Figura 2.3-3: Fluxos de calor envolvidos no transporte de sólidos.....	21
Figura 2.3-4: Mecanismo de plastificação de Tadmor.....	23
Figura 2.3-5: Representação do canal do parafuso durante a plastificação.	25
Figura 2.3-6: Curva de viscosidades típicas de polímeros.	27
Figura 2.3-7: Efeito da temperatura na curva de viscosidades do HIPS.	31
Figura 2.3-8: Curva mestra de viscosidades a 200°C do HIPS.....	33
Figura 3.2-1: Foto da linha de extrusão utilizada nos experimentos.	46
Figura 3.2-2: Foto da extrusora destacando os sensores de pressão e de temperatura. .	46
Figura 3.2-3: Foto da extrusora destacando as zonas de aquecimento do barril.....	48
Figura 3.2-4: Esquema relacionando as seções geométricas do parafuso com as zonas de aquecimento do barril.....	49
Figura 3.2-5: Fotos da matriz e do granulador utilizados nos experimentos com o PP. ...	51
Figura 3.2-6: Fotos do reômetro rotacional e da geometria de ensaios utilizados.	55
Figura 3.2-7: Efeito do parâmetro η_0 na curva de viscosidades.	57

Figura 3.2-8: Efeito do parâmetro λ na curva de viscosidades.....	58
Figura 3.2-9: Efeito do parâmetro a na curva de viscosidades.	58
Figura 3.2-10: Efeito do parâmetro n na curva de viscosidades.	59
Figura 3.2-11: Efeito do parâmetro b na curva de viscosidades.	60
Figura 4.1-1: Comparação entre os valores de \dot{M} das amostras PP – A e PS - A.	73
Figura 4.1-2: Comparação entre os valores de $P_{saída}$ das amostras PP – A e PS - A.	74
Figura 4.1-3: Comparação das curvas da matriz na extrusão das amostras PP - A e PS - A.....	74
Figura 4.2-1: Curvas de viscosidades complexas das amostras a 190°C.....	75
Figura 4.2-2: Curvas de viscosidades complexas das amostras a 210°C.....	76
Figura 4.2-3: Curvas de viscosidades complexas das amostras a 230°C.....	76
Figura 4.2-4: Comparação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e preditos pelos modelos reológicos para a amostra PP – A.	78
Figura 4.2-5: Comparação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e preditos pelos modelos reológicos para a amostra PP – B.	78
Figura 4.2-6: Comparação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e preditos pelos modelos reológicos para a amostra PS – A.	79
Figura 4.2-7: Extrapolação dos valores de viscosidades em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios com a amostra PP - A.	80
Figura 4.2-8: Extrapolação dos valores de viscosidades em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios com a amostra PP - B.	80
Figura 4.2-9: Extrapolação dos valores de viscosidades em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios com a amostra PS - A.	81
Figura 4.2-10: Variação da massa específica com a temperatura de uma amostra de PP na pressão de 0,1 MPa.	82
Figura 4.2-11: Variação da massa específica com a pressão de amostras de PP de PS na temperatura de 80°C.....	83
Figura 4.2-12: Variação da massa específica com a pressão de amostras de PP de PS na temperatura de 190°C.....	84
Figura 4.5-1: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos.....	106
Figura 4.5-2: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos.	107

Figura 4.5-3: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que não contempla os efeitos de interação entre os fatores.	108
Figura 4.5-4: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que não contempla os efeitos de interação entre os fatores.	109
Figura 4.5-5: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que contempla os efeitos de interação de segunda ordem entre os fatores.	111
Figura 4.5-6: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que contempla os efeitos de interação entre os fatores.	112
Figura 4.5-7: Relação entre o número de parâmetros do modelo para o cálculo da vazão mássica e o coeficiente de correlação linear (R^2) resultante.	113
Figura 4.5-8: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado reduzido.	114
Figura 4.5-9: Relação entre o número de parâmetros do modelo para o cálculo da pressão na saída da extrusora e o coeficiente de correlação linear (R^2) resultante.	115
Figura 4.5-10: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado reduzido.	116

Índice de Tabelas

Tabela 3.1-1: Características das amostras analisadas.....	44
Tabela 3.2-1: Posições dos sensores em relação à direção axial da extrusora.....	47
Tabela 3.2-2: Medidas geométricas do parafuso da extrusora.	47
Tabela 3.2-3: Posições das zonas de aquecimento em relação à direção axial da extrusora.	48
Tabela 3.2-4: Temperaturas definidas e as indicadas nas zonas de aquecimento do barril na extrusão da amostra PP - A.	50
Tabela 3.2-5: Temperaturas definidas e as indicadas nas zonas de aquecimento do barril na extrusão da amostra PS - A.	51
Tabela 4.1-1: Resultados da extrusão da amostra PP -A.	70
Tabela 4.1-2: Resultados da extrusão da amostra PS - A.	73
Tabela 4.2-1: Parâmetros reológicos das amostras estimados em $T_{ref} = 190^{\circ}\text{C}$	77
Tabela 4.2-2: Valores médios de massa específica, no estado sólido e no estado líquido, utilizados para as amostras de PP e de PS.....	86
Tabela 4.2-3: Valores de calor específico, no estado sólido (Cp_s) e no estado líquido (Cp_l), utilizados para as amostras de PP e de PS.....	87
Tabela 4.2-4: Valores de condutividade térmica, no estado sólido (k_s) e no estado líquido (k_l), utilizados para as amostras de PP e de PS.	87
Tabela 4.2-5: Valores de temperatura de plastificação e de entalpia de fusão utilizados para as amostras de PP e de PS.....	88
Tabela 4.2-6: Valores de massa específica aparente medidos para as amostras de PP e de PS.	89
Tabela 4.2-7: Valores dos fatores de atrito polímero-barril (f_b) e polímero-parafuso (f_s) utilizados, inicialmente, nas simulações com as amostras de PP e de PS.	90
Tabela 4.3-1: Perfis de temperaturas utilizados nas simulações da extrusão das amostras PP - A e PS - A.	90
Tabela 4.3-2: Dados utilizados para o cálculo do diâmetro da matriz virtual.	91
Tabela 4.3-3: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador com os dados experimentais para a amostra PP - A.....	92

Tabela 4.3-4: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador com os dados experimentais para a amostra PS - A.....	93
Tabela 4.3-5: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador, utilizando-se o valor de f_b igual a 0,575, com os dados experimentais para a amostra PP - A.....	94
Tabela 4.3-6: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador, utilizando-se o valor de f_b igual a 0,560, com os dados experimentais para a amostra PS - A.....	95
Tabela 4.4-1: Fatores e níveis considerados no planejamento de experimentos.	96
Tabela 4.4-2: Resultados das 65 predições de \dot{M} e de $P_{saída}$ via Flow 2000.	97
Tabela 4.4-3: Efeitos de 2ª ordem confundidos no planejamento fatorial fracionário.	98
Tabela 4.4-4: Tabela ANOVA para as análises da vazão mássica.	99
Tabela 4.4-5: Tabela ANOVA para as análises da pressão na saída da extrusora.	100
Tabela 4.4-6: Efeitos significativos nos valores preditos de vazão mássica.	101
Tabela 4.4-7: Efeitos significativos nos valores preditos de pressão na saída da extrusora.	103
Tabela 4.6-1: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados <i>MSCI</i> com os dados experimentais para a amostra PP - A.	117
Tabela 4.6-2: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados <i>MSCIR</i> com os dados experimentais para a amostra PP - A.....	117
Tabela 4.6-3: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados <i>MSCI</i> com os dados experimentais para a amostra PS - A.	118
Tabela 4.6-4: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados <i>MSCIR</i> com os dados experimentais para a amostra PS - A.....	118
Tabela 4.6-5: Condições de testes na extrusora com base nas predições do modelo <i>MSCIR</i> para o cálculo da vazão mássica.	119
Tabela 4.6-6: Comparação entre os valores preditos pelos modelos <i>MSCIR</i> e os dados experimentais de \dot{M} e de $P_{saída}$ obtidos no segundo conjunto de testes na extrusora.	120

Lista de Símbolos e de Siglas

Lista de Símbolos

a	Parâmetro do modelo de Carreau-Yasuda.
$a(T)$	Função que descreve a dependência da viscosidade com a temperatura.
A	Região de sólido nos canais do parafuso da extrusora. Fator em um planejamento fatorial genérico.
A_1	Constante relacionada com o cálculo da pressão na zona de transporte de sólidos.
A_2	Constante relacionada com o cálculo da pressão na zona de transporte de sólidos.
b	Espessura da parede do barril da extrusora. Parâmetro do modelo de Andrade-Eyring modificado.
b_p	Parâmetro do modelo linear no procedimento <i>SROV</i> .
db	Intervalo de confiança do parâmetro b_p no procedimento <i>SROV</i> .
B	Região de fluido nos canais do parafuso da extrusora. Fator em um planejamento fatorial genérico. Razão entre tensão de cisalhamento e tensão normal na parede do funil da extrusora.
B'	Razão de tensões na seção cônica do funil da extrusora.
B_1	Constante relacionada com o cálculo da pressão na zona de transporte de sólidos.
B_2	Constante relacionada com o cálculo da pressão na zona de transporte de sólidos.
c	Parâmetro relacionado com o cálculo da pressão na seção cônica do funil da extrusora.
C	Região do filme de fluido entre a superfície do barril e o leito sólido. Constante que caracteriza o processo de plastificação.
C_1	Parâmetro do modelo WLF.

C_2	Parâmetro do modelo WLF.
Cp_l	Calor específico do material no estado líquido.
Cp_s	Calor específico do material no estado sólido.
d	Diâmetro dos pratos do reômetro.
d_p	Diâmetro da partícula de material.
D	Região do filme de fluido entre o filete passivo do parafuso e o leito sólido.
D_b	Diâmetro interno do barril da extrusora.
D_i	Diâmetro interno do parafuso da extrusora.
D_s	Diâmetro externo do parafuso da extrusora.
D_T	Diâmetro da matriz tubular.
$\bar{D}_{T_{PP-A}}$	Valor médio do diâmetro do tubo nos testes com a amostra PP – A.
$\bar{D}_{T_{PS-A}}$	Valor médio do diâmetro do tubo nos testes com a amostra PS – A.
\bar{D}_{T_r}	Valor médio do diâmetro do tubo.
D^*	Parâmetro relacionado com o cálculo das tensões no funil da extrusora.
D_a	Diâmetro da abertura do funil da extrusora.
DMM	Distribuição de massas molares.
e	Espessura do filete do parafuso da extrusora.
E	Região do filme de fluido entre a raiz do parafuso e o leito sólido
E_a	Energia de ativação para o escoamento.
f_b	Fator de atrito entre o material e o barril da extrusora.
f_c	Fator de correção relacionado o cálculo da vazão no funil da extrusora.
f_s	Fator de atrito entre o material e o parafuso da extrusora.
f_w^*	Fator de atrito na parede do funil da extrusora.
F_1	Força de atrito entre o barril e o leito sólido.
F_2	Força devido ao gradiente de pressão.
F_3	Força de atrito devido ao contato das partículas com o filete ativo do parafuso.
F_4	Força de atrito devido ao contato das partículas com o filete passivo do parafuso.
F_5	Força de atrito devido ao contato das partículas com a raiz do parafuso.
F_6	Força devido ao gradiente de pressão.
F_7	Força normal do filete ativo do parafuso.
F_8	Força normal do filete passivo do parafuso.

g	Aceleração da gravidade.
h	Posição na direção vertical ao longo da seção cilíndrica do funil da extrusora.
h_0	Posição na direção vertical do funil da extrusora em que a pressão é P_0 .
H	Altura do canal do parafuso da extrusora. Altura da seção cilíndrica do funil da extrusora.
H_0	Altura do canal na seção de alimentação do parafuso da extrusora.
H_s	Altura do leito sólido.
ΔH_f	Entalpia de fusão do material.
J_a	Taxa axissimétrica relacionada com o cálculo da vazão mássica no funil da extrusora.
k	Número de fatores em um planejamento fatorial.
k_b	Condutividade térmica do metal do barril da extrusora.
k_l	Condutividade térmica do material no estado líquido.
k_p	Condutividade térmica do metal do parafuso da extrusora.
k_s	Condutividade térmica do material no estado sólido.
K	Constante relacionada com o cálculo da pressão na zona de transporte de sólidos. Constante do modelo de Andrade-Eyring.
L	Distância ao longo do eixo da extrusora.
L_T	Comprimento da matriz tubular.
m	Índice de consistência do modelo da lei das potências.
m_0	Viscosidade à taxa de deformação nula no modelo da lei das potências.
MQ	Média quadrática.
M_w	Massa molar média ponderal.
\dot{M}	Vazão mássica total.
\dot{M}_{Az}	Vazão mássica na região A na direção z .
\dot{M}_{Bz}	Vazão mássica na região B na direção z .
\dot{M}_{Cx}	Vazão mássica na região C na direção x .
\dot{M}_{Cz}	Vazão mássica na região C na direção z .
\dot{M}_{DEx}	Vazão mássica nas regiões D e E na direção x .
\dot{M}_{DEz}	Vazão mássica nas regiões D e E na direção z .
\dot{M}_f	Vazão mássica no funil de alimentação da extrusora.

\dot{M}_E	Vazão mássica total experimental.
\dot{M}_F	Vazão mássica total predita pelo Flow 2000.
\dot{M}_{MSCI}	Vazão mássica total predita pelo modelo simplificado que contempla efeitos de interação entre os fatores do planejamento de experimentos.
\dot{M}_{MSCIR}	Vazão mássica total predita pelo modelo simplificado reduzido que contempla efeitos de interação entre os fatores do planejamento de experimentos.
\dot{M}_{MSSI}	Vazão mássica total predita pelo modelo simplificado que não contempla efeitos de interação entre os fatores do planejamento de experimentos.
\dot{M}_{MSZ}	Vazão mássica total predita pelo modelo simplificado que leva em conta todos os fatores do planejamento de experimentos
\dot{M}_T	Vazão mássica na matriz tubular.
$\Delta\dot{M}$	Variação em relação ao valor experimental da vazão mássica.
n	Índice do modelo da lei das potências. Número de níveis em um planejamento fatorial.
N	Velocidade de rotação do parafuso da extrusora.
N_{atraso}	Parâmetro que define o atraso no processo de plastificação.
p	Tamanho do vetor dos parâmetros. Pressão local na extrusora. Menor nível de significância que leva à rejeição da hipótese nula.
P	Pressão.
P_1	Pressão na distância z_1 .
P_2	Pressão na distância z_2 .
$P_{interna}$	Pressão na superfície interna do barril.
$P_{médio}$	Valor médio das pressões nos testes na extrusora.
$P_{saída}$	Pressão na saída da extrusora.
$P_{saídaE}$	Pressão na saída da extrusora experimental.
$P_{saídaF}$	Pressão na saída da extrusora predita pelo <i>Flow 2000</i> .
$P_{saídaMSCI}$	Pressão na saída da extrusora predita pelo modelo simplificado que contempla efeitos de interação entre os fatores do planejamento de experimentos.

$P_{saídaMSCIR}$	Pressão na saída da extrusora predita pelo modelo simplificado reduzido que contempla efeitos de interação entre os fatores do planejamento de experimentos.
$P_{saídaMSSI}$	Pressão na saída da extrusora predita pelo modelo simplificado que não contempla efeitos de interação entre os fatores do planejamento de experimentos.
$P_{saídaMSZ}$	Pressão na saída da extrusora predita pelo modelo simplificado que leva em conta todos os fatores do planejamento de experimentos
ΔP_T	Queda de pressão na matriz tubular.
$\Delta P_{saída}$	Variação em relação ao valor experimental da pressão na saída da extrusora.
q_f	Fluxo de calor nos filetes do parafuso da extrusora.
q_s	Fluxo de calor na raiz do parafuso da extrusora.
Q	Vazão volumétrica.
Q_s	Vazão volumétrica na zona de transporte de sólidos.
R	Raio da seção cilíndrica do funil da extrusora. Constante universal dos gases.
R_{AC}	Taxa de plastificação na interface sólido/líquido <i>AC</i> .
R_{ADE}	Taxa de plastificação na interface sólido/líquido <i>ADE</i> .
R_T	Raio da matriz tubular:
R^2	Coefficiente de correlação linear.
s	Desvio padrão.
S	Passo do parafuso da extrusora.
SQ	Soma quadrática.
t_R	Tempo de residência.
t_f	Fração de tempo que o fluido gasta na porção superior do canal do parafuso.
T	Temperatura.
T_b	Temperatura do barril medida na distância <i>b</i> a partir da interface.
T_c	Temperatura de cristalização do material.
$T_{definida}$	Temperatura definida nas zonas de aquecimento da extrusora.
$T_{externa}$	Temperatura na superfície externa do barril.
T_g	Temperatura de transição vítrea do material.
T_i	Temperatura na interface entre as paredes do barril da extrusora.

$T_{interna}$	Temperatura na superfície interna do barril.
T_m	Temperatura de fusão do material.
T_{matriz}	Temperatura na matriz.
T_p	Temperatura de plastificação.
T_{ref}	Temperatura de referência para os ajustes de parâmetros dos modelos reológicos.
T_s	Temperatura do parafuso da extrusora.
T_0	Temperatura do material na entrada da extrusora.
T_{saida}	Temperatura na saída da extrusora.
T_T	Temperatura da matriz tubular.
$T_{z0}(y)$	Perfil de temperaturas na direção y em $z=0$.
$V_a(y)$	Velocidade média da partícula de fluido na direção axial.
V_b	Velocidade de rotação do barril da extrusora.
V_{bx}	Velocidade de rotação do barril na direção transversal ao canal do parafuso.
V_{bz}	Velocidade de rotação do barril na direção ao longo do eixo do parafuso.
V_{sy1}	Velocidade do leito sólido no sentido da superfície do barril.
V_{sy2}	Velocidade do leito sólido no sentido do parafuso.
V_{sz}	Velocidade do leito sólido na direção axial do parafuso da extrusora.
$V_x^{(C)}$	Velocidades V_x na região C .
$V_x^{(DE)}$	Velocidades V_x na região DE .
$V_z^{(C)}$	Velocidades V_z na região C .
$V_z^{(DE)}$	Velocidades V_z na região DE .
W	Largura do canal do parafuso da extrusora.
W_s	Largura do canal, considerando o ângulo entre o filete e a raiz do parafuso. Largura do canal do leito sólido.
W_b	Largura do canal, considerando o ângulo entre o filete e o barril.
\bar{W}	Valor médio da largura do canal do parafuso da extrusora.
x	Coordenada cartesiana utilizada para definir a direção da largura do canal do parafuso.
x_p	Variável selecionada no procedimento SROV.
X	Matriz com as variáveis explicativas no procedimento SROV.
y	Coordenada cartesiana utilizada para definir a direção da altura do canal do parafuso da extrusora.

	Variável de resposta em um modelo linear genérico.
z	Coordenada cartesiana utilizada para definir a direção do eixo do parafuso da extrusora.
z_m	Distância axial entre o funil de alimentação e a posição onde aparecem os primeiros filmes de fluido nas partes inferior e lateral do parafuso.

Letras Gregas

α	Nível de significância. Ângulo de inclinação em relação ao eixo vertical do funil da extrusora.
β	Ângulo entre o plano principal e a parede da seção cilíndrica do funil da extrusora. Parâmetro de um modelo linear genérico.
β_e	Ângulo relacionado com a pressão na seção cilíndrica do funil da extrusora.
β^*	Constante relacionada com a pressão na seção cônica do funil da extrusora.
δ	Espessura do filme de fluido.
$\delta_{DE/Z}$	Espessura do filme de fluido na zona <i>DE</i> .
δ_f	Distância radial entre o barril e o filete do parafuso.
Δ	Símbolo utilizado para representar a variação nos valores de determinada grandeza.
ε	Erro aleatório.
φ	Ângulo do movimento da superfície externa do leito sólido.
ν	Grau de liberdade.
$\underline{\dot{\gamma}}$	Tensor taxa de deformação.
$\dot{\gamma}$	Magnitude do tensor taxa de deformação.
$\dot{\gamma}_r$	Taxa de cisalhamento reduzida.
λ	Constante de tempo do modelo de Carreau-Yasuda.
η	Viscosidade não-Newtoniana.
η_0	Viscosidade à taxa de deformação nula do modelo de Carreau-Yasuda.
η^*	Viscosidade complexa.

η_{∞}	Viscosidade à taxa de deformação infinita do modelo de Carreau-Yasuda.
$\eta_{ref}(\dot{\gamma})$	Função que descreve a dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento na temperatura de referência T_{ref} .
η_r	Viscosidade reduzida.
θ_s	Ângulo entre o filete e a raiz do parafuso da extrusora.
θ_b	Ângulo entre o filete e o barril da extrusora.
$\bar{\theta}$	Valor médio do ângulo do filete do parafuso.
ρ_a	Massa específica aparente do material.
ρ_{ref}	Massa específica do material na temperatura T_{ref} .
ρ_l	Massa específica do material no estado líquido.
ρ_s	Massa específica do material no estado sólido.
$\underline{\tau}$	Tensor tensão.
$\tau_{yx DE}$	Tensão de cisalhamento na interface <i>A-DE</i> .
$\tau_{yx C}$	Tensão de cisalhamento na interface <i>A-C</i> .
ω	Taxa de plastificação.
ω	Frequência angular.
ψ	Variável relacionada com a taxa de plastificação.

Lista de Siglas

<i>ANOVA</i>	Análise de Variância.
<i>HIPS</i>	Poliestireno de Alto Impacto.
<i>MSCI</i>	Modelo Simplificado Com Interação.
<i>MSCIR</i>	Modelo Simplificado Com Interação Reduzido.
<i>MSSI</i>	Modelo Simplificado Sem Interação.
<i>MSZ</i>	Modelo Simplificado Zero.
<i>PEBD</i>	Polietileno de Baixa Densidade.
<i>PP</i>	Polipropileno.
<i>PP - A</i>	Amostra de polipropileno utilizado no primeiro conjunto de testes na extrusora.

<i>PP - B</i>	Amostra de polipropileno utilizado no segundo conjunto de testes na extrusora.
<i>PS</i>	Poliestireno.
<i>PS - A</i>	Amostra de poliestireno utilizado no primeiro e no segundo conjunto de testes na extrusora.
<i>PVC</i>	Policloreto de vinila.

RESUMO

Neste trabalho, desenvolveram-se modelos matemáticos simplificados para o cálculo de duas variáveis importantes no estudo da extrusão de polímeros: vazão mássica (\dot{M}) e pressão na saída da extrusora ($P_{saída}$), em função das propriedades dos materiais e das condições de operação do equipamento. Podem-se utilizar esses modelos como ferramentas simples para a definição de critérios de ajustes que se devem fazer em uma extrusora de parafuso único para obter-se o desempenho desejado quando se alimenta o equipamento com um novo material. Para desenvolverem-se os modelos simplificados, utilizaram-se dados experimentais da extrusão de poliestireno (PS) e de polipropileno (PP), bem como resultados preditos por um programa computacional de simulação de extrusão disponível comercialmente. Mediram-se os dados experimentais de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora em um equipamento de parafuso único de 45 mm de diâmetro. Realizaram-se esses testes, variando-se a velocidade de rotação do parafuso de 70 a 100 rpm para ambos os polímeros. No primeiro conjunto de simulações, utilizou-se o simulador Flow 2000 (Compuplast Inc.) para ajustarem-se os valores preditos de \dot{M} e de $P_{saída}$ aos dados obtidos experimentalmente através da estimação dos fatores de atrito barril-polímero tanto para o PP quanto para o PS. Posteriormente, realizou-se um planejamento de experimentos, do tipo fatorial fracionado 2_{IV}^{20-14} , para obter-se um segundo conjunto de simulações, considerando-se as propriedades dos materiais (reológicas e térmicas) e as condições de operação da extrusora (velocidade de rotação do parafuso e perfil de temperatura nas zonas de aquecimento da extrusora) como fatores de investigação. Com as novas simulações no *Flow 2000*, ajustaram-se os parâmetros dos modelos simplificados aos valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora preditos no simulador. Elaboraram-se os modelos simplificados levando-se em conta as interações entre os fatores cujos efeitos consideraram-se significativos nas análises de variância (ANOVA). Obteve-se um modelo linear com 37 termos para o cálculo da vazão mássica e um modelo linear com 41 termos para o cálculo da pressão na saída da extrusora. Posteriormente, aplicou-se uma técnica de regressão multivariável para selecionar apenas os termos importantes dessas

equações, conduzindo a um modelo linear com 10 termos para o cálculo da vazão mássica e a um modelo com 6 termos para o cálculo da pressão na saída da extrusora. Conseguiu-se boa concordância entre os dados experimentais e os valores preditos quando se aplicaram os modelos simplificados.

ABSTRACT

In this work, simplified mathematical models were developed for calculating mass flow rate (\dot{M}) and pressure at the exit of the extruder (P_{exit}) as function of material properties and extruder operating conditions. These models can be used as simple tools for definition of criteria for adjustments which have to be made in a single-screw extruder for achieving a desired performance when a new material is fed into the extruder. For developing the simplified models, both experimental data and predictions of a commercial simulator for the extrusion of polystyrene (PS) and polypropylene (PP) were used. Experimental values of mass flow rate and pressure at the exit of the extruder were measured by using a 45 mm single-screw extruder. These tests were performed by varying screw speed from 70 up to 100 rpm for both polymers. A first set of simulations was carried out by using Flow 2000 computational package (Compuplast, Inc.) in order to fit the simulator predictions of \dot{M} and P_{exit} to the experimental data of both PP and PS, through the estimation of the barrel-polymer friction coefficients. Additionally, a 2^{20-14}_{IV} fractional factorial design of experiments (DOE) was used to define a second set of simulations, using material properties (rheological and thermal) and extruder processing conditions (screw speed and barrel temperature profile) as factors for investigation. The Flow 2000 predictions of mass flow rate and pressure at the exit of the extruder at the DOE points were used for fitting the parameters of the simplified models. These simplified models were developed taking into account the interaction between the factors whose effects were considered meaningful by means of analysis of variance (ANOVA). It was obtained a model containing 37 terms for the mass flow rate calculations, and a model containing 41 terms for the pressure at the exit of the extruder calculations. Additionally, it was applied a multivariable regression technique for selecting only the important terms of these equations, leading to a linear model containing 10 terms for the mass flow rate calculations, and a linear model containing 6 terms for the pressure at the exit of the extruder calculations. Good agreement between experimental and predicted values was achieved when the simplified models were applied.

1 INTRODUÇÃO

1.1 *Motivação*

A extrusão é um dos processos de transformação de resinas poliméricas mais importantes na indústria de plásticos. Durante a extrusão, ocorrem vários fenômenos complexos, tais como: transporte de material sólido, transferência de energia, mudança de fase e escoamento de material não-Newtoniano. Em função disso, estudiosos de vários centros de pesquisa do mundo têm realizado estudos sobre a descrição matemática do processo de extrusão de plásticos há mais de 4 décadas. Além disso, já se utilizam programas de simulação de extrusão como ferramentas de auxílio, tanto no projeto de extrusoras quanto na otimização das condições de processamento, há mais de 30 anos. Esses pacotes computacionais variam em complexidade desde aqueles que utilizam simples modelos 1D, contemplando apenas os estágios finais do processo, até aqueles que utilizam complexos modelos 3D, com solução via métodos numéricos. É claro que o aumento no grau de complexidade dos simuladores vem acompanhado de um aumento no preço dos mesmos. Por exemplo, os simuladores 2D, que são os mais comumente usados, têm custos de licença na faixa de U\$ 20.000 a U\$ 30.000. Além disso, como a extrusão de polímeros envolve ciências complexas, tais como reologia e fenômenos de transporte, a maior sofisticação de um simulador faz com que se necessite de profissionais especializados para utilizá-lo e, principalmente, para analisar os resultados de suas predições de forma adequada.

No entanto, apesar dos avanços na área de simulação de extrusão de polímeros, poucas empresas brasileiras utilizam esse recurso para o aprimoramento de suas linhas de extrusão. O não-uso dessas ferramentas está associado à realidade dessas empresas que, em geral, são de pequeno e de médio portes, que não apresentam a prática de investir em novas tecnologias e que contam com funcionários com escolaridade de 1º e de 2º graus em sua maioria. Com base nisso, observa-se que essas empresas necessitam de ferramentas de simulação que sejam baratas, que sejam fáceis de usar e

que forneçam informações realmente fundamentais para a avaliação dos produtos e do processo. Assim, modelos matemáticos semi-empíricos, apresentando relações bem definidas entre variáveis dependentes e independentes, podem ser alternativas aos simuladores comerciais no estudo do processo de extrusão de polímeros.

Em função disso, resolveu-se desenvolver uma alternativa simples para o cálculo da vazão mássica e da pressão na saída da extrusora através de modelos simplificados com solução analítica. Podem-se utilizar esses modelos, por exemplo, para a definição de critérios de ajustes que se deve fazer em uma extrusora de parafuso único para obter-se o desempenho desejado quando se alimenta o equipamento com um novo material.

Este trabalho envolve o LATEP – Laboratório de Tecnologia e Processamento de Polímeros e o LASIM – Laboratório de Simulação, ambos do Departamento de Engenharia Química da UFRGS. Esta pesquisa foi apoiada pela INNOVA S. A., indústria situada no Pólo Petroquímico de Triunfo, produtora de estireno, poliestireno cristal (GPPS) e poliestireno alto impacto (HIPS). Em princípio, pretende-se utilizar os modelos simplificados elaborados neste trabalho como ferramentas de assistência técnica a clientes da Innova.

Simulação de extrusão de polímeros é um assunto que ainda não havia sido explorado no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da UFRGS (PPGEQ), portanto, apresenta um perfil de geração de conhecimento no estudo de materiais poliméricos.

1.2 Objetivo

O objetivo deste trabalho é desenvolver modelos matemáticos simplificados para o cálculo da vazão mássica (\dot{M}) e da pressão na saída da extrusora ($P_{saída}$) para o estudo da extrusão de polímeros. Construíram-se esses modelos com base em dados experimentais de extrusão de poliestireno (PS) e de polipropileno (PP), medidos em uma extrusora de parafuso único de 45 mm, e em resultados preditos por um simulador comercial. Nesses modelos, levaram-se em conta as propriedades reológicas e térmicas dos materiais, tanto no estado sólido quanto no estado líquido, a velocidade de rotação do parafuso e as temperaturas nas zonas de aquecimento do barril da extrusora.

A aplicação geral para esses modelos é a determinação da produtividade do equipamento e o nível de pressão na saída da extrusora em função das propriedades do material e das condições de operação. Por exemplo, a predição da vazão mássica é útil quando se necessita trocar de material na extrusora e deseja-se manter a mesma produtividade do equipamento. Nesse caso, pode-se aplicar o modelo simplificado para o cálculo da vazão mássica para definirem-se os ajustes que se deve aplicar na extrusora para que o material que se vai alimentar no equipamento apresente o mesmo desempenho do material que se vai substituir. Além disso, podem-se utilizar predições da pressão na saída da extrusora como um indicativo de desempenho e de operabilidade do equipamento. Por exemplo, caso se observe, para um material com formulação e processo de síntese estáveis, que a diferença entre os valores preditos e experimentais de pressão na saída da extrusora estão aumentando ao longo do tempo, isso pode ser um indicativo de desgaste do parafuso. Além disso, caso se deseje testar um material na extrusora, em determinada condição de operação, e as simulações indicarem valores de $P_{saída}$ preditos muito grandes, é melhor que se aplique temperaturas mais altas nas zonas de aquecimento do equipamento.

1.3 Estrutura da Dissertação

Esta dissertação está organizada em cinco capítulos: introdução (capítulo 1), fundamentos teóricos e revisão bibliográfica (capítulo 2), materiais e métodos (capítulo 3), resultados e discussão (capítulo 4) e conclusões e sugestões (capítulo 5).

No capítulo 2, apresentam-se alguns fundamentos teóricos sobre o processo de extrusão e sobre reologia de polímeros e uma revisão bibliográfica dos modelos matemáticos clássicos aplicados na descrição das zonas funcionais de uma extrusora de parafuso único.

No capítulo 3, apresenta-se uma descrição da etapa experimental desta pesquisa. Essa etapa compreende a apresentação dos materiais utilizados neste trabalho, aspectos sobre os testes na extrusora e sobre a caracterização reológica desses materiais. Em relação à extrusão, apresentam-se as características da extrusora utilizada e a metodologia de aquisição dos dados experimentais tanto para o PS quanto para o PP.

Sobre a reologia, descreve-se o equipamento, o procedimento reométrico e os modelos reológicos utilizados.

No capítulo 4, apresentam-se os resultados obtidos nesta dissertação bem como uma análise dos mesmos. Descrever-se-á a etapa de obtenção de dados experimentais na extrusora, a etapa de caracterização dos materiais; a etapa de adequação das predições do simulador comercial; a etapa de obtenção de variáveis de resposta de extrusão via simulação; a etapa de estimação dos parâmetros dos modelos simplificados e a etapa de verificação e validação dos modelos propostos.

No capítulo 5, apresentam-se as conclusões sobre o trabalho, discutindo-se a relação entre o que se pretendia obter com este trabalho e o que, realmente foi possível alcançar. Apresentam-se também algumas sugestões para trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, apresentam-se alguns fundamentos teóricos e uma revisão bibliográfica sobre os principais tópicos relacionados com o desenvolvimento dos modelos descritos neste documento. Primeiramente, destacam-se alguns aspectos importantes sobre a extrusão de polímeros, mostrando alguns conceitos básicos sobre o equipamento de transformação bem como sobre o processo. No entanto, o que mais se vai explorar são os modelos matemáticos de extrusão. Pretende-se expor a complexidade da descrição matemática desse processo mostrando a importância da alternativa proposta neste trabalho. Por fim, mencionam-se alguns aspectos sobre a simulação de extrusão, destacando-se os principais simuladores comercialmente disponíveis, os métodos numéricos de solução dos problemas de escoamento clássicos e as principais variáveis de respostas previstas.

2.1 Aspectos Gerais sobre o Processo de Extrusão de Polímeros

Na indústria de polímeros, a extrusão é um processo utilizado para a produção contínua de artefatos plásticos tais como canos, tubos, filmes, chapas, entre outros. Algumas peças produzidas por extrusão são apresentadas na Figura 2.1-1 a seguir.



Figura 2.1-1: Exemplos de artigos plásticos produzidos por extrusão.

Como se pode ver na Figura 2.1-1, os artigos plásticos produzidos por extrusão apresentam seção transversal constante, apesar de que também é possível fazer produtos com seção transversal variável (e.g., na moldagem por sopro). Em geral, peças com seção transversal constante podem ser feitas mais economicamente por extrusão do que por outras tecnologias.

Rauwendaal (1986a) apresenta uma descrição detalhada sobre o processo de extrusão de polímeros, que envolve equipamentos com várias configurações diferentes, dependendo de sua aplicação. Na indústria de plásticos, é comum utilizar-se tanto extrusoras de parafuso único quanto de parafuso duplo. As extrusoras de parafuso único são as mais empregadas. No entanto, quando se necessita promover misturas entre materiais diferentes, por exemplo, entre resinas e cargas ou entre resinas e concentrados de cor (*masterbatches*), recomenda-se o uso de extrusoras com parafuso duplo.

A extrusora é um equipamento que tem a função de plastificar uma mistura de resinas e de aditivos e entregar à matriz um fluxo constante de material com propriedades homogêneas em termos de composição (sem degradação ou reticulação), de temperatura, de viscosidade, de pressão, etc. Se a extrusora não entregar um material uniforme à matriz, pode ocorrer um fluxo desigual ao longo da mesma, resultando em variação nas dimensões do produto. A Figura 2.1-2 ilustra as partes fundamentais de uma extrusora convencional.

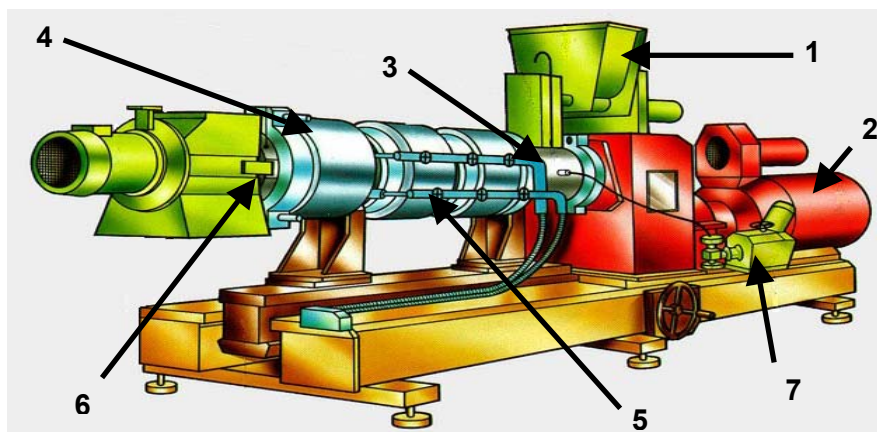


Figura 2.1-2: Componentes básicos de uma extrusora convencional: (1) funil de alimentação; (2) motor de acionamento do parafuso; (3) barril da extrusora; (4) elementos de aquecimento do barril; (5) sistema de resfriamento do barril; (6) matriz da extrusora, (7) bomba de água.

Em geral, opera-se a extrusora em sua velocidade de rotação mais eficiente que, na maioria das vezes, é a velocidade máxima de projeto. Salienta-se que um motor grande trabalhando com sua capacidade parcial é menos eficiente que um motor menor operando em sua capacidade total. Além disso, otimizar a velocidade de rotação do parafuso maximiza o calor proveniente do trabalho mecânico e, por sua vez, minimiza a quantidade de energia elétrica necessária para processar o material.

Em termos de análise teórica do processo, foca-se apenas no estudo dos fenômenos que ocorrem no funil de alimentação, no barril (ou canhão) da extrusora, no parafuso ou rosca (situado no interior do barril), nos elementos aquecedores do barril e na matriz.

As Figuras 2.1-3 e 2.1-4 (Cunha, 2000), a seguir, ilustram um aspecto que ainda causa certa confusão para algumas pessoas, que é a distinção entre seções geométricas e zonas funcionais de uma extrusora.

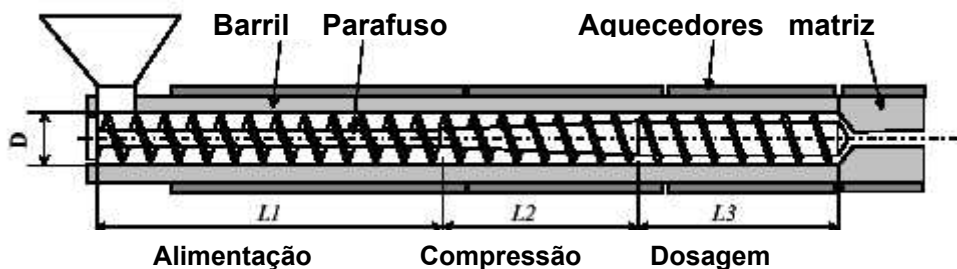


Figura 2.1-3: Representação esquemática de uma extrusora de parafuso único.

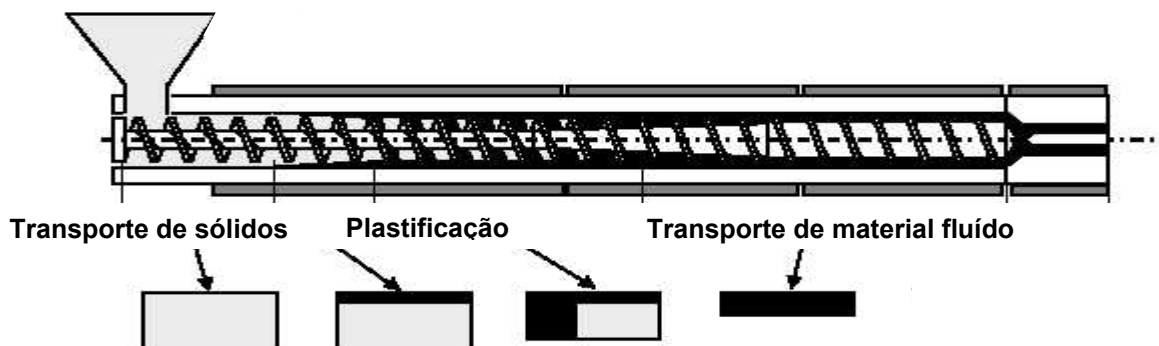


Figura 2.1-4: Zonas funcionais de uma extrusora de parafuso único.

As seções geométricas de uma extrusora são fixas e referem-se às diferentes partes do parafuso, conhecidas como: seção de alimentação, seção de compressão e

seção de dosagem, conforme se pode ver na Figura 2.1-3. As zonas funcionais dependem das condições de operação da extrusora e são: a zona de transporte de sólidos, a zona de plastificação e a zona de transporte de fluido, como se pode ver na Figura 2.1-4.

A estabilidade do processo e a qualidade do produto processado são muito dependentes do projeto das seções geométricas da extrusora, pois elas têm papel fundamental no transporte, no aquecimento, na fusão e na mistura do plástico. A seção de alimentação tem a função de pré-aquecer o polímero e transportá-lo para as seções seguintes do parafuso. Nessa seção, a altura do canal é constante, e o comprimento deve ser adequado para garantir uma taxa de alimentação suficiente para as próximas seções. A seção de compressão apresenta altura do canal que decresce uniformemente com o comprimento do parafuso. Nessa seção, estabiliza-se a variação da massa específica do material em função da mudança de fase que ele sofre. A seção de dosagem apresenta altura do canal constante e menor do que a da seção de alimentação. Sua função principal é a de homogeneizar o material plastificado.

O projeto dessas seções depende das características do material que se quer processar. Por exemplo, para polímeros que fundem gradualmente, como o polietileno de baixa densidade (PEBD), é apropriado dividir cada uma dessas seções em comprimentos iguais. No caso em que se quer processar um polímero que plastifica rapidamente (e.g., o Nylon), existe a necessidade de utilizar-se um parafuso com uma seção de compressão muito curta. Ao contrário disso, quando se quer processar materiais com plastificação muito lenta (e.g., o policloreto de vinila, PVC), deve-se utilizar uma seção de compressão sobre todo o comprimento do parafuso.

Outro aspecto levado em consideração no projeto do parafuso é a chamada razão de compressão, definida como a razão entre a altura do canal da seção de alimentação pela altura do canal da seção de dosagem. Em geral, materiais que apresentam mais dificuldade para plastificarem apresentam parafusos com razão de compressão maiores. Para o PP, o valor da razão de compressão do parafuso ideal é igual a 4,0 e, para o PS, é igual a 2,5. Exemplos de variações nos projetos dos parafusos em função dos materiais que se deseja processar são mostrados na Figura 2.1-5 (Morton-Jones, 1989) a seguir.

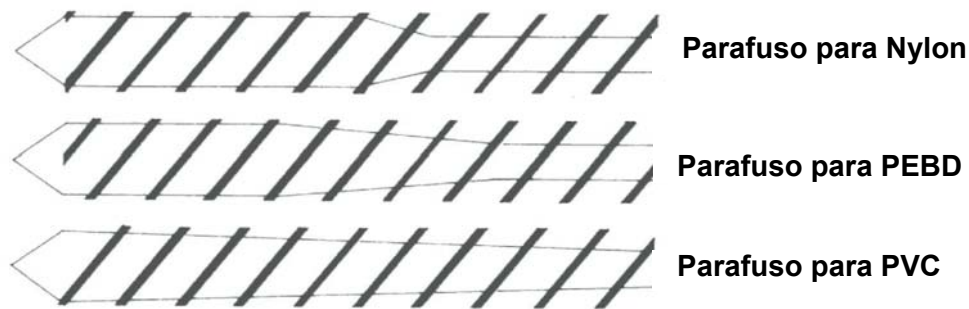


Figura 2.1-5: Exemplos de projetos de parafusos.

Uma alternativa para melhorar o desempenho do processo de plastificação dos polímeros é a utilização de parafusos com filete do tipo barreira, como mostrado na Figura 2.1-6 (Rauwendaal, 1986b) a seguir:

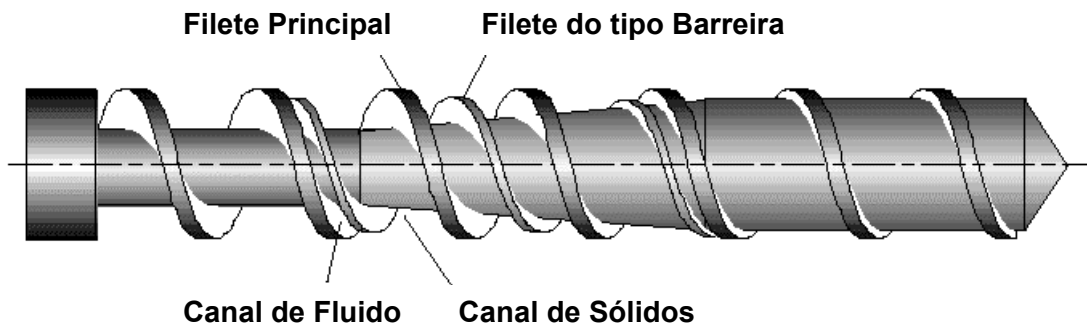


Figura 2.1-6: Parafuso com seção do tipo barreira.

Pode-se ver, na Figura 2.1-6, que o filete do tipo barreira divide o canal principal em um canal de sólidos e um canal de material fluido. O canal de sólidos reduz ao longo da seção do parafuso enquanto que o canal de fluido aumenta. Assim, todo o material plastificado escoar sobre o filete do tipo barreira. No final da seção do tipo barreira, o canal de sólidos desaparece. Como benefício de seu uso, pode-se citar o fato de que diminuem os problemas de pulsação do fluxo (*flow surging*), causados pelo colapso do leito sólido (Rauwendaal, 1986b).

Ao contrário das seções geométricas do parafuso, as posições das zonas funcionais de uma extrusora dependem das condições de operação do equipamento, ou seja, da velocidade de rotação do parafuso e do perfil de temperaturas do barril. Em função disso, geralmente, elas não coincidem com as seções geométricas. Em linhas gerais, a zona de transporte de sólidos refere-se à região em que as partículas sólidas do

polímero escoam por ação da gravidade através do funil de alimentação e pelos canais do parafuso. A zona de plastificação refere-se à região da extrusora em que o polímero muda de fase em função do calor transferido por condução e por dissipação viscosa. A zona de transporte de fluido compreende a região em que o material, já no estado líquido, escoam através dos canais estreitos do parafuso até encontrar a matriz situada na saída da extrusora.

O transporte através da matriz da extrusora é devido à diferença de pressão entre a entrada e a saída da matriz. A vazão na matriz aumenta quando a pressão na entrada da matriz aumenta. Por outro lado, a vazão da extrusora diminui quando a pressão na saída da extrusora aumenta. Cada extrusora e cada matriz apresentam sua própria curva característica. A vazão e a pressão na saída da extrusora são determinadas pela interseção das curvas características da extrusora e da matriz. No ponto de operação, a vazão gerada pela extrusora deve ser igual à vazão que passa através da matriz. A Figura 2.1-7 ilustra as curvas características de uma extrusora de 90 mm de diâmetro e de uma matriz plana de 2000 mm de largura na extrusão de uma amostra de polipropileno com índice de fluidez de 3 g/10'.

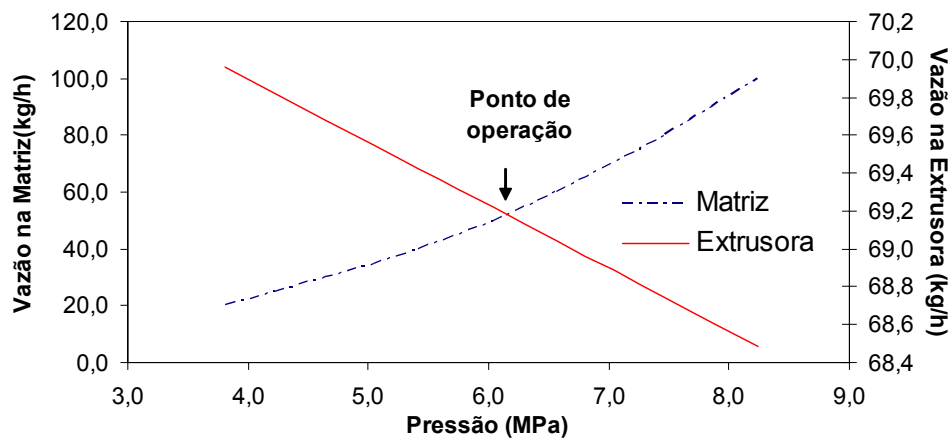


Figura 2.1-7: Curvas características de uma extrusora de 90 mm e de uma matriz plana de 2000 mm de largura na extrusão de uma amostra de PP.

A curva característica da extrusora é determinada, principalmente, pela geometria do parafuso, pela velocidade do parafuso, da temperatura do barril e das propriedades de fluxo do polímero. Um parafuso com canais profundos fornece vazões altas para pressões na saída da extrusora baixas, entretanto, a vazão decresce rapidamente com a pressão. Um parafuso com canais rasos fornece baixas vazões para baixas pressões no cabeçote, mas a vazão não decresce rapidamente com a pressão (Belski, 2002).

A curva característica da matriz é determinada, principalmente, pela geometria do canal de escoamento, pela temperatura e pela viscosidade do polímero fundido. Para obter-se vazões razoáveis, é necessário desenvolver uma pressão mais alta quando se usa uma matriz com uma passagem estreita e restritiva ao fluxo do que quando utiliza-se uma matriz com espaçamento maior entre as paredes. Portanto, uma matriz com alta restrição ao fluxo deve ser combinada com uma extrusora com parafuso raso, enquanto que uma matriz com pouca restrição deve ser combinada com uma extrusora com parafuso profundo. Deve-se considerar também o efeito da temperatura. Em altas temperaturas, o fundido escoar mais facilmente e, portanto, numa dada restrição ao fluxo, uma pressão no cabeçote da matriz menor pode ser utilizada para uma mesma vazão, ou, numa mesma pressão no cabeçote da matriz, uma vazão maior é obtida (Belski, 2002).

2.2 Relações Geométricas em uma Extrusora Convencional

A Figura 2.2-1 (Cunha, 2000) ilustra uma seção do parafuso da extrusora utilizada para estabelecer relações geométricas fundamentais em uma extrusora de parafuso simples.

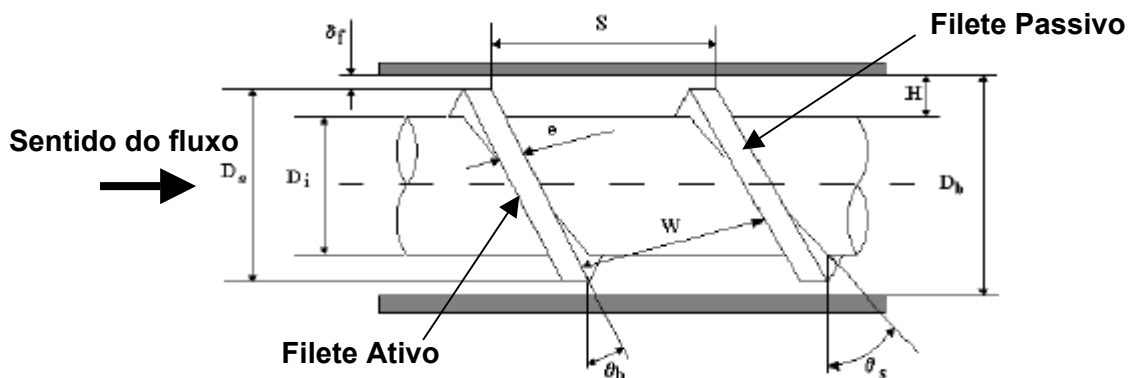


Figura 2.2-1: Características geométricas de uma extrusora convencional.

Na Figura 2.2-1, mostram-se os principais parâmetros geométricos da extrusora, que são: o diâmetro interno do barril (D_b); os diâmetros interno e externo do parafuso (D_i) e (D_s), respectivamente, e a altura do canal (H). O subscrito s refere-se à palavra inglesa *screw* (parafuso). Além disso, mostra-se o passo do parafuso da extrusora (S), que é a distância axial entre dois pontos do filete separados por uma volta inteira do parafuso; a espessura do filete (e) e a distância radial entre o barril e o filete do parafuso (δ_r). Existe

ainda uma distinção entre filete ativo e filete passivo. O filete ativo empurra o material no sentido do fluxo contra o filete passivo.

Em relação à largura do canal do parafuso, W , deve-se considerar dois valores: W_s , considerando o ângulo entre o filete e a raiz do parafuso, θ_s , e W_b , considerando o ângulo entre o filete e o barril, θ_b . Esses ângulos são dados pelas equações abaixo:

$$\theta_s = \arctg\left(\frac{S}{\pi D_i}\right) \quad (2.2-1)$$

$$\theta_b = \arctg\left(\frac{S}{\pi D_s}\right) \quad (2.2-2)$$

Os valores de W_s e W_b são dados pelas seguintes equações:

$$W_s = S \cos(\theta_s) - e \quad (2.2-3)$$

$$W_b = S \cos(\theta_b) - e \quad (2.2-4)$$

Em termos de modelagem matemática do processo, algumas considerações gerais são utilizadas para facilitar o estudo. Uma das hipóteses que mais se emprega no estudo da extrusão foi elaborada por Tadmor e Klein (1970). Considera-se um canal do parafuso “desenrolado” nas análises. Assim, o escoamento ocorre através da seção transversal retangular do canal do parafuso. A grande utilidade dessa hipótese é que, dessa forma, pode-se trabalhar com coordenadas cartesianas no estudo do escoamento. Uma representação do canal é ilustrada na Figura 2.2-2 (Cunha, 2000) a seguir.

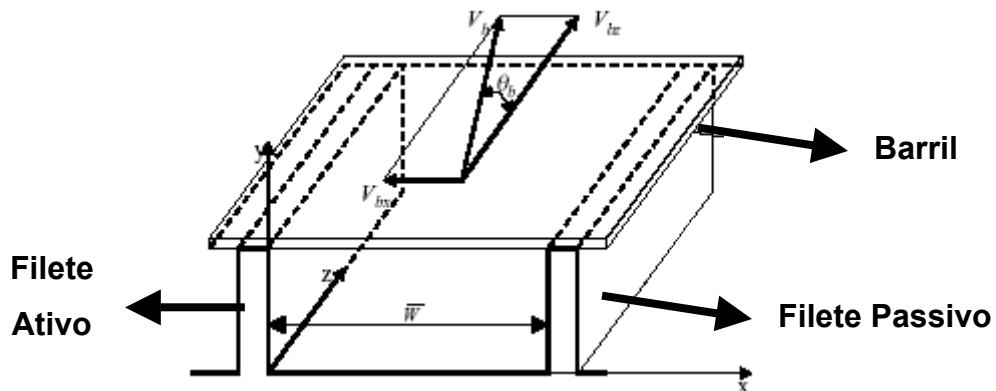


Figura 2.2-2: Representação idealizada do canal do parafuso da extrusora.

Conforme se pode observar na Figura 2.2-2, é comum definir-se z como sendo a coordenada ao longo do eixo do parafuso, y como sendo a coordenada na direção da altura do canal do parafuso e x como sendo a coordenada na direção da largura do canal do parafuso.

Cunha (2000) afirma que o erro introduzido em considerar essa aproximação é desprezível, visto que a altura do canal é muito menor do que o diâmetro do parafuso. Essa hipótese permite que se assuma que as medidas da largura do canal e do ângulo do filete são constantes e dadas por seus valores médios, \bar{W} e $\bar{\theta}$, respectivamente, como:

$$\bar{W} = \frac{W_b + W_s}{2} \quad (2.2-5)$$

e

$$\bar{\theta} = \frac{\theta_b + \theta_s}{2} \quad (2.2-6)$$

Outra hipótese que se emprega é considerar que o parafuso da extrusora permanece estacionário enquanto que o barril gira em uma velocidade, V_b , dada pela seguinte relação:

$$V_b = \pi N D_b \quad (2.2-7)$$

em que N é a velocidade de rotação do parafuso.

Assim, a velocidade, V_b , pode ser dividida em duas componentes: uma na direção ao longo do eixo do parafuso (V_{bz}) e outra na direção transversal ao canal do parafuso (V_{bx}), conforme as equações a seguir:

$$V_{bz} = V_b \cos(\theta_b) \quad (2.2-8)$$

e

$$V_{bx} = V_b \sin(\theta_b) \quad (2.2-9)$$

Essa consideração facilita a análise do processo, pois se recai em situações de escoamento conhecidas como, por exemplo, o fluxo entre placas paralelas e entre cilindros concêntricos. Rauwendaal *et al.* (1998) comprovaram essa hipótese, destacando que ela é válida somente quando existe uma relação entre a altura do canal, H , e o diâmetro do parafuso, D_b , de $H < 0,2D_b$.

Nas próximas seções, como o objetivo de estabelecer uma comparação com os modelos simplificados propostos neste trabalho, apresentam-se os principais modelos utilizados na descrição das zonas funcionais de uma extrusora de parafuso único.

2.3 Modelagem Matemática

Nesta seção, descreve-se a modelagem matemática da zona de transporte de sólidos, da zona de plastificação e da zona de transporte de fluido.

2.3.1 Zona de Transporte de Sólidos

A zona de transporte de sólidos estende-se do funil de alimentação até a posição no parafuso onde a primeira partícula sólida de polímero plastifica. Considera-se essa zona a menos entendida de uma extrusora, devido à falta de equipamentos de medida do

transporte das partículas sólidas e devido à falta de dados de propriedades físicas das resinas.

É comum levar-se em consideração dois tipos de escoamentos na modelagem matemática da zona de transporte de sólidos: o fluxo induzido pela gravidade e o fluxo induzido por arraste.

O fluxo induzido pela gravidade compreende os fenômenos que ocorrem desde o momento em que as partículas sólidas são alimentadas no funil da extrusora até elas alcançarem o parafuso do equipamento. Em geral, o funil da extrusora apresenta uma seção inicial cilíndrica seguida por uma seção cônica. Segundo Rauwendaal (1986a), durante esse trajeto, podem-se distinguir três regiões de escoamento no funil conforme a Figura 2.3-1 (Rauwendaal, 1986a) apresenta:

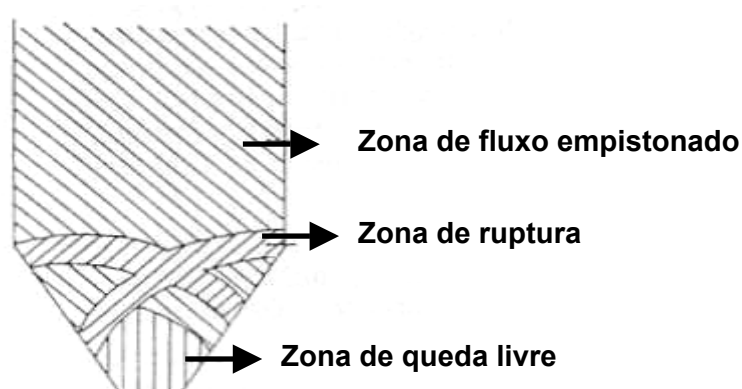


Figura 2.3-1: Zonas de fluxo no funil de uma extrusora.

Na Figura 2.3-1, pode-se observar que, na seção cilíndrica, as partículas tendem a movimentarem-se em fluxo empistonado, em que as partículas sofrem intensa deformação. Na parte cônica, as partículas passam por uma zona intermediária, chamada de zona de ruptura, abaixo da qual existem regiões de fluxo empistonado e regiões em que o material escoava livremente.

Como variáveis de interesse pode-se destacar a distribuição de pressão e a taxa de transporte de sólidos. Em relação à distribuição de pressão, Walker (1966) elaborou a seguinte expressão para o perfil de pressão relativa na seção cilíndrica do funil.

$$P(h) = \frac{\rho_a g R}{2 B D^*} \left[1 - \exp\left(\frac{2 B D^* (h - H)}{R}\right) \right] \quad (2.3-1)$$

em que ρ_a é a massa específica aparente do material; g é a aceleração da gravidade; R é o raio da seção cilíndrica do funil; H é a altura da seção cilíndrica e h é a posição vertical ao longo da seção cilíndrica do funil. O fator D^* é um parâmetro relacionado com a tensão vertical média e com a tensão vertical próxima à parede; e B é a razão entre a tensão de cisalhamento e a tensão normal na parede, dada por:

$$B = \frac{\text{sen}(\beta_e) \text{sen}(2\beta^*)}{1 - \text{sen}(\beta_e) \cos(2\beta^*)} \quad (2.3-2)$$

em que β^* é o ângulo entre o plano principal e a parede do cilindro.

O ângulo β^* está relacionado com o ângulo de atrito efetivo, β_e , e com o ângulo de atrito da parede, $\beta_w = \arctan(f_w^*)$, da seguinte forma:

$$2\beta^* = \arctan(f_w^*) + \arcsen\left(\frac{\text{sen}(\beta_w)}{\text{sen}(\beta_e)}\right) \quad (2.3-3)$$

em que f_w^* é o fator de atrito na parede do funil.

Walker (1966) também derivou duas equações para o cálculo da distribuição de pressões relativas para a seção cônica do funil, dadas por:

$$P(h) = \left(\frac{h}{h_0}\right)^c P_0 + \frac{\rho_a g h}{c-1} \left[1 - \left(\frac{h}{h_0}\right)^{c-1} \right] \quad \text{para } c \neq 1 \quad (2.3-4)$$

$$P(h) = \frac{h}{h_0} P_0 + \rho_a g h \ln\left(\frac{h}{h_0}\right) \quad \text{para } c = 1 \quad (2.3-5)$$

em que h_0 é a posição na direção vertical em que a pressão é P_0 , e o parâmetro c é dado por:

$$c = \frac{2 B' D^*}{\tan(\alpha)} \quad (2.3-6)$$

em que α é o ângulo de inclinação em relação ao eixo vertical do funil.

A razão de tensões B' é dada por:

$$B' = \frac{\text{sen}(\beta_c) \text{sen}(2\alpha + 2\beta^*)}{1 - \text{sen}(\beta_c) \cos(2\alpha + 2\beta^*)} \quad (2.3-7)$$

Em relação à vazão mássica de sólidos através do funil (\dot{M}_f), Hagen (1852) apresentou uma equação para o cálculo de fluxos através de aberturas circulares:

$$\dot{M}_f = \frac{\pi}{4} J_a \rho_a (g (D_a - f_c d_p)^5)^{0,5} \quad (2.3-8)$$

em que J_a é um parâmetro chamado de taxa axissimétrica adimensional, D_a é o diâmetro da abertura, d_p é o diâmetro da partícula e f_c é um fator de correção.

Em se tratando da análise do transporte de sólidos por fluxo de arraste em função do movimento de rotação do parafuso, leva-se em conta os fatores de atrito, o comportamento de compactação da resina, a geometria do parafuso e as condições do processo. O fluxo de arraste depende das forças de atrito entre o plástico e o barril, visto que as forças de atrito entre o plástico e o parafuso causariam rotação do polímero com o parafuso.

Cunha (2000) apresenta uma revisão sobre trabalhos que tratam da modelagem matemática na zona de transporte de sólidos, destacando as teorias desenvolvidas por Darnell e Mol (1956) e, posteriormente, por Tadmor *et al.* (1970, 1972) como as mais aceitas para a descrição desse processo. De maneira geral, essas análises consistem em balanços de força e de torque em um elemento diferencial de uma partícula sólida posicionada perpendicularmente ao filete. No desenvolvimento do modelo para o cálculo da pressão, Darnell e Mol (1956) consideraram que o somatório das forças é igual a zero

na direção helicoidal e que o somatório dos torques é igual a zero na direção tangencial. A Figura 2.3-2 (Cunha, 2000), a seguir, mostra as forças envolvidas no balanço.

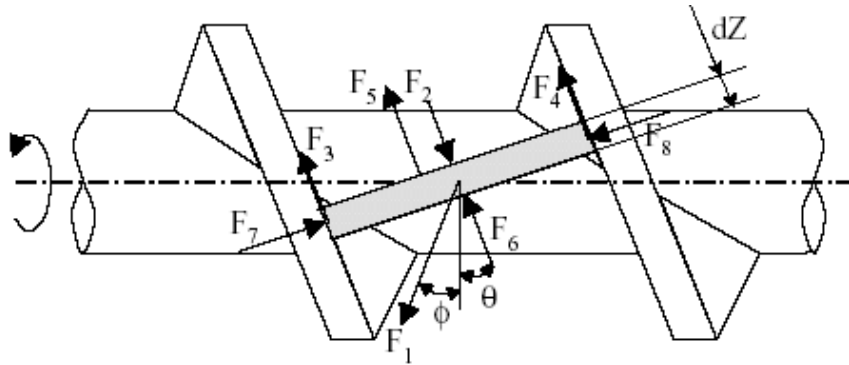


Figura 2.3-2: Forças que agem em um elemento diferencial do leito sólido.

As forças compreendem o atrito entre o barril e o leito sólido (F_1), o atrito devido ao contato das partículas com a raiz do parafuso (F_5) e paredes do parafuso (F_3 e F_4), respectivamente, as reações normais (F_7 e F_8), e as forças devido à pressão (F_6 e F_2).

O perfil de pressões ao longo do eixo do parafuso pode ser descrito pela seguinte expressão (Darnell e Mol, 1956):

$$P_2 = P_1 \exp \left[\int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{B_1 - A_1 K}{B_2 + A_2 K} \right) dz \right] \quad (2.3-9)$$

em que P_1 e P_2 são as pressões nas posições z_1 e z_2 , respectivamente. A_1 , A_2 , B_1 , B_2 e K são constantes dadas por:

$$A_1 = f_b W_b \sin(\varphi) + 2 H f_s \sin(\theta_b) + W_s f_s \sin(\theta_b) \quad (2.3-10)$$

$$A_2 = H \bar{W} \sin(\bar{\theta}) \quad (2.3-11)$$

$$B_1 = f_b W_b \cos(\varphi) - 2 H f_s \sin(\theta_b) \cotg(\bar{\theta}) \frac{\bar{D}}{D_b} - W_s f_s \sin(\theta_b) \cotg(\theta_s) \frac{D_s}{D_b} \quad (2.3-12)$$

$$B_2 = H \bar{W} \cos(\bar{\theta}) \frac{\bar{D}}{D_b} \quad (2.3-13)$$

$$K = \frac{\bar{D} \sin(\bar{\theta}) + f_s \cos(\bar{\theta})}{D_b \cos(\bar{\theta}) - f_s \sin(\bar{\theta})} \quad (2.3-14)$$

em que f_s é o fator de atrito entre o parafuso e o material, f_b é o fator de atrito entre o barril e o material, \bar{D} é o valor médio entre os valores dos diâmetros do barril (D_b) e do parafuso (D_s), e φ é o ângulo do movimento da superfície externa do leito sólido, dado por:

$$\tan(\varphi) = \left[\frac{V_b \rho_s \pi (D_b - H) H}{4 \dot{M}} - \frac{1}{\tan(\theta_b)} \right] \quad (2.3-15)$$

em que ρ_s é a massa específica do sólido; H é a altura do canal do parafuso; e \dot{M} é a vazão mássica total. Nessa expressão, o termo $\pi (D_b - H) H$ representa a área da seção transversal ao escoamento.

Cabe destacar que os modelos de transporte de sólidos estão freqüentemente em discussão, abordando aspectos como a compactação do leito sólido, as diferenças nas características de atrito entre péletes, pós e flocos. Além disso, estudam-se as diferenças no transporte de materiais virgens e regranulados.

O modelo de Darnell e Mol (1956) considera que a tensão é isotrópica para qualquer plano perpendicular ao filete do parafuso. Além disso, o modelo não leva em conta a compactação das partículas sólidas em função do aumento de temperatura e da pressão durante o transporte de sólidos. Na verdade, para alguns polímeros de alta T_g , a aproximação de densidade constante do leito sólido pode ser válida, visto que esses materiais não se compactam apreciavelmente até que eles estejam a uma temperatura de cerca de 20°C a menos do que a T_g .

Atualmente, modelos de transporte de sólidos vem incorporando a tensão anisotrópica nos cálculos da força de atrito nas paredes dos canais do parafuso (Campbell e Baird, 2003) e incluindo os efeitos de compactação do material nos modelos de transporte de sólidos (Spalding et al., 1996).

Campbell e Dontula (1995) consideraram que o leito sólido comporta-se mais como um fluido elástico do que como um sólido e removeram a restrição do balanço de torque. Eles consideraram que a força normal ao filete ativo era devido à combinação da força devido à pressão no canal e a força proporcional à força de atrito exercida no barril pelo leito sólido.

Spalding *et al.* (1990, 1993, 1995a, 1995b) desenvolveram métodos, testados com vários polímeros, que permitem quantificar a densidade aparente e os fatores de atrito como funções da temperatura, da velocidade e da pressão.

Tadmor e Klein (1970) desenvolveram uma equação para o cálculo da vazão volumétrica, Q_s , do leito sólido, dada por:

$$Q_s = (D_b - H)V_b \pi H \left[\frac{\tan(\varphi) \tan(\theta_b)}{\tan(\varphi) + \tan(\theta_b)} \right] \quad (2.3-16)$$

A energia transferida por condução de calor pelos aquecedores do barril, e o calor gerado devido ao atrito entre o polímero e o barril e entre o polímero e o parafuso aumentam a temperatura dos sólidos. Assim, o perfil de temperaturas no leito sólido pode ser obtido através da resolução da equação de energia, considerando advecção de calor ao longo do canal devido ao movimento do polímero e condução de calor na direção radial devido aos gradientes de temperatura. Então, a distribuição de temperatura no canal do parafuso pode ser descrita pela equação abaixo (Cunha, 2000):

$$\rho_s C p_s V_{sz} \frac{\partial T}{\partial z} = k_s \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (2.3-17)$$

em que V_{sz} é a velocidade do leito sólido, ρ_s é a massa específica do sólido, Cp_s é o calor específico do sólido e k_s é a condutividade térmica do sólido. A Figura 2.3-3 (Cunha, 2000), a seguir, ilustra os fluxos de calor devido ao atrito nas várias superfícies em uma região da seção transversal ao canal do parafuso.

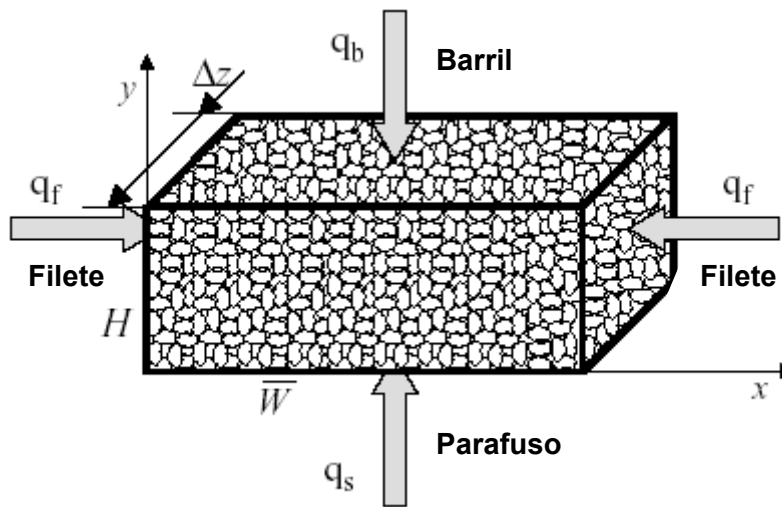


Figura 2.3-3: Fluxos de calor envolvidos no transporte de sólidos.

Em geral, considera-se o fluxo de calor na raiz do parafuso para definir-se a posição onde o polímero alcança a temperatura de fusão.

O calor gerado na superfície do barril é dissipado em dois fluxos: um na direção dos sólidos e outro na direção do barril (Tadmor e Broyer, 1972).

$$q_b = -k_s \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=H} + k_b \left. \frac{\partial T_{cil}}{\partial y} \right|_{y=H} \quad (2.3-18)$$

em que k_s e k_b são a condutividade térmica do polímero sólido e do metal do barril, respectivamente, e T_{cil} é a temperatura no barril da extrusora.

Avalia-se o fluxo de calor transferido por condução através das paredes do barril usando o valor da temperatura do barril (T_b), medida na distância b a partir da interface, e considerando um perfil de temperaturas linear ao longo da espessura do barril:

$$\left. \frac{\partial T_{cil}}{\partial y} \right|_{y=H} \approx \frac{T_b - T_i}{b} \quad (2.3-19)$$

em que T_i é a temperatura do sólido na interface, ou seja, $T_i = T|_{y=H}$.

É mais difícil avaliar o fluxo de calor no parafuso, porque a temperatura do mesmo não é conhecida. Cox e Fenner (1980) propuseram a seguinte equação para avaliar a temperatura do parafuso (T_s):

$$T_s(z) = T_b [1 - \exp(\beta z) + T_{s0} \exp(\beta z)] \quad (2.3-20)$$

em que:

$$\beta = \frac{\left(\frac{T_p - T_b}{T_{s0} - T_b} \right)}{z_m} \quad (2.3-21)$$

e z_m é a distância axial entre o funil de alimentação e a posição onde aparecem os primeiros filmes de fluido nas partes inferior e lateral do parafuso, e T_{s0} é a temperatura do parafuso em $z = 0$.

Pode-se considerar também que a temperatura da superfície do parafuso é constante (e igual à temperatura do polímero na entrada, $T_s(z) = T_{s0} = T_0$) ou assume-se um parafuso adiabático. Nesses casos, pode-se obter o fluxo de calor via:

$$q_s = k_p \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} \quad (2.3-22)$$

em que k_p é a condutividade térmica do metal do parafuso.

Finalmente, em $z = 0$, tem-se a condição de contorno $T|_{z=0} = T_0$

2.3.2 Zona de Plastificação

Modelos teóricos para o transporte de sólidos e de fluido já haviam sido desenvolvidos nos anos 50 ou mesmo antes. Entretanto, uma teoria para a plastificação não havia sido desenvolvida até a metade dos anos 60.

Maddock (1959) foi o primeiro pesquisador a descrever o comportamento da plastificação de polímeros em extrusoras de parafuso único. Suas observações foram baseadas em experimentos de extração do parafuso, em que o mesmo tem seu movimento interrompido e, com o material ainda na extrusora, resfia-se a máquina rapidamente. O parafuso é então retirado do barril, geralmente, com um pistão hidráulico, permitindo que o material no canal do parafuso possa ser analisado em várias posições axiais ao longo da extrusora.

Em seus experimentos, Maddock (1959) observou que, durante o processo de plastificação, o leito sólido localiza-se próximo ao filete passivo do parafuso, enquanto que uma região de fluido (*melt pool*) encontra-se próximo ao filete ativo. Essa descrição foi somente qualitativa, pois ele não tentou modelar o processo de plastificação.

Com base no trabalho experimental de Maddock (1959), Tadmor (1966) e Tadmor *et al.* (1967) desenvolveram o primeiro modelo matemático para a descrição da zona de plastificação de extrusoras de parafuso único. Eles representaram o processo de plastificação em 2 estágios. Primeiro, as partículas sólidas em contato com a superfície interna do barril aquecido plastificam, formando uma fina camada de fluido próximo à superfície do barril. Em seguida, essa camada vai crescendo em espessura até que o material plastificado consiga escoar até os canais do parafuso, formando uma região de fluido situado próximo ao filete ativo do parafuso. A partir desse ponto, o processo de plastificação progride ao longo da largura do canal do parafuso e termina após todo o canal tornar-se preenchido de fluido. Uma representação do processo de plastificação é apresentada na Figura 2.3-4 (Cunha, 2000) a seguir:

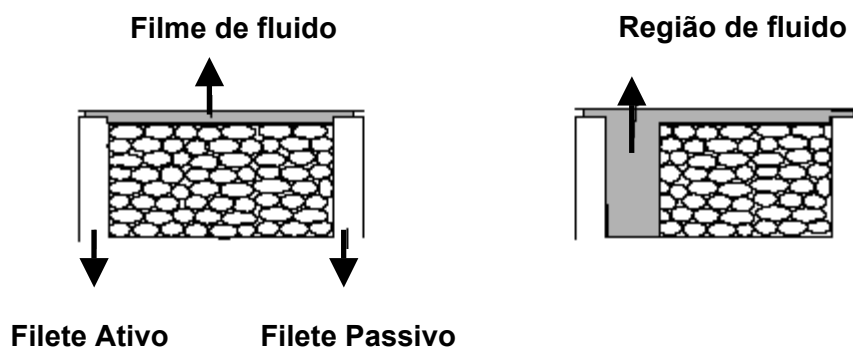


Figura 2.3-4: Mecanismo de plastificação de Tadmor.

Embora esse mecanismo de plastificação, em princípio, pareça ser geral tanto para polímeros amorfos quanto para polímeros semicristalinos, para extrusoras pequenas quanto para extrusoras grandes, e para diversas condições de operação do equipamento, algumas exceções já foram registradas na literatura. Menges e Klenk (1967), por exemplo, observaram uma situação relacionada à extrusão de PVC, em que a região de fluido formava-se próximo ao filete passivo do parafuso ao invés de formar-se próximo ao filete ativo. Já Dekker (1976) fez observações do comportamento da plastificação do polipropileno, não detectando alguma região de fluido em qualquer lado do canal, mas sim um leito sólido circundado por fluido. Esse mecanismo de plastificação foi modelado por Lindt (1985), que foi capaz de prever os perfis de leito sólido e de pressão ao longo da extrusora.

Além disso, investigadores vêm modificando outras hipóteses presentes no modelo original de Tadmor (1966) e de Tadmor *et al.* (1967). Em geral, os modelos diferem em termos das condições inicial e de contorno, considerando se o leito sólido é rígido ou não, i.e., se a velocidade ao longo do canal é constante ou variável, na lei de escoamento para o fluido, etc. Donovan (1971), por exemplo, introduziu no modelo de Tadmor (1966) e de Tadmor *et al.* (1967) um parâmetro empírico que descreve a aceleração do leito sólido, sendo assim capaz de prever um aumento na temperatura do material ao longo do eixo da extrusora. Edmondson e Fenner (1975) também incluíram a aceleração do leito sólido em seu modelo e concluíram que o colapso do leito sólido ocorre quando o modelo prediz rápida aceleração do leito.

Em relação às considerações se o leito sólido é rígido ou livremente deformável. Lindt *et al.* (1984, 1985) modelaram essas duas situações para estimar a velocidade do leito sólido, V_{sz} , como segue:

$$V_{sz} = \frac{\dot{M}}{\rho_s H_0 W} \quad \text{para leito sólido rígido} \quad (2.3-23)$$

em que \dot{M} é a vazão mássica total, ρ_s é massa específica do polímero no estado sólido, H_0 é a altura do canal na seção de alimentação; e W é a largura do canal.

$$V_{sz} \Big|_z = \frac{\dot{M}_A \Big|_z}{\rho_s H_s W_s} \quad \text{para leito sólido livremente deformável} \quad (2.3-24)$$

em que $\dot{M}_A|_z$ é a vazão mássica de sólido na zona de plastificação na posição axial z . Observa-se que tanto a largura do canal, W_s , quanto a altura do canal, H_s , do leito sólido variam com z .

Lindt e Elbirli (1985) concluíram que a hipótese de leito sólido rígido fornece predições mais realísticas do que a consideração de leito sólido livremente deformável.

No entanto, dentre esses trabalhos baseados no modelo de Tadmor *et al.* (1966, 1967), Person *et al.* (1976, 1978) desenvolveram uma das mais elaboradas extensões das análises da zona de plastificação de extrusoras de parafuso único. Eles dividiram a zona de plastificação em 5 regiões, conforme a Figura 2.3-5 (Cunha, 2000) a seguir:

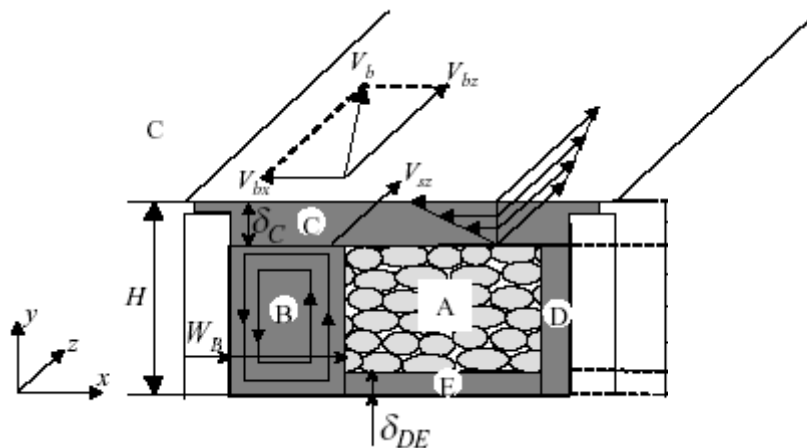


Figura 2.3-5: Representação do canal do parafuso durante a plastificação.

Na Figura 2.3-5, *A* representa o leito sólido; *B* representa a região de fluido; *C* representa o filme de fluido entre a superfície do barril e o leito sólido; *D* representa o filme de fluido entre o filete passivo do parafuso e o leito sólido; e *E* representa o filme de fluido entre a raiz do parafuso e o leito sólido.

Com base nas hipóteses de Lindt (1985) de fluxo completamente desenvolvido nas direções ao longo do canal e transversal ao canal do parafuso e de que o material no estado fluído circunda o leito sólido, as equações de balanço de quantidade de movimento para os filmes *C*, *D* e *E* são as seguintes:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial V_x}{\partial y} \right) \quad (2.3-25)$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial V_z}{\partial y} \right) \quad (2.3-26)$$

O balanço de energia é descrito pela seguinte equação:

$$\rho_1 C_{p1} V_z \frac{\partial T}{\partial z} = k_l \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \eta \left[\left(\frac{\partial V_x}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (2.3-27)$$

Nas equações 2.3-25, 2.3-26 e 2.3-27, η é a viscosidade do polímero, que varia com a taxa de cisalhamento e com a temperatura. O segundo termo do lado direito da equação 2.3-27 representa a dissipação viscosa do material.

Visto que, para alguns polímeros, a viscosidade pode mudar por um fator de 10, 100 ou 1000, em função da taxa de cisalhamento e da temperatura aplicadas, tais variações não podem ser ignoradas nos cálculos aplicados à extrusão. Em função disso, acha-se oportuno explorar o comportamento da viscosidade dos polímeros antes de continuar a revisão sobre a modelagem matemática do processo de extrusão, pois a reologia apresenta um papel importante neste trabalho. A Figura 2.3-6 apresenta uma curva de viscosidades típica de polímeros destacando as diferentes regiões da mesma.

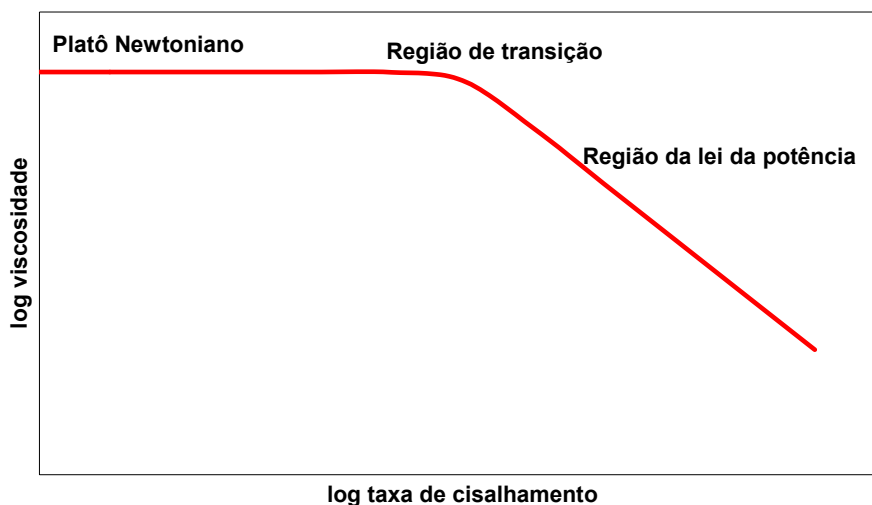


Figura 2.3-6: Curva de viscosidades típicas de polímeros.

Como se sabe, o cisalhamento alinha as moléculas na direção do escoamento. Entretanto, em baixas taxas de cisalhamento, esse efeito é pequeno e tende a ser dominado pelo movimento Browniano. Isso resulta em uma mínima mudança na microestrutura do material, e a resistência ao escoamento é alta, portanto, a viscosidade também é alta. Na região onde o movimento Browniano predomina, a viscosidade é relativamente independente da taxa de cisalhamento. O comportamento em baixas taxas de cisalhamento é, portanto, Newtoniano (Platô Newtoniano). Quando se aumenta a taxa de cisalhamento, a tendência de alinhamento na direção do fluxo começa a predominar, resultando em um parcial alinhamento das moléculas. Esse alinhamento parcial nas cadeias poliméricas conduz a uma pequena diminuição da resistência ao fluxo (região de transição). Esse processo continua até que o máximo alinhamento das moléculas e, portanto, a mínima resistência ao fluxo seja alcançada (região da lei da potência). Essa diminuição da viscosidade dos polímeros com a taxa de cisalhamento é conhecida como pseudoplasticidade. Assim, nos processos de transformação de plásticos em que existe cisalhamento, à medida que se aumenta a taxa de deformação do material, mais facilmente o mesmo irá escoar.

As equações constitutivas mais largamente utilizadas na descrição do comportamento pseudoplástico dos polímeros são do tipo Fluido Newtoniano Generalizado (FNG), que é o resultado de uma pequena modificação na lei da viscosidade de Newton permitindo que a viscosidade varie com a taxa de deformação.

Para levarem-se em consideração os efeitos não-Newtonianos, é comum definir a viscosidade com uma função da taxa de deformação e da temperatura para calcular o tensor tensão, $\underline{\underline{\tau}}$, conforme a equação a seguir:

$$\underline{\underline{\tau}} = \eta(T, \dot{\underline{\underline{\gamma}}}) \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (2.3-28)$$

em que η é a viscosidade, T é a temperatura, e $\dot{\underline{\underline{\gamma}}}$ é o tensor taxa de deformação, definido na equação a seguir:

$$\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = \nabla \underline{v} + (\nabla \underline{v})^t \quad (2.3-29)$$

em que $\nabla \underline{v}$ representa o tensor gradiente de velocidade.

A magnitude do tensor taxa de deformação é definida na equação a seguir:

$$\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = \sqrt{\frac{1}{2} II} \quad (2.3-30)$$

em que II é o segundo invariante do tensor taxa de deformação, que é definido na equação 2.3-31:

$$II = \sum_i \sum_j \dot{\gamma}_{ij} \dot{\gamma}_{ji} \quad (2.3-31)$$

Os componentes do tensor taxa de deformação na equação 2.3-31 são definidos na equação 2.3-32 a seguir:

$$\dot{\gamma}_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (2.3-32)$$

Em fluxo cisalhante simples, $\dot{\gamma}_{ij} = \dot{\gamma}_{ji} = \dot{\gamma}$, assim, $II = 2\dot{\gamma}^2$ (Bird *et al.*, 1987).

A dependência da viscosidade dos polímeros com a taxa de cisalhamento e com a temperatura pode ser fatorada conforme a equação 2.3-33 (Menges e Osswald, 1996):

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = a(T) \cdot \eta_{\text{ref}}(\dot{\gamma}) \quad (2.3-33)$$

em que $\eta(T, \dot{\gamma})$ é a viscosidade em regime de cisalhamento, $a(T)$ é uma função que descreve a dependência da viscosidade com a temperatura, $\eta_{\text{ref}}(\dot{\gamma})$ é uma função que descreve a dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento em uma temperatura de referência (T_{ref}).

Algumas das equações constitutivas mais utilizadas na descrição do comportamento não-Newtoniano dos polímeros são os modelos da lei da potência (De Waele, 1923, Ostwald, 1925) e de Carreau-Yasuda (Carreau, 1968, Yasuda, 1979).

O modelo da lei da potência (de Waele, 1923, Ostwald, 1925) representa precisamente a região pseudoplástica na curva de viscosidades *versus* taxa de deformação. No entanto, esse modelo negligencia o platô Newtoniano. A equação 2.3-35 representa o modelo da lei da potência.

$$\eta_{\text{ref}}(\dot{\gamma}) = m \dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.3-34)$$

em que m é o índice de consistência, e n o índice da lei das potências. O índice de consistência pode incluir a dependência da viscosidade com a temperatura. O índice da lei da potência quantifica o comportamento pseudoplástico dos polímeros.

Para $n < 1$ ¹ (materiais pseudoplásticos), os limites desse modelo são $\eta \rightarrow 0$ quando $\dot{\gamma} \rightarrow \infty$ e $\eta \rightarrow \infty$ quando $\dot{\gamma} \rightarrow 0$. Essa viscosidade infinita na condição de taxa de cisalhamento igual a zero conduz a resultados errôneos em problemas em que existe uma região de taxa de cisalhamento nula, tais como no centro de um tubo.

¹ Existem materiais, chamados de dilatantes, que apresentam a condição de $n > 1$, ou seja, sua viscosidade aumenta com a taxa de cisalhamento.

Em simulação computacional do escoamento de polímeros, esse problema é contornado pelo uso de um modelo truncado, tal como mostrado a seguir:

$$\eta_{\text{ref}}(\dot{\gamma}) = m_0 \dot{\gamma}^{n-1}, \text{ para } \dot{\gamma} > \dot{\gamma}_0 \quad (2.3-35a)$$

$$\eta_{\text{ref}}(\dot{\gamma}) = m_0, \text{ para } \dot{\gamma} \leq \dot{\gamma}_0 \quad (2.3-35b)$$

em que m_0 representa a viscosidade à taxa de deformação nula no modelo da lei da potência truncado.

O modelo de Carreau-Yasuda (Carreau, 1968, Yasuda, 1979), dado pela equação 2.3-38, por apresentar 5 parâmetros, tem a flexibilidade de ajustar a curva de viscosidades em uma ampla faixa de taxas de cisalhamento.

$$\eta_{\text{ref}}(\dot{\gamma}) = (\eta_0 - \eta_\infty) \left[1 + (\lambda \dot{\gamma}^a) \right]^{\left(\frac{n-1}{a} \right)} + \eta_\infty \quad (2.3-36)$$

em que η_0 é a viscosidade à taxa de deformação nula, η_∞ é a viscosidade à taxa de deformação infinita, λ é uma constante de tempo, n é o índice da lei da potência e a é um parâmetro adimensional que descreve a transição entre o platô Newtoniano e a região da lei da potência. Em geral, ignora-se a viscosidade à taxa de deformação infinita, pois, dificilmente, conseguem-se obter dados experimentais a taxas de cisalhamento tão altas.

Outro modelo que se utiliza na descrição da dependência da viscosidade dos polímeros com a taxa de cisalhamento é o modelo de Cross (1965). Esse modelo é análogo ao modelo de Carreau-Yasuda (Carreau, 1968, Yasuda, 1979), no entanto, o parâmetro a tem um valor fixo igual a 1.

Antes de discutir-se o efeito da temperatura na viscosidade, é necessário estabelecer as diferenças no comportamento dos polímeros a baixas temperaturas. Alguns polímeros são quase que completamente amorfos e alguns são semicristalinos. Polímeros amorfos são compostos por cadeias distribuídas aleatoriamente no espaço e apresentam uma temperatura característica em que eles mudam de frágil a materiais com comportamento similar a elastômeros. Chama-se esse ponto de temperatura de transição vítrea (T_g). Nessa temperatura, existe uma mudança na inclinação da curva de volume

específico *versus* temperatura. Acima da T_g , as moléculas são cadeias flexíveis; abaixo dela, as cadeias são rígidas (Tanner, 1985). Polímeros semicristalinos, abaixo de sua temperatura de fusão (T_m), possuem regiões cristalinas e amorfas. Assim, existe uma região em que o material é frágil ($T < T_g$), uma região em que o material é tenaz ($T_g < T < T_m$), e uma região em que o material é flexível ($T > T_m$). Existe um salto na curva de volume específico na fusão para esses materiais.

Com base no que foi dito, as análises da dependência da viscosidade com a temperatura devem envolver duas temperaturas em especial: a T_g (para polímeros amorfos) e a T_m (para polímeros semicristalinos).

A Figura 2.3-7, a seguir, ilustra o efeito da temperatura na viscosidade de uma amostra de poliestireno de alto impacto (HIPS).

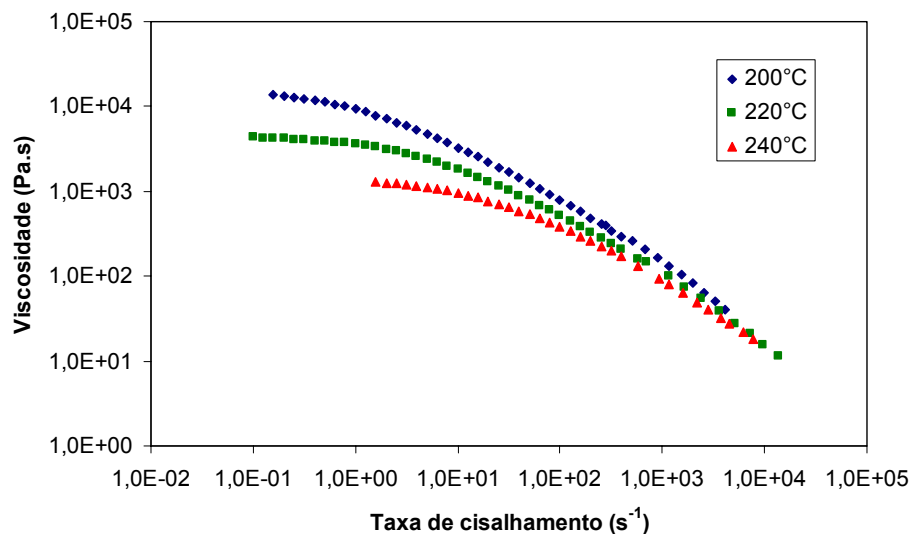


Figura 2.3-7: Efeito da temperatura na curva de viscosidades do HIPS.

Conforme se pode observar na Figura 2.3-7, uma variação de 40°C, corresponde a uma variação de, aproximadamente, uma ordem de magnitude no valor da viscosidade do HIPS em baixas taxas de cisalhamento. Além disso, observa-se que a forma das curvas é similar nas três temperaturas testadas. Essa similaridade fornece a base para um importante método empírico conhecido como “método das variáveis reduzidas” ou “método da superposição tempo-temperatura” que combina dados obtidos em diferentes temperaturas em uma curva mestra (Bird *et al.*, 1987). Com isso, pode-se avaliar o comportamento da curva de viscosidades em uma faixa ampla de taxas de cisalhamento.

Para obter-se uma curva mestra, $\log \eta$ versus $\log \dot{\gamma}$, em uma temperatura de referência arbitrária, T_{ref} , segue-se o seguinte procedimento (Bird *et al.*, 1987):

- (1) a curva em uma temperatura T qualquer é movimentada verticalmente por uma quantidade $\log [\eta_0(T_{ref}) / \eta_0(T)]$;
- (2) a curva resultante é então transladada horizontalmente por uma quantidade $\log a(T)$ de tal maneira que as curvas de viscosidades em T_{ref} e em T superponham-se. O fator $a(T)$ é definido como:

$$a(T) = \frac{\eta_0(T) T_{ref} \rho_{ref}}{\eta_0(T_{ref}) T \rho} \quad (2.3-37)$$

em que ρ é a massa específica do material na temperatura T , e ρ_{ref} é a massa específica na temperatura T_{ref} . Por ser pequena a variação da massa específica com a temperatura, é usual negligenciá-la, assim, o método das variáveis reduzidas prediz que uma curva mestra pode ser obtida pela construção de um gráfico da viscosidade reduzida, η_r , versus a taxa de cisalhamento reduzida, $\dot{\gamma}_r$, definidos como:

$$\eta_r = \eta(\dot{\gamma}, T) \frac{\eta_0(T_{ref})}{\eta_0(T)} = \frac{\eta(\dot{\gamma}, T) T_{ref}}{a(T) T} \quad (2.3-38)$$

e

$$\dot{\gamma}_r = a(T) \dot{\gamma} \quad (2.3-39)$$

Na Figura 2.3-8, a seguir, mostra-se a curva mestra em 200°C construída com os dados de viscosidades a 200°C, 220°C e a 240°C mostrados na Figura 2.3-7.

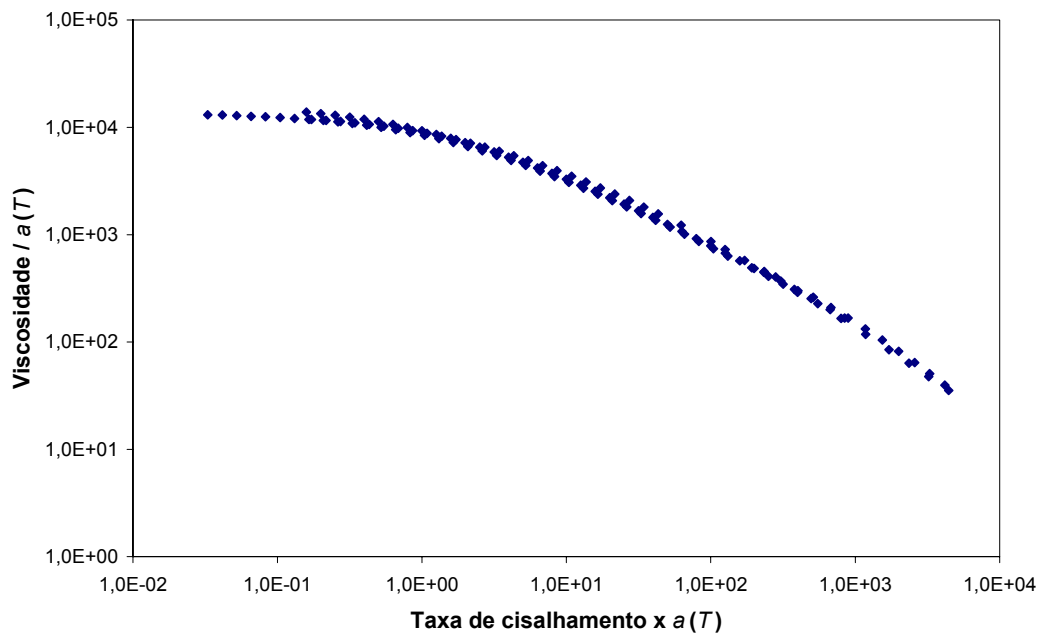


Figura 2.3-8: Curva mestra de viscosidades a 200°C do HIPS

Pode-se observar, na Figura 2.3-8, que, aplicando-se o método das variáveis reduzidas, toda informação sobre a dependência da viscosidade com a temperatura e com a taxa de cisalhamento da amostra de HIPS está reunida em uma só curva (curva mestra).

Geralmente, o efeito da temperatura na viscosidade é modelado considerando-se dois diferentes mecanismos (Macosko, 1994; Tanner, 1985; Bird *et al.*, 1987).

- Para $T_g < T < T_g + 100^\circ\text{C}$, o decréscimo na viscosidade é explicado pelo volume livre criado pela expansão térmica (Equação WLF, a seguir).
- Para $T > T_g + 100^\circ\text{C}$, as moléculas movem-se através de saltos em sítios não ocupados (Equação de Andrade-Eyring, a seguir).

A equação Williams-Landel-Ferry, WLF, (Williams *et al.*, 1955) é a seguinte:

$$\log a(T) = \frac{-C_1 (T - T_{ref})}{C_2 + (T - T_{ref})} \quad (2.3-40)$$

Se T_{ref} for escolhida como sendo a temperatura de transição vítrea (T_g), $C_1 = 17,44$ e $C_2 = 51,6$ K. Essas constantes são úteis quando dados de viscosidade de um polímero não estão disponíveis. Quando se dispõe de dados de viscosidades, é preferível tomar $C_1 = 8,86$ e $C_2 = 101,6$ K, ajustando-se T_{ref} .

Uma descrição da dependência da viscosidade com a temperatura do tipo Arrhenius proposta por Andrade-Eyring (Macosko, 1994) é a seguinte:

$$\eta_0 = K \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.3-41)$$

em que K é uma constante, E_a é a energia de ativação para o fluxo, R é a constante universal dos gases ($8,314 \text{ JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$) e T é a temperatura absoluta. Valores encontrados na literatura (Macosko, 1994) para E_a estão na faixa de 25 - 85 kJ/mol.

Essa equação também é apresentada da seguinte forma (Flow 2000, 2002):

$$a(T) = \exp(-b(T - T_{ref})) \quad (2.3-42)$$

em que $b = \frac{E_a}{RT^2}$.

Neste trabalho, atribuiu-se à equação 2.3-42 a nomenclatura de modelo de Andrade-Eyring modificado.

Considera-se que os conceitos reológicos mencionados são suficientes para continuar-se a descrição da modelagem do processo de extrusão. Dessa forma, substituindo o termo da viscosidade nas equações 2.3-25, 2.3-26 e 2.3-27, pelos modelos da lei da potência e de Andrade-Eyring modificado chega-se à seguinte expressão:

$$\eta = m_0 \exp(-b(T - T_{ref})) \left[\left(\frac{\partial V_z}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_x}{\partial y} \right)^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (2.3-43)$$

De acordo com as regiões apresentadas na Figura 2.3-5, as condições de contorno para a região C são:

$$\begin{cases} V_x(y=0)=0 \\ V_x(y=\delta_c)=-V_{bx} \end{cases} \quad \begin{cases} V_z(y=0)=V_{sz} \\ V_z(y=\delta_c)=V_{bz} \end{cases} \quad \begin{cases} T(y=0)=T_p \\ T(y=\delta_c)=T_b \end{cases} \quad (2.3-44)$$

As condições de contorno para as regiões D e E são:

$$\begin{cases} V_x(y=0)=0 \\ V_x(y=\delta_{DE})=0 \end{cases} \quad \begin{cases} V_z(y=0)=0 \\ V_z(y=\delta_{DE})=V_{sz} \end{cases} \quad \begin{cases} T(y=0)=T_s \\ T(y=\delta_{DE})=T_p \end{cases} \quad (2.3-45)$$

Em relação à zona B, o balanço da quantidade de movimento pode ser escrito como:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial V_z}{\partial y} \right) \quad (2.3-46)$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial V_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial V_z}{\partial y} \right) \quad (2.3-47)$$

A equação de energia pode ser escrita como:

$$\rho_l C p_l V_z(y) \frac{\partial T}{\partial z} = k_l \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \eta \left[\left(\frac{\partial V_x}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (2.3-48)$$

Nesse caso, a expressão da viscosidade é modificada no termo da taxa de cisalhamento, resultando na seguinte equação:

$$\eta = m_0 \exp(-b(T - T_{ref})) \left[\left(\frac{\partial V_z}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_x}{\partial y} \right)^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (2.3-49)$$

As condições de contorno são:

$$\begin{cases} V_x(y=0)=0 \\ V_x(y=H)=-V_{bx} \end{cases} \quad \begin{cases} V_z(x=0)=0 \\ V_z(x=W_B)=V_{sz} \\ V_z(y=0)=0 \\ V_z(y=H)=V_{bz} \end{cases} \quad \begin{cases} T(x=0)=T_s \\ T(x=W_B)=T_p \\ T(y=0)=T_s \\ T(y=H)=T_b \end{cases} \quad (2.3-50)$$

Em relação à zona A, a equação de energia para o leito sólido pode ser descrita por:

$$\rho_s C p_s \left(V_{sy} \frac{\partial T}{\partial y} + V_{sz} \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k_s \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (2.3-51)$$

em que V_{sy} é a velocidade na direção da interface sólido-filme de fluido.

As condições de contorno são:

$$\begin{cases} V_{sy}(y=0)=-V_{sy2} \\ V_{sy}(y=H_s)=V_{sy1} \end{cases} \quad \begin{cases} T(z=0)=T_{z0}(y) \\ T(y=0)=T_p \\ T(y=H_s)=T_p \end{cases} \quad (2.3-52)$$

em que $T_{z0}(y)$ é o perfil de temperatura na direção y em $z=0$; e H_s é a altura do leito sólido.

A distribuição de temperaturas no interior do leito sólido não pode ser simétrica, visto que as interfaces AC e AE são expostas a diferentes taxas de calor. Portanto, para definir-se as condições de contorno do leito sólido, dividiu-se a zona A em duas diferentes direções: V_{sy2} descrevendo a velocidade do leito sólido no sentido do parafuso e V_{sy1} descrevendo a velocidade do leito sólido no sentido da superfície do barril. Assim, existe uma posição em $y = a^*$ em que $V_{sy} = 0$, com as seguintes relações entre V_{sy} e V_{sy1} e entre V_{sy} e V_{sy2} :

$$V_{sy} = V_{sy1} \left(\frac{y - a^*}{H_s - a^*} \right) \quad \text{para } a^* \leq y \leq H_s \quad (2.3-53a)$$

$$V_{sy} = V_{sy2} \left(\frac{a^* - y}{a^*} \right) \quad \text{para } 0 \leq y \leq a^* \quad (2.3-53b)$$

As condições de contorno presentes nas equações 2.3-44, 2.3-45, 2.3-50 e 2.3-52 mostram a temperatura de plastificação (T_p) como condição de contorno para as equações de energia. Resolveu-se utilizar essa nomenclatura em vez de T_m , pois se quer diferenciar a temperatura de fusão, que é uma propriedade térmica, do parâmetro T_p , que é utilizado em simulações computacionais para definir o ponto acima do qual se muda dos modelos de transporte de sólidos para os modelos de plastificação. A temperatura de fusão é uma propriedade que não há equivalente para polímeros amorfos. No entanto, em termos de simulação, deve-se utilizar um valor de temperatura que caracterize o processo de plastificação e que seja aplicável para polímeros semicristalinos e para polímeros amorfos. Em função disso, T_p apresenta um significado funcional, ou seja, desde que consiga representar bem os dados experimentais, ele é aplicável. Por exemplo, Han et al. (1996) obtiveram, através do ajuste de seu modelo a dados experimentais de pressão ao longo da extrusora, valores de $T_g + 55^\circ\text{C}$ como a temperatura de plastificação para o poliestireno e para o policarbonato (ambos polímeros amorfos), conduzindo a boa concordância com dados experimentais na predição do processo.

Para que seja possível a resolução dos sistemas de equações diferenciais apresentados para as cinco diferentes regiões (A , B , C , D e E), deve-se realizar o balanço de massa para cada uma delas (Han et al., 1996).

A vazão mássica na região A , na direção z , \dot{M}_{Az} , é determinada pelas taxas de plastificação nas interfaces sólido/líquido AC (R_{AC}) e AD e AE (R_{ADE}), i.e.,

$$\dot{M}_{Az} \Big|_{z+\Delta z} = \dot{M}_{Az} \Big|_z - R_{AC} - R_{ADE} \quad (2.3-54)$$

A vazão mássica na região B na direção z , \dot{M}_{Bz} , é determinada pela vazão mássica total, \dot{M} , pela vazão mássica no leito sólido na direção z , \dot{M}_{Az} , pela vazão mássica na região C na direção z , \dot{M}_{Cz} , e pela vazão mássica nas regiões D e E na direção z , i.e.,

$$\dot{M}_{Bz}|_z = \dot{M} - \dot{M}_{Az}|_z - \dot{M}_{Cz}|_z - \dot{M}_{DEz}|_z \quad (2.3-55)$$

A vazão mássica na região C na direção z , \dot{M}_{Cz} , é determinada pela taxa de plastificação na interface sólido/líquido AC (R_{AC}), pela vazão mássica na região C na direção x , \dot{M}_{Cx} , e pela vazão mássica nas regiões D e E na direção x , \dot{M}_{DEx} , i.e.,

$$\dot{M}_{Cz}|_{z+\Delta z} = \dot{M}_{Cz}|_z + R_{AC} - \dot{M}_{Cx}|_z + \dot{M}_{DEx}|_z \quad (2.3-56)$$

A vazão mássica nas regiões D e E na direção z , \dot{M}_{DEz} , é determinada pela taxa de plastificação nas interfaces sólido/líquido AC e ADE (R_{ADE}) e pela vazão mássica nas regiões D e E na direção x , \dot{M}_{DEx} , i.e.,

$$\dot{M}_{DE}|_{z+\Delta z} = \dot{M}_{DE}|_z - \dot{M}_{DEx}|_z + R_{ADE} \quad (2.3-57)$$

Nas equações acima,

$$\dot{M}_{Cz}|_z = W_s \rho_m \int_0^{\delta_C} V_z^{(C)}(y) dy \quad (2.3-58)$$

$$\dot{M}_{Cx}|_z = \Delta z \rho_m \int_0^{\delta_C} V_x^{(C)}(y) dy \quad (2.3-59)$$

$$\dot{M}_{DEz}|_z = (W_s + H_s) \rho_m \int_0^{\delta_{DE}} V_z^{(DE)}(y) dy \quad (2.3-60)$$

$$\dot{M}_{DEx}|_z = \Delta z \rho_m \int_0^{\delta_{DE}} V_x^{(C)}(y) dy \quad (2.3-61)$$

$$R_{AC} = \rho_s V_{sy1} W_s \Delta z \quad (2.3-62)$$

$$R_{ADE} = \rho_s V_{sy2}|_z \Delta z (H_s + W_s) \quad (2.3-63)$$

em que $V_z^{(C)}$ e $V_x^{(C)}$ são, respectivamente, as velocidades V_z e V_x na região **C** e $V_z^{(DE)}$ e $V_x^{(DE)}$ são, respectivamente, as velocidades V_z e V_x na região **DE**.

As velocidades do polímero sólido nas direções dos filmes de fluido **C** (V_{sy1}) e **DE** (V_{sy2}) podem ser determinadas pelos balanços de energia sobre as interfaces **A-C** e **A-DE** respectivamente. As equações correspondentes são, respectivamente:

em que:

$$k_l \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{A-C, \text{fluido}} - k_s \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{A-C, \text{sólido}} = \rho_s \Delta H_f V_{sy1} \quad (2.3-64)$$

$$k_s \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{A-DE, \text{sólido}} - k_l \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{A-DE, \text{fluido}} = \rho_s \Delta H_f V_{sy2} \quad (2.3-65)$$

em que ΔH_f é a entalpia de fusão do polímero.

A análise torna-se completa com a avaliação do equilíbrio de forças que agem no leito sólido nas direções x e y :

$$\frac{\partial P^{(C)}}{\partial x} + \frac{\partial P^{(DE)}}{\partial x} = \frac{2(\tau_{yx|DE} + \tau_{yx|C})}{H_s} \quad (2.3-66)$$

$$\frac{\partial P^{(C)}}{\partial z} + \frac{\partial P^{(DE)}}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial z} \left(= \frac{\partial P^{(B)}}{\partial z} \right) \quad (2.3-67)$$

e com a condição de continuidade de pressão ao longo do leito sólido:

$$\frac{\partial P^{(C)}}{\partial x} W_s = \frac{\partial P^{(DE)}}{\partial x} (W_s + H_s) \quad (2.3-68)$$

em que $\tau_{yx|DE}$ e $\tau_{yx|C}$ são as tensões de cisalhamento que agem nas interfaces **A-DE** e **A-C**, respectivamente.

Os vários sistemas de equações estão sujeitos às seguintes restrições geométricas:

$$\delta_C + H_s + \delta_{DE} = H \quad (2.3-69)$$

$$W_B + W_s + \delta_{DE} = W \quad (2.3-70)$$

2.3.3 Zona de Transporte de Fluido

A descrição matemática do transporte de fluido é a mais bem sucedida das três zonas funcionais. Como já se mencionou, visto que a altura do canal é muito menor do que o raio do barril, freqüentemente, o canal helicoidal é desenrolado e um escoamento em 2D de um fluido pseudoplástico é simulado sem a perda de precisão considerável.

A maioria das análises do transporte de fluido pode ser dividida em 5 hipóteses mais relevantes sobre o processo (Rauwendaal, 1986a):

- Relação tensão e taxa de cisalhamento (Linear – Newtoniano; Não-linear - não-Newtoniano);
- Direção do escoamento (unidimensional – somente ao longo do canal; bidimensional – ao longo do canal e transversal ao canal; tridimensional – ao longo do canal, transversal ao canal e na direção radial);
- Efeitos dos flancos do filete (desprezível – largura do canal infinito; não-desprezível – largura do canal finito);
- Efeitos da temperatura (viscosidade do fluido independente da temperatura; viscosidade do material dependente da temperatura);
- Distância radial entre o barril e o filete do parafuso (desprezível – zero; não-desprezível – finito).

De acordo com Amellal *et al.* (1989), Fenner (1977), que comparou resultados experimentais com resultados teóricos obtidos usando vários modelos, concluiu que, para maioria das propostas práticas, análises bi-dimensionais de fluxos não-isotérmicos de materiais não-Newtonianos fornecem predições satisfatórias.

Em função disso, as equações 2.3-25, 2.3-26, 2.3-27 e 2.3-43 são aplicáveis na descrição matemática da zona de transporte de fluido, sujeitas às seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} V_x(y=0) = 0 \\ V_x(y=H) = -V_{bx} \end{cases} \begin{cases} V_z(y=0) = 0 \\ V_z(y=H) = V_{bz} \end{cases} \begin{cases} T(y=0) = T_s \\ T(y=H) = T_b \end{cases} \quad (2.3-71)$$

É importante salientar que, para resolverem-se as equações 2.3-25, 2.3-26 e 2.3-27 as seguintes relações devem ser satisfeitas:

$$\int_0^H V_x dy = 0 \quad (2.3-72)$$

$$W \int_0^H V_z dy = Q \quad (2.3-73)$$

em que H é a altura do canal, W é a largura do canal, e Q é a vazão volumétrica.

O cálculo do tempo de residência da partícula de fluido ao longo das linhas de corrente (t_R) pode ser determinada pela seguinte expressão (McKelvey, 1962):

$$t_R(y) = \frac{L}{[V_a(y)]} \quad (2.3-74)$$

em que L é a distância ao longo do eixo da extrusora e $[V_a(y)]$ é a velocidade média da partícula de fluido na direção axial, que pode ser determinada através da seguinte expressão:

$$[V_a(y)] = V_a(y) t_f + V_a(y_c) (1 - t_f) \quad (2.3-75)$$

em que $V_a(y)$ e $V_a(y_c)$ são as velocidades axiais nas posições y e em sua posição complementar, y_c , respectivamente, e t_f é a fração de tempo que uma partícula de fluido gasta na porção superior do canal. A velocidade axial, $V_a(y)$ pode ser calculada a partir da seguinte expressão:

$$V_a(y) = -V_x(y)\cos(\theta) + V_z(y)\sin(\theta) \quad (2.3-76)$$

e a fração de tempo t_f é dada por:

$$t_f = \frac{1}{1 + \left| \frac{V_x(y)}{V_x(y_c)} \right|} \quad (2.3-77)$$

A posição complementar, y_c , pode ser determinada através da seguinte expressão:

$$\int_0^{y_c} V_x(y) dy = -\int_y^H V_x(y) dy$$

2.4 Simulação Computacional

O desenvolvimento de modelos teóricos bem como o desenvolvimento de ferramentas computacionais oferece uma alternativa importante para a otimização tanto do projeto de equipamentos quanto do processo de extrusão. Apesar de a simulação do processo de extrusão não estar tão desenvolvida nem ser tão difundida quanto a simulação do processo de moldagem por injeção, alguns pacotes computacionais já estão bem estabelecidos em importantes centros de pesquisas de empresas e de universidades ao redor do mundo. Dentre os simuladores disponíveis comercialmente, pode-se citar o Flow 2000 (*Compuplast Internacional Inc*), o Extrusim 2000 (*Dual Spiral Systems*) e o Extrud 2000 (*Scientific Process & Research*). Esses programas são aplicáveis para análise do processo de extrusoras com parafusos de um ou dois estágios, para parafusos com diferentes geometrias de filetes, diferentes tipos de canais (convencionais ou do tipo barreira), diferentes elementos de mistura, etc. Eles apresentam diferentes níveis de sofisticação, variando desde aqueles que utilizam simples modelos unidimensionais, com solução analítica, até aqueles que utilizam complexos modelos tridimensionais, com solução através de métodos numéricos. Em geral, esses pacotes computacionais usam dois métodos numéricos típicos: diferenças finitas, em que a etapa básica é a substituição de derivadas por aproximações de

diferenças em cada ponto de uma malha apropriada; e elementos finitos, em que a solução para uma equação é uma aproximação a polinômios simples (e.g., linear para a pressão e quadrática para a velocidade).

Os pacotes computacionais podem fornecer várias informações úteis sobre o processo de extrusão, como os valores da vazão do material, da taxa de plastificação, dos perfis de pressão e de temperatura, bem como os valores de tensão de cisalhamento e dos perfis de fluxo de calor ao longo do comprimento do parafuso. Com isso, pode-se avaliar quanto se vai consumir de energia, quanta produtividade alcançar-se-á, que tipo de resina é a ideal para o processo, qual configuração de máquina fornece maior eficiência e qual perfil de temperaturas deve-se empregar. Esse tipo de informação permite que o profissional de extrusão possa prever e atuar na minimização (ou eliminação) de fenômenos indesejáveis no processo, tais como degradação do polímero, formação de géis e problemas do produto associados às características reológicas dos mesmos.

Conforme já mencionado, realizou-se essa revisão bibliográfica com o objetivo de mostrar o nível de complexidade da modelagem matemática do processo de extrusão de polímeros. Como se pode constatar, o trabalho requerido para que se implemente os modelos apresentados neste capítulo não compensa a aplicação dos mesmos para a predição de variáveis de extrusão globais, como a vazão mássica total de material, ou de variáveis de extrusão pontuais, como a pressão na saída da extrusora. Essas duas variáveis, muitas vezes, são as únicas informações que se utiliza como critérios de produção e de operabilidade de uma extrusora.

No capítulo 3, a seguir, apresenta-se a metodologia que se desenvolveu para a criação de equações semi-empíricas que sirvam como alternativas mais simples, em relação aos modelos apresentados neste capítulo, para o cálculo da vazão mássica e da pressão na saída de extrusoras de parafuso único.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 *Materiais*

Avaliaram-se três resinas poliméricas neste trabalho: duas amostras de polipropileno isotático (mesmo *grade*, mas lotes diferentes) e uma amostra de poliestireno cristal (PSCR). A Tabela 3.1-1, a seguir, apresenta algumas características dessas amostras.

Tabela 3.1-1: Características das amostras analisadas.

<i>Material</i>	<i>Nomenclatura</i>	<i>Fabricante</i>	<i>Índice de Fluidéz 2,16 kg /230°C (g/10 min)</i>
Polipropileno	PP - A	Petroquímica Cuyo S/A	2,45
Polipropileno	PP - B	Petroquímica Cuyo S/A	2,36
Poliestireno	PS - A	Petrobras Energia S/A	4,21

Escolheram-se utilizar amostras de poliestireno e de polipropileno devido à diferença estrutural desses materiais, visto que o PS é um polímero amorfo e o PP é um polímero semicristalino. Trabalhar com materiais diferentes proporciona uma versatilidade maior aos modelos simplificados desenvolvidos.

3.2 *Métodologia*

Para desenvolverem-se os modelos simplificados para o cálculo da vazão mássica e da pressão na saída da extrusora, utilizaram-se dados experimentais da extrusão das amostras de poliestireno e de polipropileno bem como resultados preditos por simulação computacional.

Primeiramente, mediram-se os dados experimentais de vazão mássica (\dot{M}) e de pressão na saída ($P_{saída}$) de uma extrusora de parafuso único utilizando-se as amostras PS - A e PP - A. Em seguida, utilizou-se um simulador para ajustar-se os valores preditos de \dot{M} e de $P_{saída}$ aos dados obtidos experimentalmente através da estimação dos fatores de atrito barril-polímero tanto para o PP quanto para o PS. Posteriormente, realizou-se um planejamento de experimentos para obter-se um segundo conjunto de simulações, considerando-se as propriedades dos materiais (reológicas e térmicas) e as condições de operação da extrusora (velocidade de rotação do parafuso e perfil de temperatura nas zonas de aquecimento da extrusora) como fatores de investigação. Com as novas simulações, ajustaram-se os parâmetros dos modelos simplificados aos valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora preditos no simulador. Elaboraram-se os modelos simplificados levando-se em conta as interações entre os fatores cujos efeitos consideraram-se significativos nas análises de variância (ANOVA). Posteriormente, aplicou-se uma técnica de regressão multivariável para selecionar apenas os termos importantes dessas equações. Por fim, realizou-se um segundo conjunto de testes experimentais na extrusora para validar os modelos propostos utilizando-se as amostras PS - A e PP - B.

3.2.1 Extrusão

A obtenção de dados experimentais de extrusão é uma etapa de importância fundamental neste trabalho. Como já se mencionou, necessita-se de dados de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora para a verificação das predições provenientes de simulações. Além disso, dados das temperaturas na superfície interna do barril, em função da rotação do parafuso, e a temperatura da matriz são importantes para a definição das condições de operação da extrusora nas simulações.

Para todos os testes, utilizou-se uma extrusora de 45 mm de diâmetro, modelo *Extrusystem RC SP*, série 11/94, motor de 20 HP de potência. Esse equipamento pertence ao laboratório de Pesquisa e Desenvolvimento (P&D) da Petroquímica Cuyo S/A (Mendoza - Argentina). A Figura 3.2-1 mostra a linha de extrusão utilizada nos experimentos. Nessa figura, mostra-se o painel de controle da extrusora, a extrusora, a matriz circular para a produção de filamentos plásticos e a calha com água para o resfriamento tanto do material quanto equipamento.

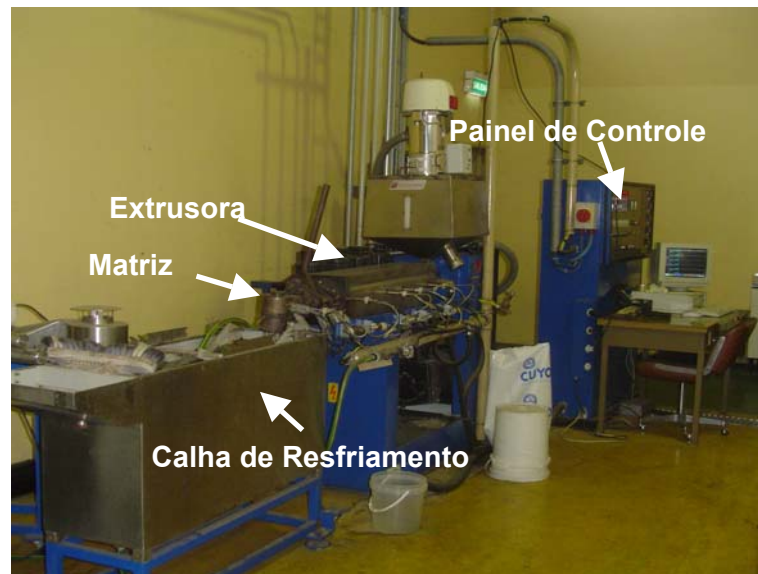


Figura 3.2-1: Foto da linha de extrusão utilizada nos experimentos.

Em geral, as extrusoras industriais não apresentam uma instrumentação que permita um monitoramento adequado do processo. A grande maioria dos equipamentos apresenta apenas os sensores de temperatura das zonas de aquecimento, situados na parede externa do barril, e um sensor de pressão indicando a pressão na saída da extrusora. No entanto, a extrusora que se utilizou nos experimentos contém 4 sensores de pressão e de temperatura ao longo do cilindro do equipamento, permitindo a obtenção de informações adicionais sobre o processo. Esse equipamento possui sensores de temperatura e de pressão que atravessam a parede do barril, ficando em contato com a parte interna do mesmo. A Figura 3.2-2 destaca os sensores de temperatura e de pressão ao longo da extrusora.



Figura 3.2-2: Foto da extrusora destacando os sensores de pressão e de temperatura.

Conforme se pode observar na Figura 3.2-2, existem 4 sensores na superfície interna do barril, sendo que cada um indica tanto os valores de pressão quanto de temperatura no interior do equipamento, permitindo que se possa ter uma idéia sobre o perfil dessas variáveis ao longo do equipamento. As posições desses sensores em relação à direção axial da extrusora estão mostradas na Tabela 3.2-1 a seguir.

Tabela 3.2-1: Posições dos sensores em relação à direção axial da extrusora.

Sensores	Posição (mm)
Sensor 1	310
Sensor 2	600
Sensor 3	773
Sensor 4	1154

Em relação ao parafuso dessa extrusora, o mesmo apresenta 4 seções distintas: uma seção de alimentação, uma seção de compressão longa, uma seção de compressão curta e uma seção de dosagem. A

Tabela 3.2-2 resume as medidas mais importantes do parafuso. Nessa tabela, observa-se que o valor da razão de compressão desse parafuso é igual a 4,0, indicando que ele é mais apropriado para processar PP do que PS.

Tabela 3.2-2: Medidas geométricas do parafuso da extrusora.

<i>Diâmetro do parafuso (mm)</i>	45
<i>Comprimento do parafuso (mm)</i>	1118,0
<i>Comprimento da seção de alimentação (mm)</i>	170,0
<i>Comprimento da 1ª seção de compressão (mm)</i>	420,0
<i>Comprimento da 2ª seção de compressão (mm)</i>	80,0
<i>Comprimento da seção de dosagem (mm)</i>	448,0
<i>Altura do canal da seção de alimentação (mm)</i>	8,5
<i>Altura do canal do final da 1ª seção de compressão (mm)</i>	4,9
<i>Altura do canal da seção de dosagem (mm)</i>	2,1
<i>Passo (mm)</i>	45
<i>Largura do filete (mm)</i>	5,6
<i>Razão de Compressão</i>	4,0

Essa extrusora apresenta 4 zonas de aquecimento do barril conforme mostra a Figura 3.2-3 a seguir.



Figura 3.2-3: Foto da extrusora destacando as zonas de aquecimento do barril.

Na Figura 3.2-3, pode-se observar que os sensores colocados na superfície externa do barril, utilizados para controlar a temperatura das zonas de aquecimento da extrusora, situam-se na metade de cada uma dessas zonas. As posições exatas das zonas de aquecimento em relação à direção axial da extrusora estão mostradas na Tabela 3.2-3 a seguir.

Tabela 3.2-3: Posições das zonas de aquecimento em relação à direção axial da extrusora.

Zonas de aquecimento	Posição Inicial (mm)	Posição final (mm)
Zona 1	154	394
Zona 2	394	634
Zona 3	634	864
Zona 4	864	1154

Para finalizar a etapa de descrição do equipamento, mostra-se, na Figura 3.2-4, uma ilustração relacionando as posições das seções geométricas do parafuso com as zonas de aquecimento do barril e as posições dos sensores internos de pressão e de temperatura.

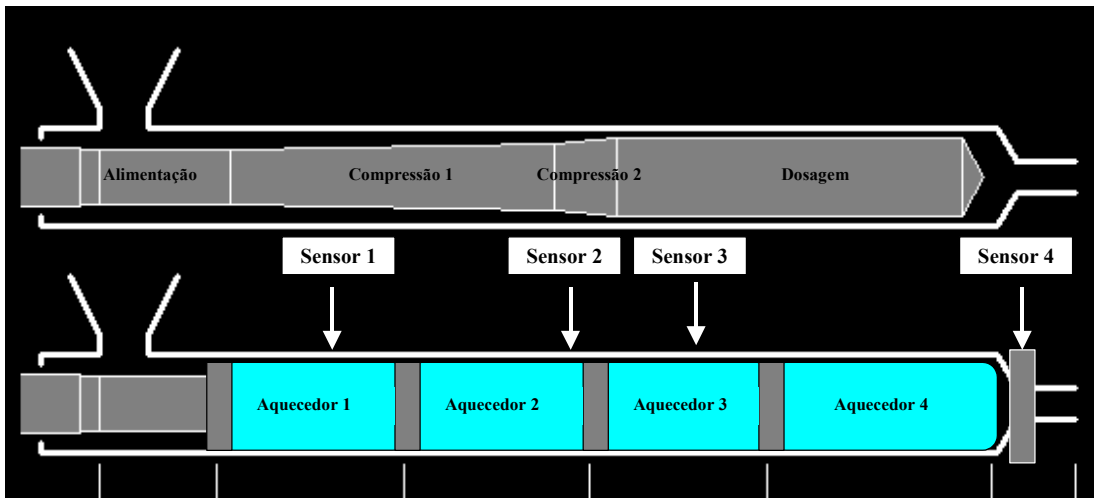


Figura 3.2-4: Esquema relacionando as seções geométricas do parafuso com as zonas de aquecimento do barril.

Como se pode ver na Figura 3.2-4, o primeiro elemento aquecedor do barril cobre parte da primeira seção de compressão do parafuso. O segundo elemento aquecedor cobre a outra parte da primeira seção de compressão e parte da segunda seção de compressão. O terceiro elemento cobre a outra parte da segunda seção de compressão e a metade da seção de dosagem do parafuso. Por fim, o quarto elemento aquecedor do barril cobre a segunda parte da seção de dosagem do parafuso. Além disso, pode-se observar que os sensores 1 e 3, colocados na superfície interna do barril, situam-se próximos aos sensores na superfície externa do barril nas zonas 1 e 3. Isso permite que se estabeleça uma comparação entre a temperatura da superfície externa do barril com a temperatura na superfície interna dele. Dessa forma, pode-se verificar a eficiência de transferência de calor através das paredes do barril e a dissipação viscosa do material. Por outro lado, pode-se observar que o sensor 4 situa-se em uma placa metálica entre a saída da extrusora e a entrada da matriz. Em função disso, as informações de temperatura desse sensor não serão importantes neste trabalho, pois o valor de temperatura que ele indica não representa o comportamento do material nem dentro dos canais do parafuso nem dentro da matriz. Já o valor da pressão, neste ponto, apresenta grande relevância, pois ele indica a pressão na saída da extrusora, que serve como força motriz para transportar o material através da matriz.

A Tabela 3.2-4, a seguir, apresenta as temperaturas de aquecimento definidas nas zonas de aquecimento do cilindro na extrusão de polipropileno (PP – A) bem como as temperaturas indicadas pelos controladores de temperatura nessas zonas.

Tabela 3.2-4: Temperaturas definidas e as indicadas nas zonas de aquecimento do barril na extrusão da amostra PP - A.

Zona de aquecimento do barril	$T_{definida}$ (°C)	$T_{externa}$ (°C)
Zona 1	200,0	206,0
Zona 2	200,0	205,0
Zona 3	200,0	204,0
Zona 4	200,0	206,0

Definiram-se todas as temperaturas como sendo iguais a 200°C, mostrada na Tabela 3.2-4, de acordo com indicações da equipe de P&D da Cuyo. Segundo eles, essas condições de aquecimento facilitam a plastificação e o transporte do polipropileno na extrusora.

Utilizaram-se três nomenclaturas diferentes relacionadas às temperaturas envolvidas nos testes na extrusora. Quando se tratar das temperaturas definidas nas zonas de aquecimento da superfície externa do barril, utiliza-se a nomenclatura $T_{definida}$. Quando se tratar das temperaturas indicadas pelo sensor colocado na superfície externa do barril, utiliza-se a nomenclatura $T_{externa}$. Finalmente, quando se tratar das temperaturas indicadas pelo sensor de temperatura colocado na superfície interna do barril, utiliza-se a nomenclatura $T_{interna}$. Deve-se enfatizar que, se o controlador de temperatura trabalhar perfeitamente, $T_{definida} = T_{externa}$. Apesar de não haver necessidade de diferenciar as pressões envolvidas nos testes, pois só se dispõe de sensores de pressão na superfície interna da extrusora, para estabelecer-se um paralelo com a nomenclatura da temperatura, refere-se a elas como $P_{interna}$. Além dessa diferenciação entre $T_{definida}$, $T_{externa}$ e $T_{interna}$, também se incluiu os números 1, 2, 3 e 4, como subscritos, para referir-se às temperaturas (e às pressões) nas zonas 1, 2, 3 e 4, respectivamente. É importante enfatizar que $T_{interna1}$, $T_{interna2}$ e $T_{interna3}$ têm mais possibilidades de ter seus valores semelhantes à $T_{externa1}$, $T_{externa2}$ e $T_{externa3}$, respectivamente, do que o valor da temperatura indicada pelo sensor na placa metálica entre a saída da extrusora e a entrada da matriz ser semelhante à $T_{externa4}$ (ou $T_{definido4}$). Em função disso, utiliza-se uma nomenclatura diferente ao se referir à temperatura e à pressão indicados pelo sensor na superfície interna do barril na saída da extrusora, definindo-as como $T_{saída}$ e $P_{saída}$ respectivamente.

Para obterem-se os dados de vazão mássica do PP, coletaram-se amostras de material, em intervalos de um minuto, após ele sair da matriz ($T_{matriz} = 200^\circ\text{C}$) e ser

granulado. A Figura 3.2-5, a seguir, apresenta fotos da matriz e do granulador utilizados na extrusão da amostra PP - A.



Figura 3.2-5: Fotos da matriz e do granulador utilizados nos experimentos com o PP.

Realizaram-se os testes para as velocidades de rotação do parafuso (N) de 70, 80, 90 e 100 rpm. Para cada velocidade de rotação, realizaram-se três medidas de vazões mássicas de material (\dot{M}_E), e anotaram-se os valores das pressões $P_{interna1}$, $P_{interna2}$, $P_{interna3}$ e $P_{saída}$ e das temperaturas $T_{interna1}$, $T_{interna2}$, $T_{interna3}$ e $T_{saída}$ que os sensores na superfície interna do barril indicavam. Além disso, também se anotou os valores das temperaturas $T_{externa1}$, $T_{externa2}$, $T_{externa3}$ e $T_{externa4}$ que os sensores na superfície externa do barril indicavam. A Tabela 3.2-5, a seguir, apresenta as temperaturas de aquecimento definidas nas zonas de aquecimento do cilindro na extrusão de poliestireno (PS - A).

Tabela 3.2-5: Temperaturas definidas e as indicadas nas zonas de aquecimento do barril na extrusão da amostra PS - A.

Zona de aquecimento do barril	$T_{definida}$ (°C)	$T_{externa}$ (°C)
Zona 1	190,0	193,0
Zona 2	195,0	200,0
Zona 3	200,0	204,0
Zona 4	200,0	207,0

Definiu-se o perfil de temperaturas para o PS, mostrado na Tabela 3.2-5, segundo indicações da equipe de P&D da Petrobras Energia S/A (Zárate - Argentina), fornecedora da amostra de poliestireno utilizada nos experimentos.

Os testes com o PS foram análogos aos realizadas com o polipropileno, ou seja, consistiram na coleta de material após o mesmo escoar através da mesma matriz, mantida a 215°C, durante o intervalo de um minuto, e na anotação dos valores de pressão e de temperatura ao longo da extrusora. No entanto, não se utilizou o granulador para coletar o material. Coletaram-se amostras do PS, utilizando-se uma chapa metálica para suportar o material logo após o material deixar a matriz. Nesse caso, a amostra foi resfriada apenas com ar. No caso do PP, o material foi resfriado tanto com ar quanto com água.

3.2.2 Simulação Computacional

Para ajustarem-se os parâmetros dos modelos simplificados, necessitou-se obter um conjunto de valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ em função das propriedades dos materiais e das condições de operação da extrusora. Em vez de realizar ensaios experimentais na extrusora, resolveu-se prever os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ através de simulações computacionais. Isso permitiu a obtenção de variáveis de resposta de extrusão de forma mais rápida e mais barata do que se tivesse que realizar os experimentos na extrusora. Poder-se-ia obter dados de extrusão implementando e resolvendo os modelos apresentados no capítulo 2. No entanto, utilizou-se um simulador de extrusão comercial como uma ferramenta rápida de resolução das equações de extrusão clássicas, pois essa é apenas uma das etapas para o desenvolvimento dos modelos simplificados.

Para realizarem-se as previsões de \dot{M} e de $P_{saída}$, utilizou-se o simulador Flow 2000 (Compuplast, Inc.). Esse simulador fornece valores de vazão mássica de polímero, a partir de uma velocidade de rotação especificada, bem como, dado um valor de vazão mássica desejado, ele fornece o valor da velocidade de rotação do parafuso. Além disso, o simulador fornece informações sobre os perfis de variáveis ao longo do eixo da extrusora e ao longo do canal do parafuso. Em relação às variáveis ao longo do eixo da extrusora, podem-se destacar os perfis de temperatura, de pressão, de leito sólido, de fluxo de calor e de tensão de cisalhamento. No que se refere às variáveis ao longo do canal do parafuso, destacam-se os perfis de temperatura e de taxa de cisalhamento. Ao longo do parafuso, os cálculos das variáveis são realizados utilizando o método dos elementos finitos, considerando-se duas direções: a direção z (direção do eixo do parafuso) e a direção y (direção da altura do canal do parafuso), em que os valores das

grandezas variam. Ao longo do canal, os cálculos das variáveis são realizados utilizando o método das diferenças finitas, considerando-se apenas a direção x (direção transversal ao canal do parafuso).

Esse programa baseia-se no modelo de Rauwendaal (1986a) para a descrição do transporte de sólidos e do início do processo de plastificação. Ao contrário do modelo de Darnell e Mol (1956), que considera que o leito sólido é isotérmico e move-se em uma velocidade constante, o modelo de Rauwendaal (1986a) considera a dissipação de energia devido ao movimento das partículas sólidas nos canais do parafuso e devido à força de atrito entre o material e a parede interna do barril. Nesse modelo, o desenvolvimento de pressão está relacionado com o aumento de temperatura.

O fluxo de energia, q_s , do parafuso é descrito pela seguinte equação:

$$q_s = P V_b \frac{\text{sen}\theta}{\text{sen}(\varphi + \theta)} \left(f_s \frac{W + 2H}{W} + f_b \text{sen}(\varphi + \theta) \right) \quad (3.2-1)$$

em que P representa a pressão local na extrusora.

O fluxo de energia, q_b , do barril é descrito pela seguinte equação:

$$q_b = P V_b f_b \frac{\text{sen}\varphi}{\text{sen}(\varphi + \theta)} \quad (3.2-2)$$

A distribuição de temperatura no leito sólido é descrita pela equação 2.3-17, utilizando-se as seguintes condições de contorno:

$$\text{Na entrada da extrusora } (z = 0), T(y,0) = T_0$$

em que T_0 é a temperatura do material quando entra na extrusora.

$$\text{Na metade da altura do canal } (y = H/b), \frac{\partial T}{\partial y} = 0$$

Na superfície do barril ($y = 0$):

$$q_b = -k_s \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{k_b(T - T_b)}{b} \quad (3.2-3)$$

em que q_b é dado pela equação 3.3-2, k_s é a condutividade térmica do sólido, k_b é a condutividade térmica do metal do barril, T_b é a temperatura do barril e b é a espessura da parede do cilindro. O lado direito da equação 3.3-3 representa a transferência de energia para os sólidos, e o lado esquerdo representa a transferência de energia do barril ou para o barril.

Para a descrição da zona de plastificação, esse programa baseia-se no modelo de Tadmor e Klein (1970). Assume-se que a velocidade do leito ao longo do eixo do parafuso é constante, e que a espessura do filme de fluido independe da posição transversal ao canal. A taxa de plastificação (ϖ) é dada por:

$$\varpi = \frac{k_l}{Cp_s(T - T_0) + \Delta H_f + Cp_l(T - T_p)} \left(\frac{dT}{dy} \right)_{y=0} W_s \quad (3.2-4)$$

em que W_s é a largura do leito sólido, T é a temperatura média no escoamento do filme de fluido, T_p é a temperatura de plastificação do polímero, T_0 é a temperatura do material quando entra na extrusora, Cp_l e Cp_s são os calores específicos do polímero no estado líquido e no estado sólido, respectivamente, k_l é a condutividade térmica do fundido e ΔH_f é a entalpia de fusão do polímero.

Descreve-se o atraso no processo de plastificação (referente à formação do filme de fluido) a partir da seguinte correlação empírica (Tadmor e Gogos, 1979):

$$N_{\text{atraso}} = \frac{C}{\psi} \quad (3.2-5)$$

Em que N_{atraso} é o atraso na plastificação, C é uma constante que caracteriza a plastificação do material. O atraso é adimensional e expresso em revoluções a partir do ponto onde a temperatura excede a temperatura de plastificação ao ponto onde a plastificação ocorre. A constante C é igual a 0.008. A variável ψ é definida como:

$$\psi = \frac{\varpi H}{\dot{M}} \quad (3.2-6)$$

em que ϖ é a taxa de plastificação H é a altura do canal e \dot{M} é a vazão mássica.

De maneira geral, para proceder-se às simulações, realizaram-se três etapas seqüenciais: inseriram-se as características dos materiais analisados, as características geométricas da extrusora e as condições de operação da extrusora no simulador.

3.2.3 Caracterização Reológica dos Materiais e Modelos Reológicos Utilizados

Em relação aos materiais, inseriram-se, no banco de dados do simulador, parâmetros reológicos e propriedades físicas e térmicas das amostras de PP e de PS. Obtiveram-se os parâmetros reológicos dos materiais através de ajustes a modelos que descrevem a dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento e com a temperatura. Mediram-se dados de viscosidades das amostras através da avaliação do escoamento das mesmas entre pratos paralelos utilizando-se um reômetro rotacional Ares (*Rheometric Scientific*). A Figura 3.2-6 mostra fotos do reômetro rotacional e da geometria de ensaios utilizada.



Figura 3.2-6: Fotos do reômetro rotacional e da geometria de ensaios utilizados.

Para cada amostra, realizaram-se testes de varredura de frequência para obter-se os valores de viscosidade complexa (η^*) nas frequências angulares (ω) de 0,1 a 500 rad/s, nas temperaturas de 190°C, 210°C e 230°C. Antes de cada teste de varredura de frequência, necessitou-se realizar dois ensaios de varredura de deformação, mantendo-

se fixas as freqüências angulares de 0,1 rad/s (em um teste) e de 500 rad/s (em outro teste). Procedeu-se a esses ensaios para garantir que se mediu os dados de viscosidades na região de viscoelasticidade linear, i.e., na região em que existe relação linear entre tensão e deformação.

Para aplicar-se os modelos reológicos, utilizou-se a regra de Cox-Merz (1958) que estabelece a equivalência entre os valores de viscosidade obtidos em estado estacionário (η) com os valores de viscosidade complexa obtidos em modo dinâmico (η^*). Assim, considerou-se $\eta^* = \eta$ e $\omega = \dot{\gamma}$.

De acordo com o que se mencionou no capítulo 2, as faixas de aplicação dos modelos WLF e de Andrade-Eyring são de $T_g < T < T_g + 100^\circ\text{C}$ e de $T > T_g + 100^\circ\text{C}$ respectivamente. Como os valores típicos de T_g para o PP e para o PS são de, respectivamente, -10°C (Rauwendaal, 1986a) e 100°C (Han *et al.*, 1996), concluiu-se que o modelo WLF não é indicado para a avaliação da dependência da viscosidade do PP com a temperatura, pois o polipropileno ainda encontra-se no estado sólido no limite máximo de temperatura de aplicação desse modelo ($T_m = 163^\circ\text{C}$, Wolf a Grave, 2002). Por outro lado, de acordo com sua faixa de aplicação, o modelo de Andrade-Eyring modificado é adequado para o estudo da viscosidade do PP. No caso do PS, nenhum dos dois modelos citados consegue descrever a dependência de sua viscosidade com a temperatura em toda a faixa de temperaturas a que esse material foi submetido durante os testes reológicos e de extrusão (180°C a 230°C). Em função disso, a melhor maneira de descrever o comportamento da viscosidade do PS com a temperatura seria utilizar o modelo WLF para temperaturas entre a T_p (155°C , Han *et al.*, 1996) e $T_g + 100^\circ\text{C}$ (200°C) e utilizar o modelo de Andrade-Eyring modificado para temperaturas acima da $T_g + 100^\circ\text{C}$. No entanto, como a metodologia para o desenvolvimento dos modelos simplificados requer parâmetros reológicos equivalentes para o PP e para o PS, resolveu-se aplicar o modelo de Andrade-Eyring modificado para a descrição da dependência da viscosidade com a temperatura para os dois polímeros.

Em relação à descrição da variação da viscosidade das resinas com a taxa de cisalhamento, resolveu-se ajustar os valores medidos ao modelo de Carreau-Yasuda, pois o mesmo fornece informações sobre o comportamento de toda a curva de viscosidades dos materiais. Assim, substituindo-se as equações 2.3-36 e 2.3-42 na equação 2.3-33, obtém-se:

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \frac{\eta_0 \exp(-b(T - T_{ref}))}{\left[1 + (\lambda \dot{\gamma} \exp(-b(T - T_{ref})))^a\right]^{\frac{1-n}{a}}} \quad (3.2-7)$$

Para facilitar o entendimento do efeito dos parâmetros η_0 , λ , n e a (Carreau-Yasuda) e b (Andrade-Eyring modificado), construiu-se um conjunto de gráficos mostrando o que ocorre no comportamento da curva de viscosidades quando se varia o valor de cada um desses parâmetros, mantendo-se o valor dos outros fixos. A Figura 3.2-7, a seguir, ilustra o efeito de η_0 na curva de viscosidades.

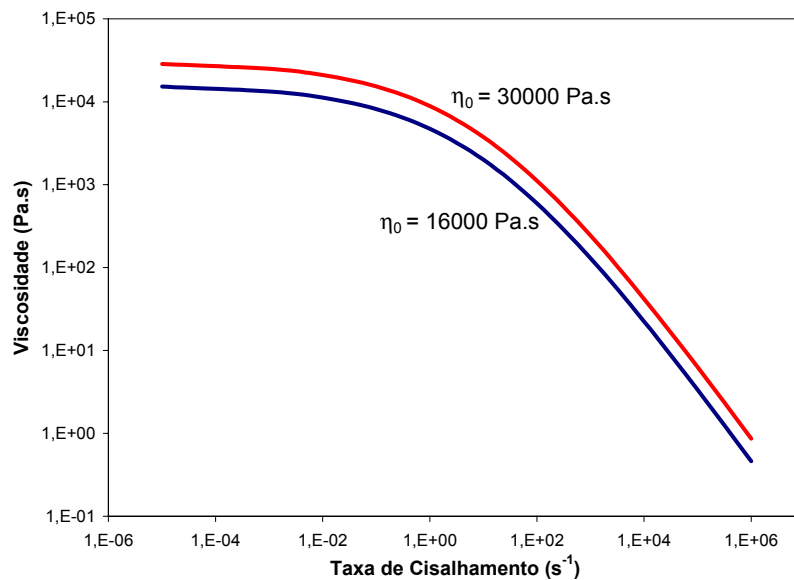


Figura 3.2-7: Efeito do parâmetro η_0 na curva de viscosidades.

O parâmetro η_0 define o valor da viscosidade na faixa de taxas de cisalhamento em que o material apresenta comportamento Newtoniano. Esse parâmetro apresenta uma dependência exponencial com o valor da massa molar média ponderal do material (M_w). A Figura 3.2-8 apresenta o efeito do parâmetro λ na curva de viscosidades.

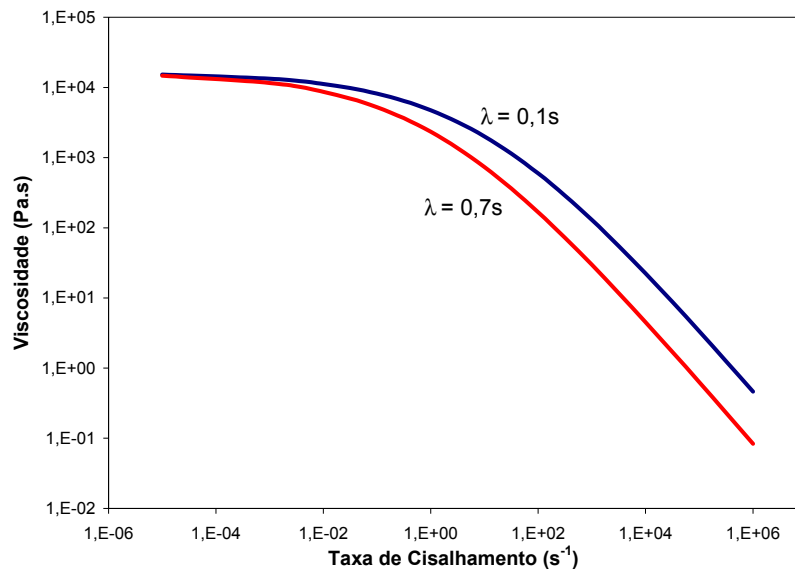


Figura 3.2-8: Efeito do parâmetro λ na curva de viscosidades.

Na Figura 3.2-8, observa-se que, quanto maior o valor do parâmetro λ , menor o comprimento do platô Newtoniano. Esse parâmetro está relacionado com a distribuição de massas molares (*DMM*) do material, sendo que, quanto maior o valor de λ , mais larga a *DMM* do polímero. A Figura 3.2-9, a seguir, apresenta o efeito do parâmetro a na curva de viscosidades.

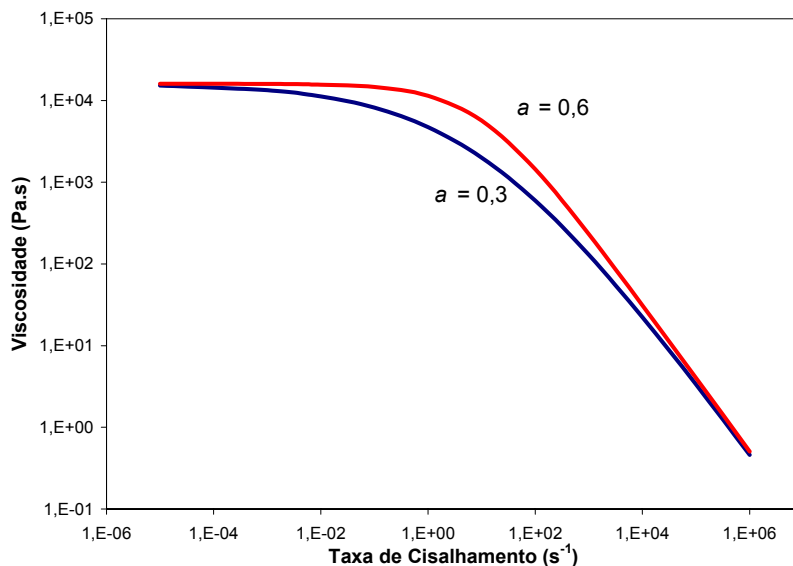


Figura 3.2-9: Efeito do parâmetro a na curva de viscosidades.

A Figura 3.2-9 ilustra que, quanto maior o valor desse parâmetro, mais pronunciada é a transição do comportamento Newtoniano para o comportamento da lei

das potências. Em relação ao parâmetro n , seu efeito na curva de viscosidades é mostrado na Figura 3.2-10 a seguir.

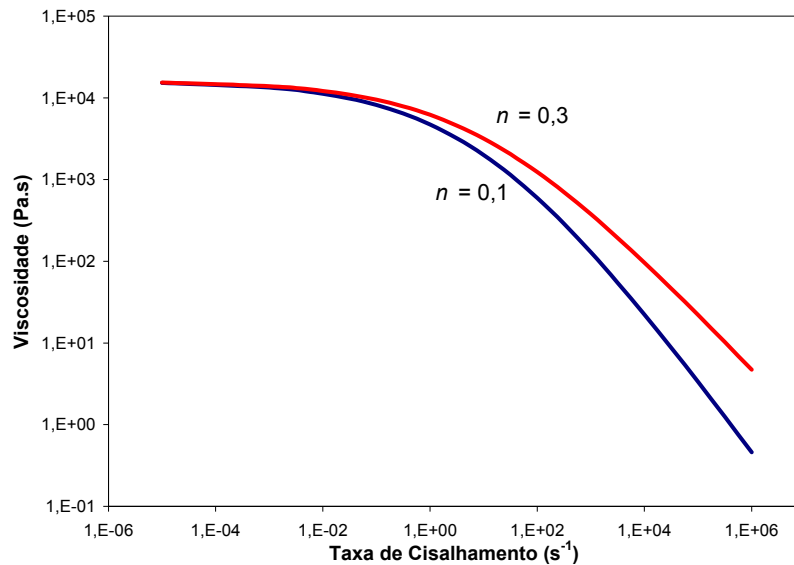


Figura 3.2-10: Efeito do parâmetro n na curva de viscosidades.

Na Figura 3.2-10, nota-se que o parâmetro n afeta a viscosidade apenas a altas taxas de cisalhamento, pois define a inclinação da reta na região da lei da potência. Observa-se que, quanto maior o seu valor, menor é a dependência da viscosidade do material em relação à taxa de cisalhamento, pois $n = 1$ identifica um material Newtoniano.

Sabe-se que se podem realizar essas análises apenas observando-se a forma do modelo de Carreau-Yasuda. No entanto, resolveu-se mostrar essa série de gráficos para verificar o nível de sensibilidade do modelo aos parâmetros.

O parâmetro b do modelo de Andrade-Eyring modificado estabelece o grau de dependência dos valores de viscosidades do material com variações na temperatura do mesmo. A Figura 3.2-11, a seguir, apresenta uma comparação dos valores de viscosidades calculados a duas temperaturas diferentes para dois valores do parâmetro b .

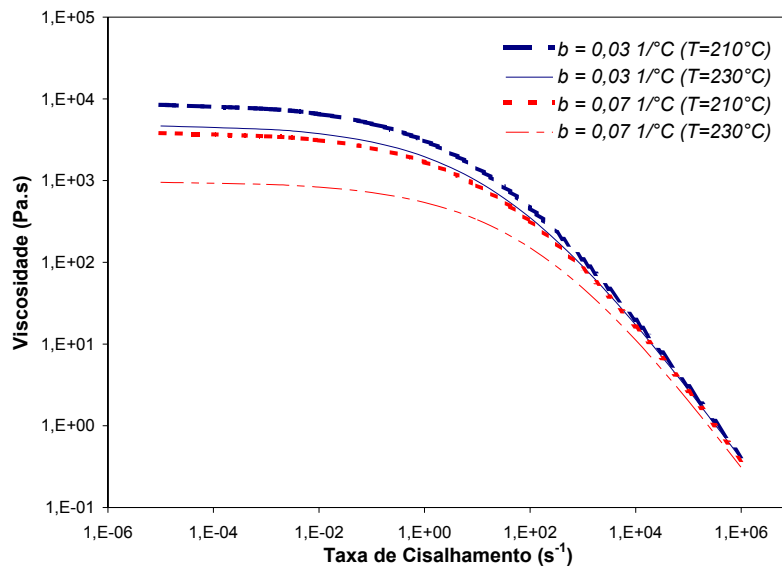


Figura 3.2-11: Efeito do parâmetro b na curva de viscosidades.

Como se pode verificar através da análise da Figura 3.2-11, quanto maior o valor de b mais a viscosidade do material é dependente da temperatura.

Como os modelos de Carreau-Yasuda e Andrade-Eyring modificado são não-lineares, para estimarem-se os parâmetros dessas equações, utilizou-se o método de Gauss-Newton em uma regressão não-linear por mínimos quadrados (Bates e Watts, 1988).

Em relação aos dados físicos e térmicos, necessitou-se inserir no simulador comercial dados de massa específica (no estado sólido e no estado líquido, ρ_s e ρ_l , respectivamente), de calor específico (no estado sólido e no estado líquido, Cp_s e Cp_l , respectivamente), de condutividade térmica (no estado sólido e no estado líquido, k_s e k_l , respectivamente), de temperatura de plastificação (T_p), de entalpia de fusão (ΔH_f), de massa específica aparente (ρ_a) e dos fatores de atrito barril-material (f_b) e parafuso-material (f_s).

Como é impossível definir uma única temperatura em que as amostras de PP e de PS apresentam o mesmo comportamento, estabeleceu-se um critério de que, no estado sólido, os dados referem-se à temperatura de 80°C e, no estado líquido, os dados referem-se à temperatura de 190°C. Na temperatura de 80°C, garante-se que a amostra de PS está no estado sólido, não apresentando movimentos moleculares apreciáveis,

que começam a ocorrer na faixa de temperaturas próxima à sua T_g (100°C, Han *et al.*, 1996). Já na temperatura de 190°C, ambos os materiais já se comportam como fluidos. Além disso, considerou-se que as duas amostras de PP apresentam as mesmas propriedades físicas (à exceção da massa específica aparente) e térmicas. Essa consideração é consistente, pois as possíveis diferenças nessas propriedades entre as amostras de PP não apresentam tanto efeito durante o escoamento do que as diferenças em suas propriedades reológicas.

De maneira geral, obtiveram-se os valores dessas propriedades através de dados da literatura. No caso da massa específica (inverso do volume específico), tanto para as amostras de PP quanto para a amostra de PS, definiram-se os valores dessa propriedade a partir de dados experimentais de resinas semelhante às analisadas, obtidas na base de dados CAMPUS (MC Base, 2002).

3.2.4 Especificação das Características Geométricas da Extrusora no Simulador

Para definir-se a geometria da extrusora, informaram-se ao simulador as dimensões características do barril e do parafuso. Informou-se o valor do diâmetro interno do barril, a largura do bocal de alimentação das partículas sólidas e as posições das zonas de aquecimento ao longo do barril, destacando-se a posição inicial e a final de cada zona. Além disso, especificou-se, para cada seção do parafuso, o comprimento, a altura do canal (H), a espessura do filete (e) e o passo (S). Quase todas essas informações estão mostradas na

Tabela 3.2-2 e na Tabela 3.2-3. O único dado necessário que não está nessas tabelas é a largura do bocal de alimentação, cujo valor é igual a 67,8 mm.

3.2.5 Condições de Operação da Extrusora

Para definirem-se as condições de operação da extrusora, necessitaram-se fazer algumas considerações em relação à especificação das temperaturas nas zonas de aquecimento do barril e à descrição do escoamento dos materiais através da matriz.

Em relação à definição do perfil de temperatura ao longo das zonas de aquecimento da extrusora, estudaram-se duas situações diferentes: quando se deseja utilizá-lo na construção dos modelos simplificados e quando se deseja aplicá-los na determinação das condições de operação da extrusora para determinado desempenho desejado do equipamento.

No primeiro caso, deve-se definir um perfil de temperaturas que leve em conta as considerações e simplificações sobre a descrição da condução de calor através das paredes do barril. Assim, para desenvolver-se os modelos, levou-se em consideração o fato de o simulador considerar a condução de calor no fluido, mas não no barril. Como a condutividade do metal é muito maior do que a do polímero, o simulador negligencia a condução de calor através das paredes do barril e, por consequência, considera as temperaturas que se define nas zonas de aquecimento da extrusora como uma condição de temperatura prescrita na parede interna do barril. Em função disso, consideraram-se os valores de $T_{interna1}$, $T_{interna2}$ e $T_{interna3}$, obtidos experimentalmente como as temperaturas correspondentes às zonas 1, 2 e 3 nas simulações da extrusão das amostras PP – A e PS - A. Como o valor de $T_{interna4}$ não representa a temperatura no interior da extrusora, achou-se mais adequado repetir o mesmo valor definido na zona 3, ou seja, $T_{interna3}$.

No entanto, quando se forem aplicar os modelos, o procedimento é outro, ou seja, a partir de uma condição que se deseja de produtividade, esses modelos calcularão qual o perfil de temperaturas que se deve empregar nas zonas de aquecimento do barril. Então, nesse caso, as temperaturas envolvidas são $T_{definida}$. Na etapa de validação dos modelos, descrita na seção 4.7, aplica-se esse procedimento.

A etapa que exigiu mais esforço neste trabalho foi o desenvolvimento da metodologia empregada na descrição do escoamento dos materiais através da matriz de extrusão. Para proceder-se às simulações, existem duas possibilidades de especificar-se as condições de contorno na saída da extrusora no simulador: definir um valor constante para a pressão na saída da extrusora ou considerar o escoamento em um tubo circular (matriz) com comprimento conhecido (200 mm). Utilizou-se a segunda opção por dois motivos: devido ao fato de que a pressão na saída da extrusora é uma variável de resposta deste trabalho e devido ao fato de que, dessa forma, leva-se em conta a variação do valor da vazão mássica em função da variação da pressão. Na realidade, o cálculo que se realiza quando se utiliza a segunda opção é o seguinte: dado um valor de

queda de pressão previsto (ΔP_T), em uma determinada temperatura (T_T), e para uma vazão mássica desejada (\dot{M}_T), o simulador calcula o diâmetro do tubo (D_T) que conduz a essa queda de pressão, visto que seu comprimento (L_T) é fixo (200 mm). No entanto, tal como no caso da especificação dos perfis de temperatura utilizados nas simulações, também se necessitou levar em conta duas situações diferentes: a etapa de adequação do simulador e a etapa de obtenção de variáveis de resposta de extrusão preditos por simulação. No caso dos perfis de temperatura, foi possível estabelecer dois critérios diferentes: um para etapa de construção dos modelos e outro para etapa de aplicação dos modelos. No entanto, no caso da definição das condições de contorno na saída da extrusora, utilizou-se o mesmo critério na etapa de adequação do simulador e na etapa de obtenção de variáveis de resposta de extrusão preditos por simulação.

Na etapa de adequação do simulador, representou-se a queda de pressão na matriz que se utilizou nos experimentos através de predições do escoamento em um tubo virtual. Então, para cada material (PP - A e PS - A), especificaram-se os valores experimentais de \dot{M} , $P_{saída}$ e T_{matriz} , e o simulador calculou o valor do diâmetro do tubo de 200 mm. Considerou-se o valor de $P_{saída}$ como sendo igual ao valor da queda de pressão na matriz, visto que, na saída da extrusora, o valor da pressão é igual à atmosférica. Além disso, considerou-se o valor de \dot{M} como sendo igual ao valor da vazão do tubo, pois a vazão que sai da matriz é a mesma que entra no tubo.

Realizaram-se os cálculos dos diâmetros dos tubos virtuais (D_T) para todas as velocidades de rotação de testes. Calculou-se um valor médio do diâmetro do tubo, considerando-se os testes com a amostra PP - A ($\bar{D}_{T_{PP-A}}$) e um valor médio considerando-se os testes com a amostra PS - A ($\bar{D}_{T_{PS-A}}$). Finalmente, como se utilizou a mesma matriz para ambos materiais, calculou-se o valor médio \bar{D}_{T_T} considerando-se o valores médios dos diâmetros dos tubos obtidos para ambos materiais.

3.2.6 Planejamento de Experimentos

Conforme já se mencionou, necessitou-se obter um conjunto de valores preditos de \dot{M} e de $P_{saída}$ variando-se os dados de entrada no Flow 2000 para desenvolverem-se

os modelos simplificados. Então, para relacionarem-se, quantitativamente, os fatores que afetam os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$, utilizou-se um planejamento de experimentos.

Para construírem-se as equações para o cálculo de \dot{M} e de $P_{saída}$, com base nos conceitos de planejamento de experimentos, realizaram-se os seguintes passos:

1. Definiu-se a técnica de planejamento que se julgou mais adequada, levando-se em conta o número de simulações que se necessitaria realizar bem como o tipo de informação que seria possível de obter-se com essa técnica;
2. Selecionaram-se os fatores que se sabia e/ou que se imaginava que afetariam os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$;
3. Definiram-se os valores (níveis) dos fatores que, propositadamente, modificaram-se durante as simulações para avaliar-se o efeito resultante dessa variação nos valores de \dot{M} e de $P_{saída}$;
4. Realizaram-se as simulações com base na técnica de planejamento escolhida;
5. Ajustaram-se os parâmetros dos modelos simplificados aos valores preditos pelas simulações;
6. Verificou-se a qualidade dos modelos obtidos comparando-se valores preditos pelas equações com os dados experimentais;

Utilizou-se um planejamento 2_{IV}^{20-14} nas análises. Isso significa que se utilizou um planejamento fatorial fracionário do tipo $2^{(k-p)}$, ou seja, avaliaram-se 20 fatores a 2 níveis cada, considerando-se uma resolução de IV, realizando-se apenas 2^6 dos 2^{20} testes que se deveria fazer caso se fosse realizar um planejamento completo. Além disso, adicionou-se um ponto central nesse planejamento. Resolveu-se utilizar um planejamento fatorial, visto que ele apresenta uma grande vantagem em relação a outras técnicas de experimentação (e.g., Quadrado latino, Quadrado Greco-Romano, Composto Central, etc.). Ao contrário das outras técnicas de planejamento, o Planejamento Fatorial permite que se avaliem combinações entre todos os k fatores e em todos os n níveis, ou seja, o efeito de interações entre os mesmos. Resolveu-se analisar apenas uma fração do planejamento fatorial completo, visto que seria impraticável fazer o planejamento completo. Para ter-se uma idéia, para realizar-se o planejamento 2^{20} completo, necessitar-se-ia realizar 1048576 simulações. Com um planejamento 2^{20-14} , necessitou-se realizar apenas 65 simulações, considerando-se o ponto central adicionado. Além disso,

na escolha do planejamento, levou-se em conta o fato de que, à medida que o número de fatores cresce, o número de termos de ordens superiores também cresce, cuja importância torna-se menor do que os termos de ordens inferiores. Assim, considerou-se que os termos de ordens superiores não eram importantes, e obtiveram-se os termos principais e de segunda ordem através de uma fração do planejamento fatorial completo. Utilizaram-se os termos de mais alta ordem no cálculo do erro na análise de variância. Sabe-se que, no caso em que se utiliza um planejamento do tipo 2^k , está-se assumindo linearidade dos efeitos dos fatores e, em função disso, adicionou-se um ponto central no planejamento para avaliar-se a ocorrência de não-linearidade dos efeitos dos fatores. Por exemplo, o modelo matemático de regressão para o cálculo da variável dependente y , considerando-se apenas 2 fatores (A e B), é dado por (Montgomery, 2000):

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon \quad (3.2-8)$$

em que os $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_{12}$, são parâmetros cujos valores devem ser determinados, x_1 é uma variável que representa o fator A , x_2 é uma variável que representa o fator B , o termo $x_1 x_2$ representa a interação entre x_1 e x_2 , e ε é o erro aleatório. Em geral, as variáveis x_1 e x_2 são escalonadas em -1 e $+1$ (os níveis inferior e superior de A e B).

No caso de k fatores, o cálculo da variável dependente é dado por:

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{j=1}^k \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (3.2-9)$$

Dessa forma, tem-se um modelo capaz de representar alguma curvatura na função de resposta. Essa curvatura resulta da torção do plano induzida pelos termos de interação $x_i x_j$.

Considerou-se um planejamento com resolução IV, visto que, nesse caso, nenhum efeito principal é confundido ou superposto com outros efeitos principais ou com qualquer outro efeito de interação de segunda ordem, apesar de que interações de segunda ordem são confundidas entre si. Em relação à seleção dos fatores do planejamento, levaram-se em conta todos os 20 dados de entrada do simulador relacionados com as propriedades dos materiais (parâmetros reológicos e dados físicos e

térmicos) e com as condições de operação da extrusora (velocidade de rotação e temperaturas nas zonas de aquecimento do barril).

Para especificarem-se os níveis inferior (-1), o ponto central (0) e o nível superior (+1) de cada fator, levaram-se em conta as possíveis variações dos valores dos mesmos em testes na extrusora avaliada. Em relação aos níveis de cada propriedade dos materiais, definiu-se, como seu nível inferior, um valor de 10% a menos do menor valor entre as amostras PP – A e PS - A. De maneira análoga, definiu-se, como nível superior (+1) de cada fator, um valor de 10% a mais do maior valor entre esses dois materiais. Sabe-se que os valores dos parâmetros reológicos dos materiais variam muito mais do que suas propriedades físicas e térmicas, no entanto, utilizou-se o mesmo critério para todas as propriedades dos materiais. Na verdade, a única propriedade do material que se definiu os níveis segundo outro critério foi o valor do fator de atrito polímero-barril (f_b). Como se considerou f_b como um parâmetro de ajuste das simulações, resolveu-se utilizar níveis bem próximos dos valores originais desse fator para cada um dos materiais.

Em relação às condições de operação da extrusora, especificaram-se os níveis de acordo com as variações desses fatores durante os testes no equipamento. Em se tratando das temperaturas nas zonas de aquecimento do barril, considerou-se como nível inferior de T em cada zona, a temperatura de 170°C, visto que a menor temperatura definida nos testes foi de 190°C. Para especificar-se o nível superior de T em cada zona, considerou-se a temperatura de 220°C, pois essa foi a maior temperatura registrada durante os experimentos na extrusora.

Da mesma forma que se fez para a definição dos níveis das temperaturas nas zona de aquecimento do barril, especificaram-se os níveis da velocidade de rotação de acordo com a variação desse fator durante os testes. Como se realizou os experimentos na faixa de 70 rpm a 100 rpm, considerou-se, como nível inferior, 60 rpm e, como nível superior, 110 rpm.

Assim, para avaliarem-se quais fatores apresentaram efeito significativo, realizou-se o teste F para a análise de variância (ANOVA). O princípio básico desse método é dividir a variabilidade total, expressa em termos de soma quadrática (SQ), em seus componentes, ou seja, na soma quadrática entre os tratamentos e na soma quadrática dentro dos tratamentos (devido ao erro). Ao se dividir essas somas quadráticas por seus

respectivos graus de liberdade (ν), obtêm-se as médias quadráticas (MQ) desses tratamentos. Então, a hipótese nula no teste F é o valor da razão entre a média entre os tratamentos pela média dentro dos tratamentos (erro). Se essa hipótese for verdadeira, essas duas médias estimam o mesmo valor para a variância nos testes.

3.2.7 Seleção de Variáveis por Regressão Multivariável

Como uma tentativa de selecionar-se apenas os termos importantes nas expressões para o cálculo de \hat{M} e de $P_{saída}$, utilizou-se o procedimento *SROV* (Shacham e Brauner, 2003; Finkler, 2003). Além do fato de um modelo com muitos parâmetros não ser prático, a utilização de muitas variáveis independentes pode conduzir a modelos instáveis. Por outro lado, ao se descartar termos importantes, pode-se perder precisão nas predições.

Basicamente, o procedimento *SROV* é um método de seleção de variáveis a partir de uma regressão multivariável, constituído por etapas sucessivas. Em cada etapa desse procedimento, uma variável independente é escolhida para compor o modelo. Quando se inclui uma variável no modelo, a mesma é chamada de variável básica. As variáveis que ainda não se adicionou no modelo são denominadas de variáveis não-básicas. Em cada etapa, as variáveis não-básicas e a variável de resposta são atualizadas. Essa atualização gera variáveis não-básicas que são ortogonais em relação às variáveis do conjunto básico. Inicialmente, dispõe-se da matriz X (n,k), cujas colunas contêm as n medidas para cada uma das k variáveis explicativas, e o vetor das saídas $y(n,1)$, que contém as n medidas da variável de resposta. Na partida do algoritmo, o conjunto não-básico, contendo todos os fatores, está cheio, e o conjunto básico está vazio. O algoritmo, então, centra todas as variáveis, subtraindo do vetor y e das k colunas da matriz X , as respectivas médias. Posteriormente, são calculados os valores para o coeficiente de correlação R_j entre cada uma das variáveis independentes e a variável de resposta, utilizando-se a equação a seguir:

$$R_j = \frac{y^T x_j}{|y||x_j|} \quad (3.2-10)$$

Também são calculados, para todas as variáveis do conjunto não-básico, os valores dos indicadores TNR (*truncation to noise ratio*) e CNR (*correlation to noise ratio*), utilizando-se as seguintes equações.

$$TNR_j = \left[\frac{x_j^T x_j}{\delta x_j^T \delta x_j} \right]^{\frac{1}{2}} = \frac{\|x_j\|}{\|\delta x_j\|} \quad (3.2-11)$$

$$CNR_j = \frac{|y^T x_j|}{\sum_{i=1}^n (|x_{ij} \varepsilon_i| + |y \delta x_j|)} \quad (3.2-12)$$

O coeficiente de correlação R_j pode assumir valores entre 0 e 1, sendo que, quanto mais alto é o seu valor, mais forte é a associação linear existente entre x_j e a variável de resposta y . O indicador TNR_j é um valor representativo da validade da informação contida em um fator x_j , que consiste na divisão da variância das medidas desta variável pela variância do erro contido nas mesmas. O indicador CNR_j é um valor representativo da validade da informação contida em R_j , que consiste na divisão do produto $y'x_j$ (covariância) pelo erro contido no mesmo, obtido a partir da fórmula da propagação do erro. Dessa forma, o requisito mínimo para que a variável seja selecionada é que os indicadores apresentem valor maior que a unidade.

Satisfeitos os requisitos de $TNR > 1$ e $CNR > 1$, a variável que apresentar maior coeficiente de correlação com a resposta é, então, selecionada para ingressar no modelo, passando a fazer parte do conjunto básico. Ao se considerar a variável escolhida de x_p , a estimativa do parâmetro b_p correspondente é obtida por:

$$b_p = \frac{y^T x_p}{x_p^T x_p} \quad (3.2-13)$$

Após selecionada a variável a ser adicionada à base, os valores da variável de resposta e das variáveis não-básicas devem ser atualizados segundo as equações a seguir:

$$y^{k+1} = y^k - b_p x_p \quad (3.2-14)$$

$$x_j^{k+1} = x_j^k - \left(\frac{x_j^T x_j^k}{x_j^{kT} x_j^k} \right) x_p \quad (3.2-15)$$

O vetor y^{k+1} representa a variabilidade residual, que não se conseguiu explicar pelas variáveis incluídas na base até o estágio k . A variável x^{k+1} corresponde a x^k descontado da parcela linearmente dependente de x_p . Faz-se isso porque, como x_p já foi incluído na base, qualquer informação colinear a esta variável não é útil para descrever a variabilidade residual y^{k+1} . Antes de avançar-se para o próximo estágio, é conveniente que a significância estatística do coeficiente b_p seja verificada através de um teste t . Definindo-se um nível de significância α , o intervalo de confiança db_p para o coeficiente b_p pode ser calculado pela seguinte equação:

$$db_p = t(v, \alpha) \sqrt{s^2(x_p, x_p)} \quad (3.2-16)$$

em que t é a distribuição de *student* com v graus de liberdade e s é o desvio padrão da estimativa, que, neste caso, pode ser aproximado por $\frac{(y^{k+1} y^{k+1})^{\frac{1}{2}}}{v}$

A significância estatística dos parâmetros é comprovada se $db_p / |b_p|$ for menor do que a unidade. Então, o algoritmo deve passar para o próximo estágio. Este procedimento é repetido até que, para todas as variáveis contidas no conjunto não-básico, CNR ou TNR apresentem valor inferior à unidade. Neste ponto, atingi-se o melhor modelo de regressão que pode ser obtido a partir dos dados disponíveis.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresentam-se os resultados bem como as análises dos mesmos em cada uma das etapas que se realizou para obterem-se os modelos simplificados para o cálculo da vazão mássica e da pressão na saída da extrusora. Apresentam-se os resultados na seqüência que se deve seguir o procedimento elaborado, ou seja:

- Obtenção de dados experimentais de extrusão;
- Caracterização dos materiais;
- Adequação das predições do simulador comercial;
- Obtenção de variáveis de resposta de extrusão via simulação;
- Estimação dos parâmetros dos modelos simplificados;
- Verificação e validação dos modelos propostos.

4.1 Obtenção de Dados de Extrusão Experimentais

A Tabela 4.1-1, a seguir, apresenta os resultados da extrusão da amostra PP – A.

Tabela 4.1-1: Resultados da extrusão da amostra PP -A.

<i>N</i> (rpm)	<i>T_{definida1}</i> =200°C		<i>T_{definida2}</i> =200°C		<i>T_{definida3}</i> =200°C		<i>T_{definida4}</i> =200°C		<i>T_{matriz}</i> (°C)	<i>M_E</i> (kg/h)
	<i>P_{interna1}</i> (MPa)	<i>T_{interna1}</i> (°C)	<i>P_{interna2}</i> (MPa)	<i>T_{interna2}</i> (°C)	<i>P_{interna3}</i> (MPa)	<i>T_{interna3}</i> (°C)	<i>P_{saída}</i> (MPa)	<i>T_{saída}</i> (°C)		
70,0	35,0*	214,5	35,0*	207,0	26,0	207,0	6,4	194,0	215,0	19,5
80,0	35,0*	214,5	35,0*	207,0	24,5	207,0	6,8	194,0	215,0	21,6
90,0	35,0*	214,7	35,0*	207,0	23,5	207,0	7,0	193,0	214,0	23,6
100,0	35,0*	215,0	35,0*	207,0	21,5	207,0	7,3	193,0	214,0	25,9

* Limite superior de medição do sensor de pressão.

Observações dos resultados da Tabela 4.1-1, na mesma velocidade de rotação do parafuso (N), indicam que os valores de $P_{interna1}$ e de $P_{interna2}$ correspondem ao limite máximo de leitura desses sensores em todos os testes. Além disso, nota-se que, a partir de $P_{interna2}$, os valores de pressão diminuem gradativamente, chegando aos níveis mais baixos na saída da extrusora ($P_{saída}$). Isso indica que o transporte de sólidos desenvolve pressão suficiente nas primeiras seções do parafuso e, à medida que o material avança ao longo do parafuso, essa pressão vai sendo utilizada para empurrar a resina até a saída da extrusora.

Em relação aos dados de temperaturas, na mesma velocidade de rotação, observa-se que $T_{interna1} > T_{interna2} = T_{interna3}$. Estabelecer uma relação entre $T_{interna1}$ e $T_{interna2}$ é mais simples que relacionar essas temperaturas com $T_{interna3}$. Isso ocorre em função da probabilidade de ainda existir material no estado sólido nos canais do parafuso tanto sob o ponto de medida de $T_{interna1}$ quanto sob o ponto de medida de $T_{interna2}$. No ponto de medida de $T_{interna3}$, provavelmente, todo o canal do parafuso está preenchido de material no estado fundido. Então, para o entendimento do porquê que $T_{interna1} > T_{interna2}$, deve-se levar em conta o efeito do calor gerado pelo atrito entre o leito sólido de polímero com a parede metálica do barril durante o transporte do material no interior da extrusora. Esse calor é o responsável pela maior parte da energia usada para aquecer o leito sólido e para criar uma película de material fundido próximo à superfície interna do barril da extrusora. Quanto maior a espessura dessa película, maior a dificuldade de transporte de calor por condução do leito sólido para a superfície interna do barril. Ao se comparar as posições de medidas de $T_{interna1}$ e de $T_{interna2}$, conclui-se que o processo de plastificação do material está em um estágio mais adiantado na posição 2 e, portanto, a película de fluido está mais espessa nesse ponto. Essa maior resistência ao transporte de calor do leito sólido para o barril, em função da maior espessura da película, faz com que $T_{interna2}$ seja menor do que $T_{interna1}$. Já a comparação de $T_{interna1}$ e de $T_{interna2}$ com $T_{interna3}$ é difícil, visto que, no ponto 3, o mecanismo de maior efeito no aquecimento do material não é mais pelo atrito dos sólidos, mas sim pela dissipação viscosa do líquido. É importante reforçar que análises de $T_{interna4}$ não são importantes e, além disso, o sensor que mede essa temperatura não está no interior da extrusora, não permitindo que se realize um comparativo com as temperaturas dos outros sensores.

Em relação às análises dos dados de pressão em uma mesma posição da extrusora, observa-se, na Tabela 4.1-1, que os valores de $P_{interna3}$ diminuem à medida que

se aumenta os valores de velocidade de rotação do parafuso. Isso deve ocorrer, pois, quando se aumenta N , aumenta-se $\dot{\gamma}$ e, conseqüentemente, diminui-se a viscosidade do material. Sabe-se que, quanto menor a viscosidade da resina, menor a pressão desenvolvida no transporte do fluido. Ao contrário da tendência observada para $P_{interna3}$, os valores de P_{saida} aumentam à medida que se aumenta N . Segundo Rauwendaal (1986a), os fatores que afetam P_{saida} são: a geometria dos canais da matriz, as propriedades reológicas, a distribuição de temperaturas e a vazão do material. Como a geometria e o material são os mesmos, deve-se supor que a diminuição da temperatura (aumento de η) e, principalmente, o aumento da vazão (pelo aumento de N) são os motivos para os valores de P_{saida} aumentarem.

Em relação ao comportamento da temperatura, observa-se um pequeno aumento nos valores $T_{interna1}$ pelo aumento de N . Apesar de esperar-se comportamento análogo na posição 2, não se observaram mudanças na temperatura do material com o aumento na velocidade de rotação do parafuso nesse ponto. Um aumento na temperatura do material em função de um aumento de N justifica-se pela equação 2.3-37, que descreve o balanço de energia das películas de fluido representadas como C , D e E no capítulo 2 deste trabalho. Segundo essa equação, o termo que representa o calor gerado por dissipação viscosa depende da taxa de cisalhamento ao quadrado, ou seja, da velocidade de rotação do parafuso elevada ao quadrado. Assim, um aumento nos valores de N deve conduzir a um aumento na dissipação viscosa e, conseqüentemente, um aumento na temperatura da massa polimérica. Talvez pelo fato de a espessura da película no ponto 2 ser mais espessa que no ponto 1, exista maior resistência à transferência de calor do material para o barril, assim, não se observando variações nos valores de $T_{interna2}$ com N . No caso do ponto 3, também se esperaria observar um aumento nos valores de $T_{interna2}$ com um aumento nos valores de N de acordo com a equação 2.3-48, que descreve o balanço de energia na região de material plastificado (região B). No entanto, também não se observou variações nos valores de $T_{interna3}$ com N .

A Tabela 4.1-2, a seguir, apresenta os resultados dos experimentos de extrusão da amostra PS - A.

Tabela 4.1-2: Resultados da extrusão da amostra PS - A.

<i>N</i> (rpm)	<i>T</i> _{definida1} =190°C		<i>T</i> _{definida2} =195°C		<i>T</i> _{definida3} =200°C		<i>T</i> _{definida4} =200°C		<i>T</i> _{matriz} (°C)	<i>M</i> _E (kg/h)
	<i>P</i> _{interna1} (MPa)	<i>T</i> _{interna1} (°C)	<i>P</i> _{interna2} (MPa)	<i>T</i> _{interna2} (°C)	<i>P</i> _{interna3} (MPa)	<i>T</i> _{interna3} (°C)	<i>P</i> _{saída} (MPa)	<i>T</i> _{saída} (°C)		
70,0	18,8	203,0	31,4	205,0	18,7	210,0	5,8	198,0	225,0	21,8
80,0	18,0	203,0	31,2	205,0	17,8	210,0	5,9	200,0	225,0	24,8
90,0	17,2	204,0	30,7	206,0	17,6	210,0	6,1	198,0	224,0	27,5
100,0	18,7	204,0	29,9	207,0	17,8	209,0	6,4	196,0	226,0	31,2

Na Tabela 4.1-2, observam-se alguns comportamentos análogos aos obtidos no caso da extrusão da amostra de PP, portanto, as explicações são as mesmas. Exceção é feita no comportamento do material nos testes do PS a 100 rpm, que não seguem a tendência observada nos testes com o PP nem em relação à dependência da pressão (nas posições 1 e 3) nem a relação à dependência da temperatura (posição 3) com a velocidade de rotação do parafuso. Além disso, pode-se destacar que, no caso da amostra de PS, conseguiu-se obter os valores das pressões nos 4 pontos de medidas. Isso sugere que o PS não desenvolve pressões excessivas nas primeiras seções do parafuso, causando menos dano ao equipamento do que quando se utiliza PP.

Uma comparação entre os dados de vazão mássica (*M*), em função da velocidade de rotação do parafuso nos testes com as amostras PP – A e PS - A é mostrada na Figura 4.1-1 a seguir.

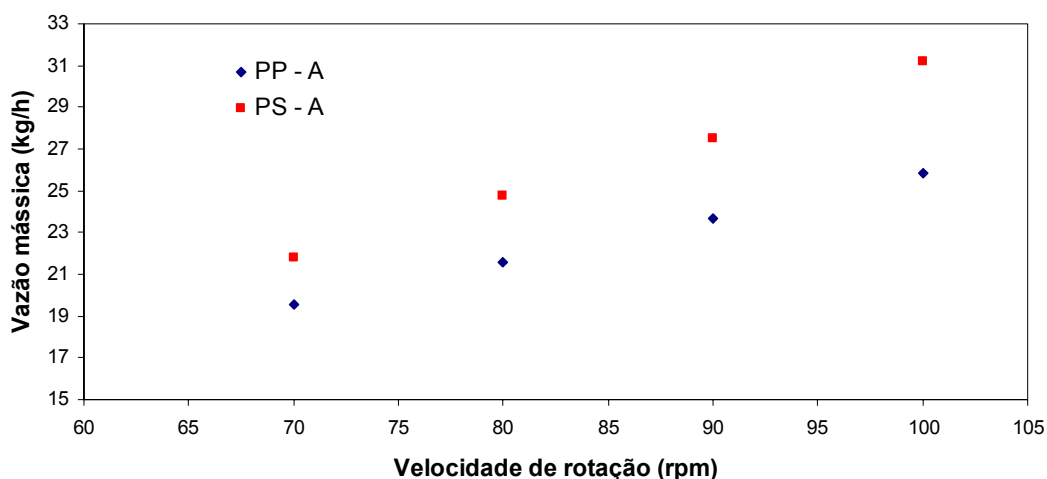


Figura 4.1-1: Comparação entre os valores de *M* das amostras PP – A e PS - A.

Na Figura 4.1-1, pode-se ver que, na mesma velocidade de rotação do parafuso (N), o valor da vazão mássica do PS é maior do que o valor da vazão mássica da amostra PP – A. Além disso, observa-se que a diferença, entre os valores de \dot{M} em relação às duas amostras, aumenta à medida que se aumenta N . A Figura 4.1-2 apresenta uma comparação entre as curvas de pressão na saída da extrusora ($P_{saída}$) em função da vazão para o PP e para o PS.

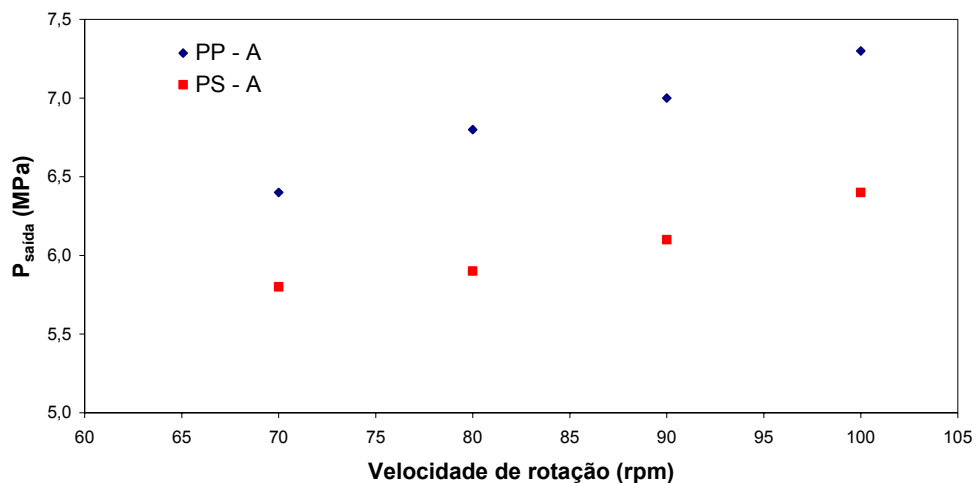


Figura 4.1-2: Comparação entre os valores de $P_{saída}$ das amostras PP – A e PS - A.

Na Figura 4.1-2, observa-se que o valor de $P_{saída}$ da amostra PP – A é maior do que o valor da amostra PS – A na mesma velocidade de rotação do parafuso. A Figura 4.1-3 apresenta uma comparação das curvas da matriz na extrusão das amostras PP - A e PS - A.

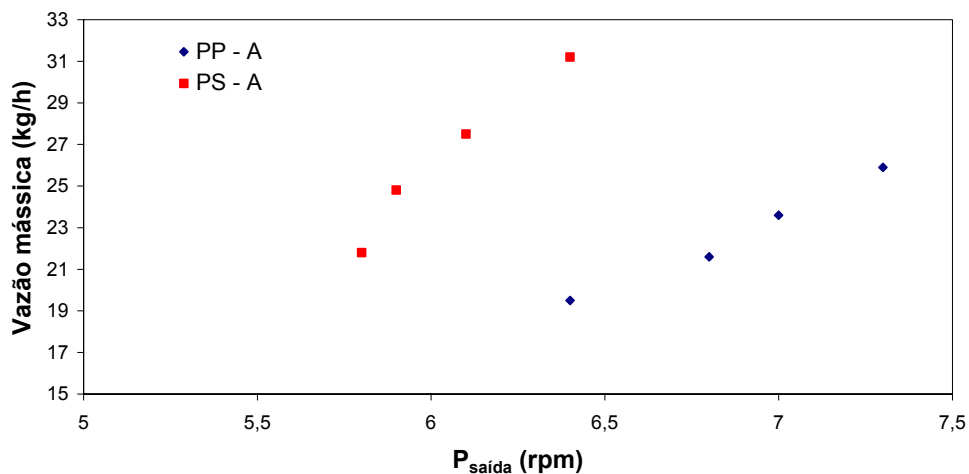


Figura 4.1-3: Comparação das curvas da matriz na extrusão das amostras PP - A e PS - A.

A Figura 4.1-3 indica que a amostra PS – A escoava mais facilmente que a amostra PP – A no interior da matriz, pois, mesmo com níveis mais baixos de pressão, consegue-se uma vazão mássica maior com a amostra de poliestireno.

4.2 Caracterização dos Materiais

Os resultados da caracterização dos materiais apresentam aplicação em todas as etapas seguintes deste trabalho. Em função disso, tentou-se proceder da forma mais criteriosa possível para obterem-se resultados experimentais confiáveis e dados da literatura consistentes.

4.2.1 Caracterização Reológica

Como já se mencionou, a caracterização reológica consistiu em duas etapas: a etapa de obtenção dos dados experimentais de viscosidade complexa das amostras analisadas e a etapa de ajustes desses dados experimentais aos modelos reológicos aplicados. Em relação aos resultados da primeira etapa, a Figura 4.2-1, a seguir, apresenta uma comparação entre as curvas de viscosidades complexas a 190°C das três amostras em estudo.

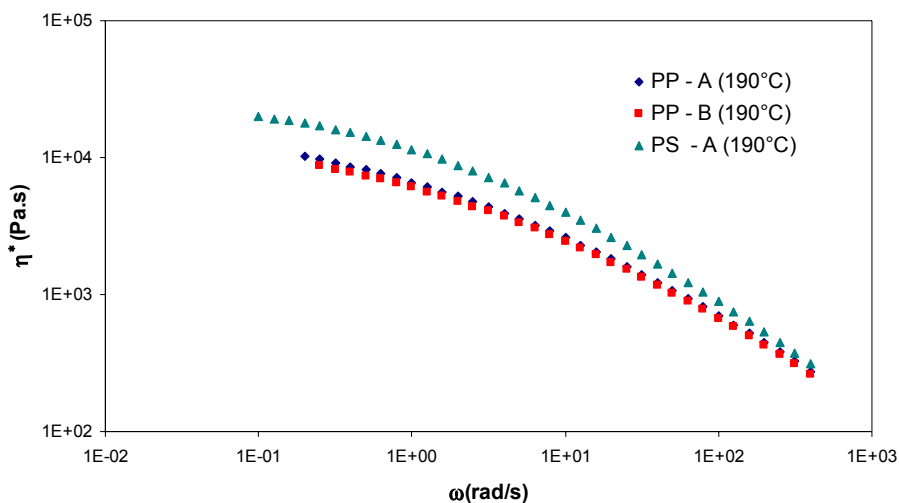


Figura 4.2-1: Curvas de viscosidades complexas das amostras a 190°C.

Como se pode ver na Figura 4.2-1, a viscosidade da amostra de PS a 190°C é maior do que a viscosidade de ambas amostras de PP em toda a faixa de frequência angular analisada. Como o valor de índice de fluidez (medido a 230°C) da amostra de PS é relativamente maior do que das amostras de PP (Tabela 3.1-1), espera-se que, em temperaturas mais altas, o comportamento das curvas de viscosidades apresentem comportamento contrário. A Figura 4.2-2 mostra uma comparação das viscosidades complexas das amostras a 210°C.

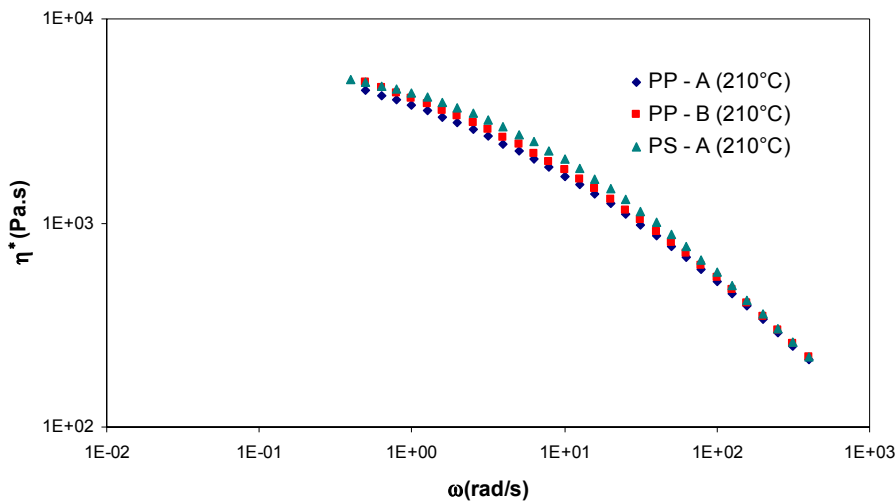


Figura 4.2-2: Curvas de viscosidades complexas das amostras a 210°C.

Na Figura 4.2-2, pode-se ver que a diferença nos valores das viscosidades das amostras PP em relação à amostra de PS é menor a 210°C do que em 190°C. Uma comparação das viscosidades das amostras a 230°C está apresentada na Figura 4.2-3 a seguir.

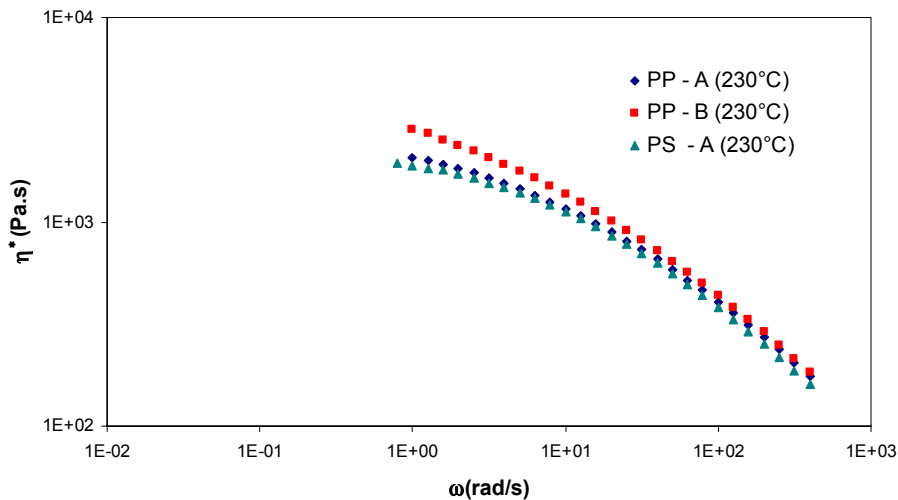


Figura 4.2-3: Curvas de viscosidades complexas das amostras a 230°C.

Como se pode ver na Figura 4.2-3, os valores da viscosidade complexa do PS é menor do que das amostras de PP a 230°C. Esse comportamento está em concordância com as análises dos valores de índice de fluidez dessas amostras.

O acompanhamento do comportamento das curvas de viscosidades das três amostras, nas três temperaturas, reforçam o fato de que se deve ter cuidado ao se tentar inferir algo sobre o processamento das resinas somente se comparando os valores de índice de fluidez. Esse índice fornece somente um valor pontual da viscosidade aparente² de uma resina e em somente uma temperatura. Em função disso, esse dado não deve servir como critério de processabilidade de um material, apenas como um indicativo.

A Tabela 4.2-1, a seguir, apresenta os valores dos parâmetros dos modelos de Carreau-Yasuda e de Andrade-Eyring modificado, estimados através de uma regressão não-linear, para as duas amostras de PP e para a amostra de PS na temperatura de referência (T_{ref}) de 190°C.

Tabela 4.2-1: Parâmetros reológicos das amostras estimados em $T_{ref} = 190^{\circ}\text{C}$.

Parâmetro	PP - A	PP - B	PS - A
η_0 (Pa.s)	17710	16541	26186
n	0,15	0,19	0,21
a	0,38	0,39	0,53
λ (s)	0,21	0,28	0,61
b ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	0,037	0,027	0,059

Para verificar-se a qualidade dos parâmetros reológicos apresentados na Tabela 4.2-1, para cada material, avaliou-se o coeficiente de correlação (R^2) entre os valores de viscosidade complexa obtidos experimentalmente (η^*_{exp}) com os valores de η^* preditos pelos modelos de Carreau-Yasuda e de Andrade-Eyring modificado (η^*_{pred}). A Figura 4.2-4 apresenta a comparação mencionada para a amostra PP – A.

² Refere-se à viscosidade cujo valor não se corrigiu os efeitos não-Newtonianos e elongacionais.

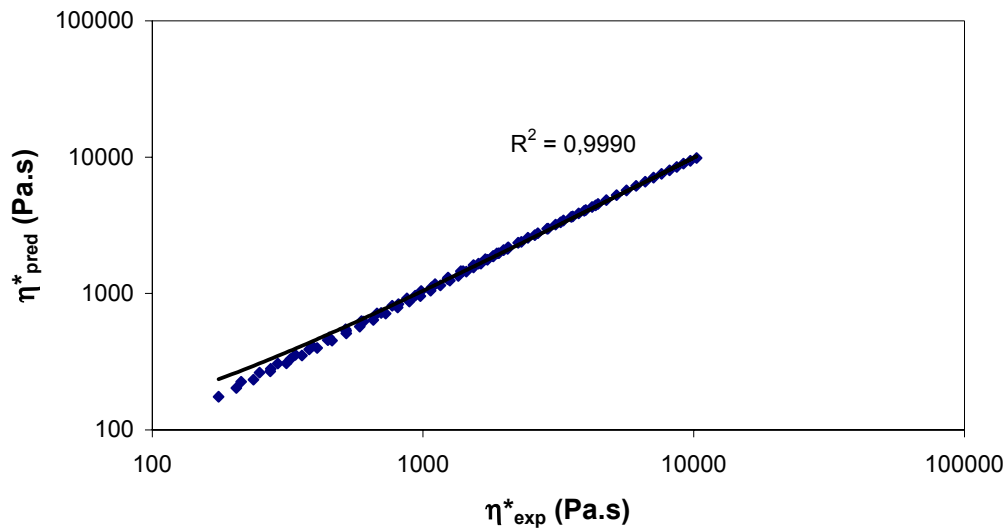


Figura 4.2-4: Comparação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e preditos pelos modelos reológicos para a amostra PP – A.

Na Figura 4.2-4, observa-se que os modelos reológicos aplicados conseguem prever com boa precisão os valores de viscosidade complexa da amostra PP – A, principalmente, para valores mais baixos de frequência angular (valores mais altos de η^*).

A Figura 4.2-5 apresenta a comparação entre os valores experimentais e preditos de η^* para a amostra PP – B.

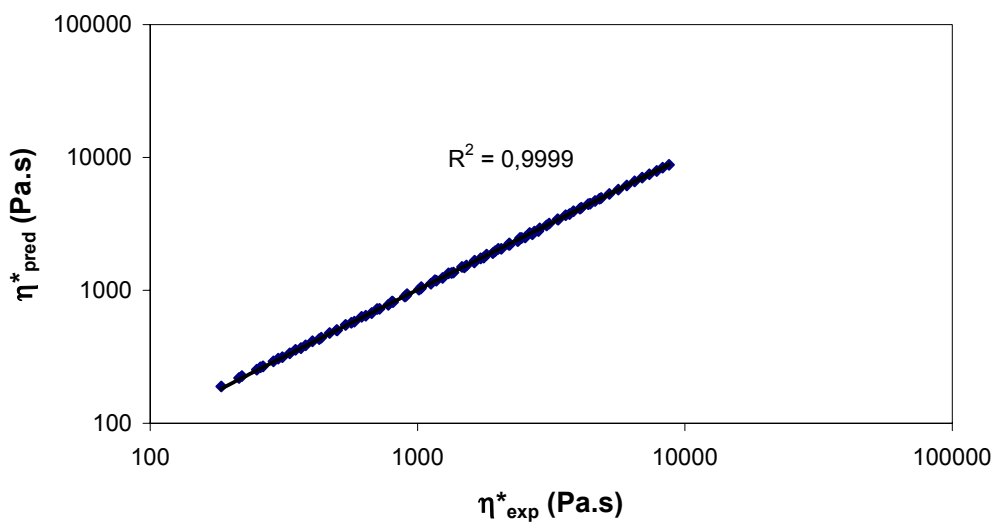


Figura 4.2-5: Comparação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e preditos pelos modelos reológicos para a amostra PP – B.

De acordo com os resultados apresentados na Figura 4.2-5, pode-se considerar que os modelos reológicos conseguem prever com excelente precisão os valores experimentais de η^* em toda a faixa de ω analisados. A Figura 4.2-6 apresenta os resultados dessa comparação para a amostra PS – A. Observa-se que, para essa amostra, a capacidade de ajuste do modelo foi menor do que para as amostras de PP.

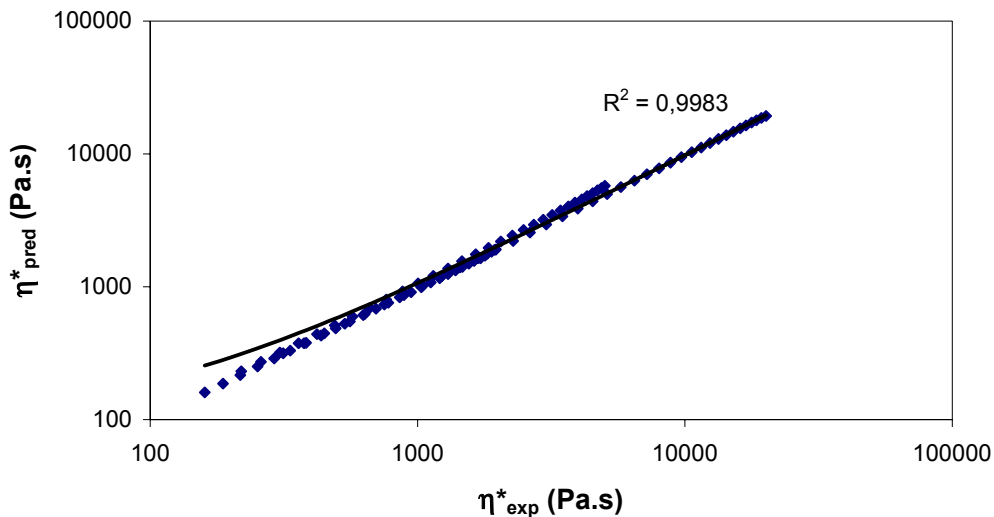


Figura 4.2-6: Comparação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e preditos pelos modelos reológicos para a amostra PS – A.

Pode-se observar que a qualidade dos ajustes dos dados experimentais de η^* aos modelos reológicos apresentam uma relação com o parâmetro b que, conforme se comentou, estabelece o grau de dependência da viscosidade dos materiais com a temperatura. Nota-se que, quanto maior for essa dependência (maior valor de b), piores são os ajustes.

Uma vez analisados os valores de η^* preditos na faixa de ω experimentais, utilizaram-se os modelos para expandir os valores de viscosidade complexas em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios reométricos. A Figura 4.2-7 mostra as curvas experimentais e preditas de η^* para a amostra PP - A.

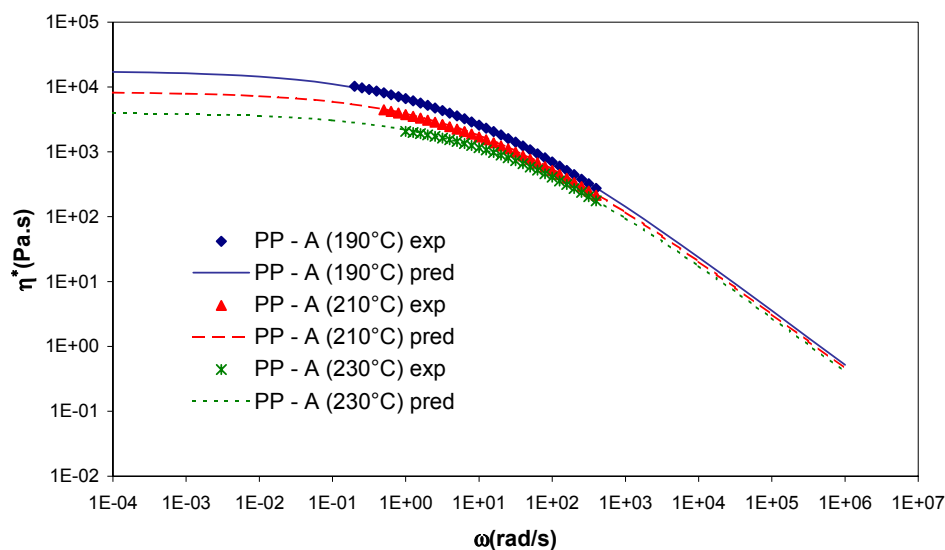


Figura 4.2-7: Extrapolação dos valores de viscosidades em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios com a amostra PP - A.

Na Figura 4.2-7, observa-se que se conseguiu reproduzir bem a forma das curvas de viscosidades experimentais da amostra PP – A com a aplicação dos modelos. A Figura 4.2-8 mostra os resultados dessa mesma análise para o caso da amostra PP - B.

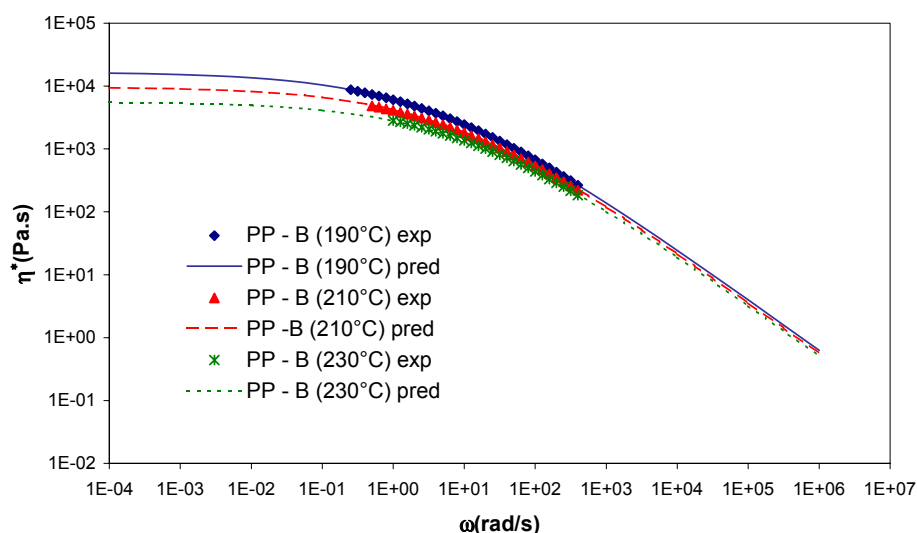


Figura 4.2-8: Extrapolação dos valores de viscosidades em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios com a amostra PP - B.

Os resultados mostrados na Figura 4.2-8 estão de acordo com o alto valor do coeficiente de correlação entre os valores de viscosidade complexa experimentais e

preditos obtidos nas análises para a amostra PP – B. Observa-se que se conseguiu reproduzir bem a forma das curvas de viscosidades experimentais em toda a faixa de frequência angular analisadas nas três temperaturas. A Figura 4.2-9 mostra as curvas experimentais e preditas de viscosidade complexa da amostra PS - A.

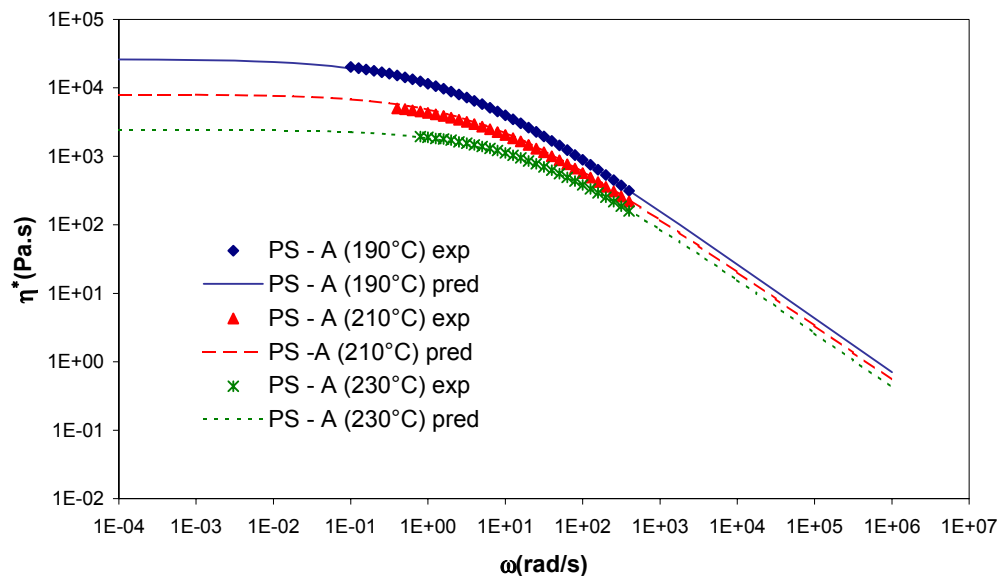


Figura 4.2-9: Extrapolação dos valores de viscosidades em faixas de taxas de cisalhamento não contempladas nos ensaios com a amostra PS - A.

Na Figura 4.2-9, observa-se que, à exceção das previsões a baixas taxas de cisalhamento na temperatura de 210°C, conseguiu-se reproduzir bem a forma das curvas de viscosidades experimentais da amostra PS – A com a aplicação dos modelos.

Apesar de que se observaram alguns desvios entre os valores experimentais e preditos de viscosidade complexa, nota-se que se obteve, para as três amostras, valores de coeficientes de correlação (R^2) superiores a 0,99, indicando que os modelos são aplicáveis para as análises futuras.

Então, ao se analisar apenas o comportamento da viscosidade desses materiais, pode-se tentar explicar alguns resultados da extrusão das amostras analisadas. Em princípio, o maior valor do parâmetro λ da amostra PS -A indica que ela é mais facilmente processável e conduz a uma produtividade maior da extrusora, pois sua viscosidade diminui mais rapidamente à medida que se aumenta a taxa de cisalhamento imposta. Isso justificaria o maior valor da vazão mássica e o menor valor de $P_{saída}$ do PS em relação à amostra PP – A dos resultados da extrusão.

4.2.2 Obtenção de Dados Físicos e Térmicos

A Figura 4.2-10, a seguir, apresenta as curvas de massa específica em função da temperatura ($P = 0,1$ MPa) para uma amostra de PP e para uma amostra de PS com características semelhantes às dos materiais utilizados neste estudo, obtidas a partir da base de dados CAMPUS (MC Base, 2002).

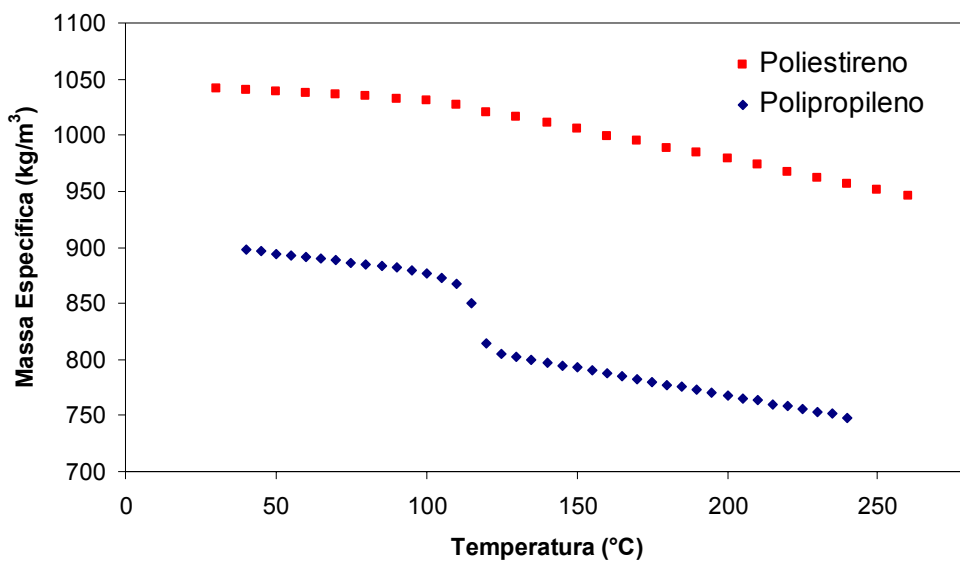


Figura 4.2-10: Variação da massa específica com a temperatura de uma amostra de PP na pressão de 0,1 MPa.

Conforme se pode ver, na Figura 4.2-10, o comportamento da variação da massa específica com a temperatura da amostra de poliestireno é muito diferente do comportamento da amostra de polipropileno. No caso do PS, podem-se distinguir duas regiões distintas, que é um comportamento típico de polímeros amorfos. Abaixo da temperatura de transição vítrea do PS ($T_g \sim 100^\circ\text{C}$), o movimento das moléculas reduz drasticamente, e o volume livre permanece aproximadamente constante. Como se pode observar na Figura 4.2-10, a mudança na massa específica (volume específico) com a temperatura é maior acima da T_g . No caso do PP, observam-se três regiões bem distintas na curva de massa específica *versus* temperatura. Esse é um comportamento típico de polímeros semicristalinos. O comportamento do material no estado líquido é essencialmente o mesmo de polímeros amorfos. No entanto, na região de transição, ocorre uma mudança abrupta na inclinação da curva quando o processo de cristalização inicia. Essa é a temperatura de cristalização do PP ($T_c \sim 115^\circ\text{C}$). A mudança na massa específica (volume específico) do PP, abaixo de sua T_c , é devido, principalmente, ao

aumento do grau de cristalinidade. Portanto, as mudanças de volume no PP são consideravelmente maiores do que as do PS.

Apesar de observar-se, na Figura 4.2-10, que a massa específica de ambas amostras variam bastante com a temperatura, em função da limitação do simulador comercial, informam-se dados em apenas duas temperaturas (80°C e a 190°C, nesse caso) para realizar as simulações. No entanto, sabe-se que os polímeros são fluidos compressíveis e, portanto, também se deve levar em conta a dependência da massa específica do material com a pressão, pois os dados experimentais de extrusão mostraram uma grande variação de pressão durante os experimentos. Em função disso, avaliou-se a variação de ρ com P , tanto na temperatura de 80°C quanto na temperatura de 190°C, para uma amostra de PP e para uma amostra de PS com características semelhantes às dos materiais utilizados neste estudo, obtidas a partir da base de dados CAMPUS (MC Base, 2002). A Figura 4.2-11 apresenta as curvas de massa específica em função da pressão para uma amostra de poliestireno e para uma amostra de polipropileno a 80°C (MC Base, 2002).

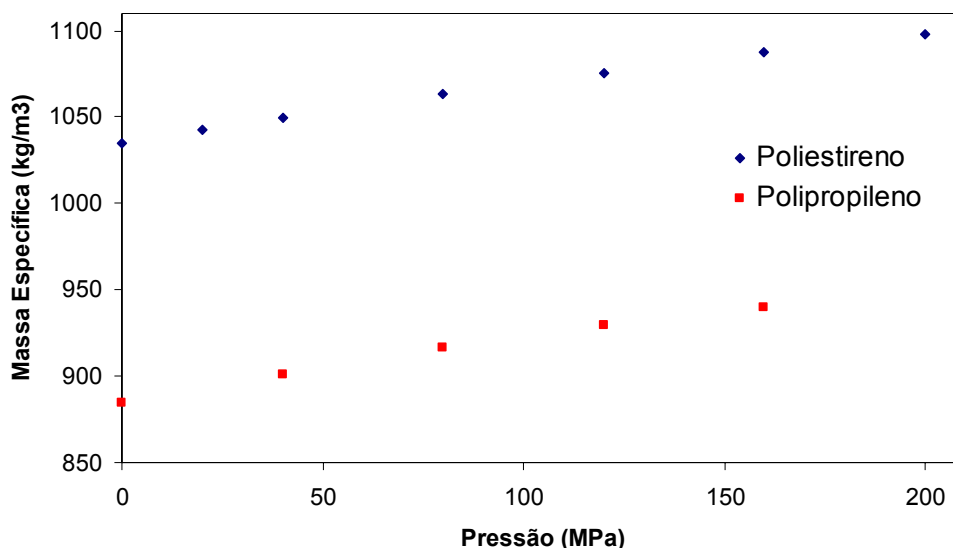


Figura 4.2-11: Variação da massa específica com a pressão de amostras de PP de PS na temperatura de 80°C.

Como se pode ver na Figura 4.2-11, os valores de massa específica da amostra de PP e da amostra de PS apresentam uma elevação importante em seus valores à medida que se aumenta os valores de pressão a 80°C. A Figura 4.2-12, a seguir,

apresenta as curvas de massa específica em função da pressão para as amostras de PP e de PS a 190°C (MC Base, 2002).

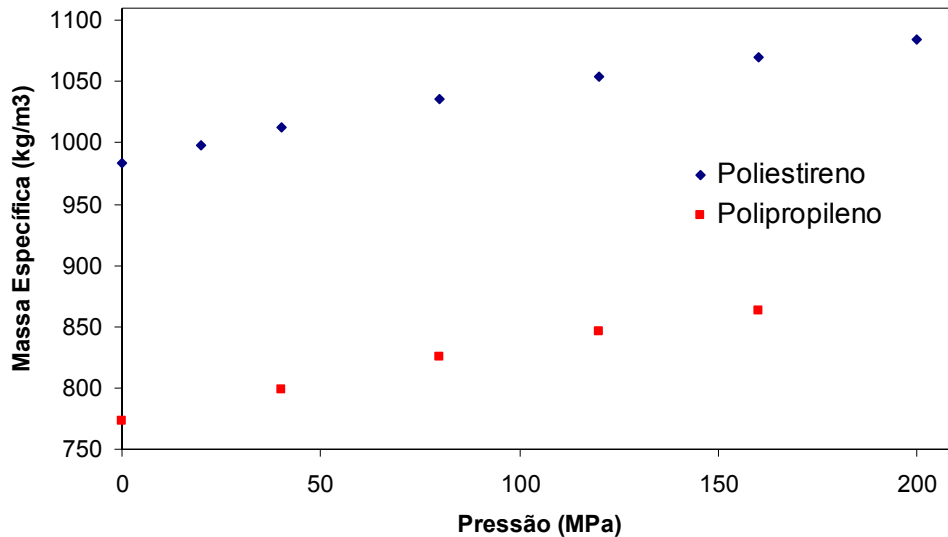


Figura 4.2-12: Variação da massa específica com a pressão de amostras de PP de PS na temperatura de 190°C.

Da mesma forma que o comportamento a 80°C, os valores de massa específica de ambos materiais variam consideravelmente com a pressão a 190°C.

Ao se observarem as Figuras 4.2-10, 4.2-11 e 4.2-12, pode-se afirmar que se cometem erros ao se considerar que valores de massa específica em duas temperaturas representam o comportamento real das amostras e, além disso, que a massa específica independe da pressão. Sabe-se que se realizam essas aproximações para facilitar os cálculos das variáveis de extrusão. Na verdade, o procedimento que os simuladores comerciais utilizam é, quando a temperatura predita no interior do extrusora ultrapassa o valor de T_p , simplesmente, passa-se a considerar as propriedades do fluido.

Como forma de tentar representar a massa específica das amostras da forma mais adequada possível levando-se em conta as limitações do simulador comercial, ajustaram-se os dados de ρ em função de P a modelos de regressão nas temperaturas de 80°C e 190°C, mostrados na Figura 4.2-11 e na Figura 4.2-12, respectivamente. Posteriormente, a partir dos dados experimentais de extrusão mostrados na Tabela 4.1-1 e na Tabela 4.1-2, verificou-se qual a variação média de pressão durante os experimentos. Para calcular o valor da massa específica na temperatura de 80°C,

levaram-se em conta os valores de pressão nas posições da extrusora em que o material estava, predominantemente, no estado sólido e, no caso do cálculo da massa específica na temperatura de 190°C, o critério foi obter valores de pressão onde o material estava, predominantemente, no estado líquido. De posse desses valores médios de pressão ($P_{\text{médio}}$), utilizaram-se as equações de ajuste para calcular os valores correspondentes de massa específica.

No caso da amostra de PP, as equações da massa específica no estado sólido (ρ_s) e no estado líquido (ρ_l) em função de P são as seguintes:

para 80°C,

$$\rho_s = -0,0006P^2 + 0,4433P + 884,69 \quad (R^2 = 0,9997) . \quad (4.2-1)$$

para 190°C,

$$\rho_l = -0,001P^2 + 0,7291P + 772,07 \quad (R^2 = 0,9992) \quad (4.2-2)$$

No caso do PS, as equações de massa específica em função da pressão são apresentadas a seguir:

para 80°C,

$$\rho_s = -0,0004P^2 + 0,3914P + 1034,6 \quad (R^2 = 0,9999) . \quad (4.2-3)$$

para 190°C,

$$\rho_l = -0,0011P^2 + 0,7166P + 984,35 \quad (R^2 = 0,9995) \quad (4.2-4)$$

A Tabela 4.2-2 apresenta os valores médios de massa específica para o PP e para o PS no estado sólido e líquido.

Tabela 4.2-2: Valores médios de massa específica, no estado sólido e no estado líquido, utilizados para as amostras de PP e de PS.

Estado	Polipropileno			Poliestireno		
	Equação	$P_{\text{médio}}$ (MPa)	ρ (kg/m³)	Equação	$P_{\text{médio}}$ (MPa)	ρ (kg/m³)
Sólido (80°C)	(4.2-1)	35	899	(4.2-3)	23	1043
Líquido (190°C)	(4.2-2)	28	792	(4.2-4)	20	998

Na Tabela 4.2-2, observa-se a grande diferença entre os valores médios de massa específica da amostra de polipropileno em relação aos valores da amostra de poliestireno. O fato de os valores de massa específica do PS serem consideravelmente maiores do que do PP também justificam os maiores valores de vazão mássica da amostra de PS, obtidos experimentalmente, em relação ao valores da amostra de PP.

Em se tratando do calor específico (C_p), sabe-se que ele indica a quantidade de energia necessária para aumentar a temperatura de 1 unidade de massa de um material em 1 grau. Em função disso, ele é uma propriedade muito importante no estudo dos processos de aquecimento e de resfriamento durante a extrusão. O calor específico de polímeros amorfos aumenta de forma aproximadamente linear em relação à temperatura abaixo da T_g . Próximo à T_g , ocorre uma elevação abrupta no valor de C_p e, após esse ponto, o calor específico aumenta à medida que se aumenta a temperatura, no entanto, o incremento no valor de C_p é menos intenso quando comparado ao comportamento antes da T_g . No caso de polímeros semicristalinos, a elevação abrupta nos valores de C_p próximo à T_g é muito menos pronunciada em relação ao comportamento de polímeros amorfos, entretanto, ocorre uma elevação muito grande nos valor de C_p na temperatura de fusão T_m . No entanto, apesar de saber-se que o calor específico dos polímeros variam com a temperatura, em função da limitação do simulador comercial, informaram-se os valores dessa propriedade em apenas duas temperaturas (80°C e 190°C). A Tabela 4.2-3, a seguir, apresenta os valores de calor específico, obtidos da literatura, que se utilizou para as amostras de PP e de PS.

Tabela 4.2-3: Valores de calor específico, no estado sólido (Cp_s) e no estado líquido (Cp_l), utilizados para as amostras de PP e de PS.

Material	Cp_s (J/kg°C)	Cp_l(J/kg°C)	Fonte
Polipropileno	1700	2100	Flow 2000, 2002
Poliestireno	1218	1923	Han <i>et al.</i> , 1996

Conforme se pode observar na Tabela 4.2-3, os valores de calor específico do PP são maiores do que do PS. Em função disso, é evidente que peças produzidas com PP necessitam de mais tempo para resfriarem, podendo limitar as taxas de produção de material.

Em relação à condutividade térmica dos materiais, sabe-se que ela trata-se de uma constante de proporcionalidade entre o fluxo de calor condutivo e o gradiente de temperatura que serve como força motriz desse fluxo. A condutividade térmica dos polímeros é muito baixa, possuindo valores cerca de duas ou três ordens de magnitude a menos que a maioria dos metais. Essa baixa condutividade térmica limita a taxa em que os polímeros podem ser aquecidos e plastificados. No resfriamento, a baixa condutividade térmica pode causar resfriamento não-uniforme e empenamento³. A Tabela 4.2-4 apresenta os valores de condutividade térmica (k), obtidos da literatura, que se utilizou para as amostras de PP e de PS

Tabela 4.2-4: Valores de condutividade térmica, no estado sólido (k_s) e no estado líquido (k_l), utilizados para as amostras de PP e de PS.

Material	k_s (W/m°C)	k_l(W/m°C)	Fonte
Polipropileno	0,284	0,156	Zhang <i>et al.</i> , 2000
Poliestireno	0,123	0,159	Moore, 1989

A Tabela 4.2-4 mostra que, no estado sólido, o PP apresenta um valor de condutividade térmica maior do que o do PS. Entretanto, no estado líquido, o comportamento inverte-se. Conforme se pode ver nessa tabela, a condutividade térmica do PS é menos sensível à temperatura do que a condutividade do PP. Esse é um comportamento típico de polímeros amorfos.

³ Distorção que causa um encurvamento na peça plástica.

Os dados que se necessita utilizar nas simulações para caracterizar o processo de fusão dos polímeros são a temperatura de plastificação (T_p) e a entalpia de fusão (ΔH_f). Como se sabe, esses dados são característicos de polímeros semicristalinos. Para esses materiais, se as temperaturas de operação da extrusora forem muito próximas à temperatura de fusão do material, a viscosidade do polímero será muito alta, resultando em excessivo consumo de energia. Por outro lado, se as temperaturas de operação da extrusora forem muito maiores do que a T_m , o polímero pode degradar. Em relação à entalpia de fusão, ela representa o calor latente que se deve fornecer ao material, em adição ao calor utilizado apenas para aquecer a massa do polímero, para fundi-lo.

A Tabela 4.2-5 apresenta os valores de T_p e de ΔH_f utilizados para o PS e para o PP. Para o polipropileno, os valores dessas propriedades são resultados de medidas experimentais e, para o poliestireno, por ser amorfo, o valor de T_p é um valor obtido via ajuste de dados experimentais de extrusão a modelos matemáticos (Han *et al.*, 1996). Em função do PS não apresentar calor latente de fusão, seu valor de ΔH_f é igual a zero.

Tabela 4.2-5: Valores de temperatura de plastificação e de entalpia de fusão utilizados para as amostras de PP e de PS.

Material	T_p (°C)	ΔH_f(J/kg)	Fonte
Polipropileno	163	107930	Wolf e Grave, 2002
Poliestireno	155	0	Han <i>et al.</i> , 1996

Os últimos dados importantes, em termos de simulação, referem-se às características do leito sólido de cada material. As propriedades do leito sólido que se deve informar nas simulações são a massa específica aparente (ρ_a) e os fatores de atrito entre o material e o barril (f_b) e entre o material e o parafuso (f_s).

Em se tratando da massa específica aparente do leito sólido, ela representa a massa específica das partículas poliméricas, incluindo os espaços vazios entre as partículas. De maneira geral, essa propriedade afeta a consistência do escoamento das partículas poliméricas e reflete o empacotamento do leito sólido. Materiais com baixos valores de massa específica aparente ($\rho_a < 200 \text{ kg/m}^3$) tendem a causar problemas no transporte de sólidos, tanto no funil da extrusora quanto na seção de alimentação do parafuso. Além disso, materiais com partículas com forma irregular tendem a ter baixos

valores de ρ_a (e.g., flocos), resultando em baixos valores de vazão mássica de sólidos. Dessa forma, a vazão de sólidos pode ser insuficiente para abastecer as zonas de plastificação e de transporte de fluido.

Diferentemente dos outros dados físicos e térmicos, obtiveram-se experimentalmente os valores da massa específica aparente das amostras analisadas de acordo com o seguinte procedimento (ASTM D1895, 1997) :

- À temperatura e à pressão ambiente, preencheu-se um funil com uma amostra;
- Fez-se o material escoar livremente dentro de um recipiente de volume conhecido;
- Pesou-se a amostra;
- Dividiu-se a massa da amostra pelo volume do recipiente, obtendo-se a massa específica do material.

A Tabela 4.2-6, a seguir, apresenta os valores obtidos para as amostras PP – A e PS - A.

Tabela 4.2-6: Valores de massa específica aparente medidos para as amostras de PP e de PS.

Material	ρ_a (kg/h)
PP - A	555
PP - B	544
PS - A	622

Como se pode ver na Tabela 4.2-6, o valor de massa específica aparente da amostra de PS é maior do que o valor das amostra PP - A. Isso também contribuiu para o maior valor de vazão mássica experimental do PS em relação ao PP.

Em relação aos fatores de atrito entre o material e o barril (f_b) e entre o material e o parafuso (f_s), os mesmos representam a medida da resistência ao escoamento em uma interface entre as partículas do material e a parede do barril e do parafuso, respectivamente. Os valores desses fatores de atrito são influenciados por uma série de fatores, dentre os quais se pode destacar a temperatura, as condições da superfície do metal, o tamanho das partículas do polímero, o grau de compactação do leito sólido, a umidade relativa, a dureza do polímero, etc. Utilizaram-se, como uma estimativa inicial,

valores-padrão de f_b e de f_s indicados no manual do simulador para extrusoras com barril de superfície lisa que, posteriormente, foram ajustados aos dados experimentais. Na verdade, o simulador considera valores iguais para os fatores de atrito polímero-barril e polímero-parafuso para o PP e para o PS (Tabela 4.2-7). Entretanto, Morton-Jones (1989) apresenta valores de fator de atrito de 0,50 e de 0,67 para o PS e para o PP, respectivamente, considerando-se o atrito entre esses materiais e uma superfície metálica não-especificada.

Tabela 4.2-7: Valores dos fatores de atrito polímero-barril (f_b) e polímero-parafuso (f_s) utilizados, inicialmente, nas simulações com as amostras de PP e de PS.

Material	f_b	f_s	Fonte
<i>Polipropileno</i>	0,450	0,200	Flow 2000, 2002
<i>Poliestireno</i>	0,450	0,200	Flow 2000, 2002

Na seção 4.3, a seguir, apresentam-se os resultados da etapa de adequação das predições do simulador.

4.3 Adequação das Predições do Simulador Comercial

Os perfis de temperaturas utilizados para as simulações da extrusão das amostras PP - A e PS - A estão representadas na Tabela 4.3-1.

Tabela 4.3-1: Perfis de temperaturas utilizados nas simulações da extrusão das amostras PP - A e PS - A.

Amostra	$N(\text{rpm})$	T_1 (°C)	T_2 (°C)	T_3 (°C)	T_4 (°C)
PP - A	70	214,5	207,0	207,0	207,0
	80	214,5	207,0	207,0	207,0
	90	214,7	207,0	207,0	207,0
	100	215,0	207,0	207,0	207,0
PS - A	70	203,0	206,0	210,0	210,0
	80	203,0	205,0	210,0	210,0
	90	204,0	206,0	210,0	210,0
	100	204,0	207,0	209,0	209,0

Os valores dos diâmetros do tubos utilizados na definição da queda de pressão na matriz virtual nas simulações da extrusão do PP e do PS estão mostrados na Tabela 4.3-2 a seguir

Tabela 4.3-2: Dados utilizados para o cálculo do diâmetro da matriz virtual.

PP - A					PS - A					
$P_{saída}$ (MPa)	\dot{M} (kg/h)	T_{matriz} (°C)	D_T (mm)	$\bar{D}_{T_{PP-A}}$ (mm)	$P_{saída}$ (MPa)	\dot{M} (kg/h)	T_{matriz} (°C)	D_T (mm)	$\bar{D}_{T_{PS-A}}$ (mm)	\bar{D}_{T_T} (mm)
6,4	19,5	215,0	8,1	8,0	5,8	21,8	225,0	7,6	7,7	7,9
6,8	21,6	215,0	8,0		5,9	24,8	225,0	7,8		
7,0	23,6	214,0	8,1		6,1	27,5	224,0	7,8		
7,3	25,9	214,0	8,0		6,4	31,2	226,0	7,7		

Conforme se pode ver na Tabela 4.3-2, obteve-se um valor médio para o diâmetro do tubo de 7,9 mm. Então, especificando-se valores de ΔP_T , \dot{M}_T e T_T de forma que a combinação dos mesmos resulte em um valor de D_T igual a 7,9 mm, garante-se que o escoamento ocorre através da mesma matriz. No entanto, apesar de ter-se realizado todos os experimentos na mesma matriz, observa-se, na Tabela 4.3-2, que as temperaturas da matriz utilizadas nos testes com a amostra de PP e de PS foram diferentes. Dever-se-ia levar em conta essa diferença de temperaturas para definir-se a condição de contorno na saída da extrusora na etapa de adequação do simulador. No entanto, na etapa de obtenção de variáveis de reposta de extrusão via simulação não se dispõe dos valores de \dot{M} , ΔP e T_{matriz} , pois, justamente, deseja-se prever os valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora. Na verdade, em todas as abordagens que se avaliou, houve grande dificuldade em estabelecer um critério que pudesse ser válido tanto na etapa de adequação dos resultados preditos pelo simulador quanto na etapa de obtenção de variáveis de resposta de extrusão via simulação. No procedimento que se adotou, considerou-se que, em todas as simulações, tanto na etapa de adequação do simulador quanto na etapa de obtenção de variáveis de resposta de extrusão via simulação, deve-se ajustar apenas o valor de ΔP_T , mantendo-se sempre os mesmos valores de \dot{M}_T e de T_T . Dessa forma, as diferenças reológicas entre os materiais manifestam-se no valor de ΔP_T necessário para obter-se um valor de D_T de 7,9 mm.

Uma vez definidos os perfis de temperatura nas zonas de aquecimento da extrusora e as características da matriz virtual, realizaram-se as simulações. A Tabela 4.3-3 apresenta uma comparação entre os valores de vazão mássica (\dot{M}_F) e de pressão na saída da extrusora ($P_{saídaF}$) preditos pelo Flow 2000 com os dados experimentais \dot{M}_E e $P_{saídaE}$ para a amostra PP -A.

Tabela 4.3-3: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador com os dados experimentais para a amostra PP - A.

<i>N</i> (rpm)	\dot{M}_F (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaF}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	16,9	19,5	13,5	6,2	6,4	3,3
80	19,2	21,6	11,2	6,4	6,8	5,8
90	21,4	23,6	9,4	6,5	7,0	7,2
100	23,6	25,9	8,6	6,6	7,3	9,6

Na Tabela 4.3-4, observa-se que, em todas as velocidades de rotação avaliadas nos testes com a amostra PP - A, as simulações conduziram a valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora menores do que os valores obtidos experimentalmente. Além disso, nota-se uma discordância relativamente grande entre os valores de vazão preditos pelo simulador com os valores experimentais. No entanto, observa-se que, à medida que se aumentou o valor da velocidade de rotação (N), as diferenças entre os valores preditos e os dados experimentais diminuíram. No caso da pressão na saída da extrusora, ocorre o contrário, ou seja, a velocidades de rotação mais baixas, os valores preditos e os valores experimentais apresentaram pouca diferença. Entretanto, na medida em que se aumentaram os valores de N , as diferenças aumentaram. Isso ocorreu devido ao fato de que os valores de pressão preditos variaram pouco com a velocidade de rotação. Na verdade, os dados experimentais variaram 0,9 MPa durante os testes, enquanto que os valores preditos variaram somente 0,4 MPa.

A Tabela 4.3-4 apresenta uma comparação entre os valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 com os dados experimentais para a amostra de poliestireno.

Tabela 4.3-4: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador com os dados experimentais para a amostra PS - A.

N (rpm)	\dot{M}_F (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaF}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	20,6	21,8	5,5	6,0	5,8	-4,3
80	23,2	24,8	6,2	6,1	5,9	-4,2
90	25,8	27,5	6,3	6,2	6,1	-0,6
100	28,2	31,2	9,6	6,3	6,4	1,0

Conforme se pode ver na Tabela 4.3-4, assim como no caso da amostra PP – A, os resultados de vazão mássica preditos pelo simulador apresentaram valores menores do que os dados experimentais em todas as velocidades de rotação avaliadas. No entanto, ao contrário do que ocorreu com a amostra de polipropileno, com a amostra de PS, as diferenças entre os valores preditos com os dados experimentais aumentaram à medida que se aumentou os valores de N . Além disso, diferentemente do que ocorreu com a amostra PP – A, exceto na velocidade de rotação mais alta (100 rpm), obteve-se valores de $P_{saída}$ preditos maiores do que os valores experimentais. Da mesma forma do que ocorreu com os testes com a amostra de PP, os valores de $P_{saída}$ variaram muito menos com a N do que os dados experimentais.

Ao se comparar os resultados apresentados na Tabela 4.3-3 com os resultados apresentados na Tabela 4.3-4, observa-se um comportamento coerente com o que a literatura indicou. Conforme se mencionou, procedeu-se às simulações, considerando-se valores iguais dos fatores de atrito polímero-barril (f_b) e polímero-parafuso (f_s) para as amostras de polipropileno e de poliestireno. Entretanto, destacou-se que dados da literatura (Morton-Jones, 1989) mostraram que o polipropileno apresenta um valor de fator de atrito maior do que o do poliestireno, considerando-se a mesma superfície metálica. Isso vem ao encontro da tendência que se observou nos resultados predito de $P_{saída}$, cujos valores sempre foram menores do que os valores experimentais, indicando que se considerou um valor de f_b , que é proporcional ao desenvolvimento de pressão no interior da extrusora, menor do que o real.

Em função disso, resolveu-se diminuir as diferenças entre os resultados de \dot{M} e de $P_{saída}$ experimentais e preditos pelo simulador comercial através da manipulação dos

valores de f_b mantendo-se o mesmo valor de f_s (igual a 0,200) nas simulações da extrusão dos dois materiais. Testou-se uma série de valores de f_b até se obter um compromisso razoável na qualidade das predições da vazão mássica e da pressão na saída da extrusora. Para a amostra de polipropileno, chegou-se a um valor de 0,575 para o fator de atrito polímero-barril. A Tabela 4.3-5 apresenta uma comparação entre os valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000, utilizando-se o valor de f_b igual a 0,575, com os dados experimentais para a amostra de polipropileno.

Tabela 4.3-5: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador, utilizando-se o valor de f_b igual a 0,575, com os dados experimentais para a amostra PP - A.

N (rpm)	\dot{M}_F (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaF}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	20,2	19,5	-3,6	6,7	6,4	-4,1
80	22,9	21,6	-6,0	6,8	6,8	-1,4
90	25,5	23,6	-7,9	7,0	7,0	< 0,1
100	28,1	25,9	-8,7	7,1	7,3	2,6

Os resultados mostrados na Tabela 4.3-5 revelam que, com um valor de f_b maior, obtiveram-se valores preditos maiores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora nas simulações com o polipropileno. Além disso, observa-se que diminuíram as diferenças entre os resultados preditos e os dados obtidos experimentalmente tanto para \dot{M} quanto para $P_{saída}$, sendo que se obteve valores de pressão na saída da extrusora em boa concordância com os dados experimentais.

Em relação à amostra de poliestireno, chegou-se a um valor de 0,560 para o fator de atrito polímero-barril. A Tabela 4.3-6 apresenta uma comparação entre os resultados preditos de \dot{M} e de $P_{saída}$, utilizando-se o valor de f_b igual a 0,560, com os dados experimentais.

Tabela 4.3-6: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo simulador, utilizando-se o valor de f_b igual a 0,560, com os dados experimentais para a amostra PS - A.

N (rpm)	\dot{M}_F (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaF}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	22,7	21,8	-4,3	6,3	5,8	-8,5
80	25,6	24,8	-3,5	6,4	5,9	-8,5
90	28,5	27,5	-3,4	6,4	6,1	-5,0
100	31,1	31,2	0,3	6,6	6,4	-3,3

Da mesma forma que ocorreu para a amostra de polipropileno, conseguiram-se valores preditos maiores de \dot{M} e de $P_{saída}$, mostrados na Tabela 4.3-6, utilizando-se um valor de f_b maior nas simulações da extrusão do poliestireno. Conseguiram-se valores preditos de vazão mássica muito próximos aos dados obtidos experimentalmente, principalmente, a maiores velocidades de rotação. No entanto, os valores preditos de pressão na saída da extrusora estão menos precisos de quando se utilizou um valor de f_b menor.

De maneira geral, conseguiu-se diminuir as diferenças entre os valores preditos com os dados experimentais utilizando-se valores maiores de f_b tanto nas simulações da extrusão do polipropileno quanto com da extrusão do poliestireno. Na verdade, apenas as predições dos valores de $P_{saída}$ nas simulações com o PS com f_b igual a 0,560 pioraram em relação às simulações com f_b igual a 0,450. Além disso, observaram-se erros sistemáticos comparando-se os desvios em relação aos valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ apresentados nas tabelas 4.3-5 e 4.3-6. Isso indica que seria possível melhorar ainda mais a concordância entre os valores experimentais e preditos, por exemplo, através da aplicação de algum método de otimização. No entanto, mesmo sem a aplicação dessa análise mais aprimorada, assumiu-se que o simulador já era capaz de prever os dados experimentais com precisão adequada para que se pudesse utilizá-lo na etapa de obtenção de variáveis de resposta de extrusão via simulação, que é descrita a seguir.

4.4 Obtenção de Variáveis de Resposta de Extrusão via Simulação

A Tabela 4.4-1 mostra os fatores bem como seus níveis que se considerou no planejamento de experimentos.

Tabela 4.4-1: Fatores e níveis considerados no planejamento de experimentos.

Fatores	-1	0	1
η_0 (Pa.s)	15939	22372	28805
n	0,13	0,18	0,23
a	0,34	0,46	0,58
λ (s)	0,19	0,43	0,67
b ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	0,033	0,049	0,065
ρ_s (kg/m^3)	809	978	1147
Cp_s ($\text{J}/\text{kg}^{\circ}\text{C}$)	974,4	1507	2040
k_s ($\text{W}/\text{m}^{\circ}\text{C}$)	0,111	0,212	0,312
T_p ($^{\circ}\text{C}$)	140	159	179
ΔH_f (J/kg)	0	59362	118723
ρ_l (kg/m^3)	713	905	1098
Cp_l ($\text{J}/\text{kg}^{\circ}\text{C}$)	1538	2029	2520
k_l ($\text{W}/\text{m}^{\circ}\text{C}$)	0,140	0,158	0,175
ρ_a (kg/m^3)	499	592	685
f_b	0,550	0,565	0,580
N (rpm)	60	85	110
T_1 ($^{\circ}\text{C}$)	170	195	220
T_2 ($^{\circ}\text{C}$)	170	195	220
T_3 ($^{\circ}\text{C}$)	170	195	220
T_4 ($^{\circ}\text{C}$)	170	195	220

Como se pode ver na Tabela 4.4-1, a única propriedade do material que não se considerou no planejamento, apesar de ser um dado de entrada no simulador, foi o fator de atrito polímero-parafuso (f_s). Fez-se isso, pois se consideraram iguais valores de f_s nas simulações da extrusão do PP e do PS, portanto, não haveria sentido considerar esse fator no planejamento. Os resultados das 65 simulações estão apresentadas na Tabela 4.4-2 a seguir.

Tabela 4.4-2: Resultados das 65 previsões de \dot{M} e de $P_{saída}$ via Flow 2000.

Simulação	Fatores																Variáveis de Resposta						
	η_0	n	a	λ	b	ρ_l	C_{p_l}	k_l	T_p	ρ_s	C_{p_s}	k_s	ΔH_f	ρ_a	f_b	N	T ₁	T ₂	T ₃	T ₄	Q _F (kg/h)	P _{saída} (MPa)	
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	13,7	7,4
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	15,6	13,3
3	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	26,7	11,2
4	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	25,2	15,4
5	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	25,6	9,2
6	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	26,0	13,0
7	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	16,7	9,8
8	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	13,8	15,1
9	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	18,7	2,4
10	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	21,5	4,3
11	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	27,8	3,7
12	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	26,1	6,3
13	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	23,0	4,9
14	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	1	23,4	8,6
15	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	18,9	7,9
16	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	15,0	12,4
17	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	1	28,3	7,3
18	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	23,4	11,6
19	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	14,7	11,8
20	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	13,3	15,2
21	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	1	1	16,8	5,4
22	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	14,8	7,7
23	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	23,3	6,0
24	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	25,8	8,9
25	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	47,9	2,3
26	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	34,3	3,8
27	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	14,8	2,2
28	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	13,6	3,3
29	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	14,4	4,8
30	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	13,1	8,6
31	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	27,8	8,3
32	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	24,3	11,0
33	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1	1	1	1	23,2	4,4
34	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	21,7	7,2
35	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	41,8	7,8
36	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	38,5	11,1
37	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	39,7	11,9
38	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	38,3	18,7
39	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	19,5	15,5
40	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	18,9	22,5
41	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	29,2	3,3
42	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	22,7	5,7
43	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	45,8	6,6
44	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	36,1	9,8
45	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	40,0	3,9
46	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	45,7	7,0
47	-1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	23,8	5,3
48	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	22,3	8,5
49	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	37,0	3,9
50	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	33,8	5,1
51	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	25,4	3,7
52	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	29,7	6,8
53	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	23,0	11,9
54	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	19,2	18,5
55	-1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	33,8	13,3
56	1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	35,3	16,5
57	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	45,5	4,0
58	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	38,8	6,9
59	-1	1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	20,5	5,6
60	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	27,0	9,4
61	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	40,0	3,8
62	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	20,1	4,6
63	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	41,2	4,1
64	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	43,1	6,6
65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	24,4	7,6

A Tabela 4.4-3 apresenta os efeitos confundidos das interações no planejamento.

Tabela 4.4-3: Efeitos de 2ª ordem confundidos no planejamento fatorial fracionário.

Fatores	Efeitos Confundidos						
$\eta_0 \times n$	$a \times T_p$	$\lambda \times \rho_s$	$b \times Cp_s$	$\rho_l \times k_s$	$k_l \times T_3$	$\Delta H_f \times f_b$	$\rho_a \times N$
$\eta_0 \times a$	$n \times T_p$	$b \times \Delta H_f$	$\rho_l \times \rho_a$	$k_l \times T_1$	$Cp_s \times f_b$	$k_s \times N$	
$\eta_0 \times \lambda$	$n \times \rho_s$	$Cp_l \times f_b$	$k_l \times N$	$k_s \times T_1$	$\rho_a \times T_3$		
$\eta_0 \times b$	$n \times Cp_s$	$a \times \Delta H_f$	$T_p \times f_b$	$k_s \times T_2$	$\rho_a \times T_4$		
$\eta_0 \times \rho_l$	$n \times k_s$	$a \times \rho_a$	$T_p \times N$	$\rho_s \times T_1$	$Cp_s \times T_2$	$\Delta H_f \times T_4$	
$\eta_0 \times Cp_l$	$\lambda \times f_s$	$\rho_s \times \Delta H_f$	$T_1 \times T_4$	$T_2 \times T_3$			
$\eta_0 \times k_l$	$n \times T_3$	$a \times T_1$	$\lambda \times N$	$\rho_s \times \rho_a$			
$\eta_0 \times T_p$	$n \times a$	$b \times f_b$	$\rho_l \times N$	$Cp_s \times \Delta H_f$	$k_s \times \rho_a$	$T_1 \times T_3$	$T_2 \times T_4$
$\eta_0 \times \rho_s$	$n \times \lambda$	$\rho_l \times T_1$	$Cp_l \times \Delta H_f$	$k_l \times \rho_a$	$N \times T_3$		
$\eta_0 \times Cp_s$	$n \times b$	$a \times f_b$	$\rho_l \times T_2$	$T_p \times \Delta H_f$	$N \times T_4$		
$\eta_0 \times k_s$	$n \times \rho_l$	$a \times N$	$\lambda \times T_1$	$b \times T_2$	$T_p \times \rho_a$	$f_b \times T_4$	
$\eta_0 \times \Delta H_f$	$n \times f_b$	$a \times b$	$\rho_l \times T_4$	$Cp_l \times \rho_s$	$T_p \times Cp_s$	$N \times T_2$	
$\eta_0 \times \rho_a$	$n \times N$	$a \times \rho_l$	$\lambda \times T_3$	$b \times T_4$	$k_l \times \rho_s$	$T_p \times k_s$	$f_b \times T_2$
$\eta_0 \times f_b$	$n \times \Delta H_f$	$a \times Cp_s$	$\lambda \times Cp_l$	$b \times T_p$	$k_s \times T_4$	$\rho_a \times T_2$	
$\eta_0 \times N$	$n \times \rho_a$	$a \times k_s$	$\lambda \times k_l$	$\rho_l \times T_p$	$\rho_s \times T_3$	$Cp_s \times T_4$	$\Delta H_f \times T_2$
$\eta_0 \times T_1$	$a \times k_l$	$\lambda \times k_s$	$\rho_l \times \rho_s$	$Cp_l \times T_4$	$T_p \times T_3$		
$\eta_0 \times T_2$	$b \times k_s$	$\rho_l \times Cp_s$	$Cp_l \times T_3$	$T_p \times T_4$	$\Delta H_f \times N$	$\rho_a \times f_b$	
$\eta_0 \times T_3$	$n \times k_l$	$\lambda \times \rho_a$	$Cp_l \times T_2$	$T_p \times T_1$	$\rho_s \times N$		
$\eta_0 \times T_4$	$b \times \rho_a$	$\rho_l \times \Delta H_f$	$Cp_l \times T_1$	$T_p \times T_2$	$Cp_s \times N$	$k_s \times f_b$	
$n \times Cp_l$	$n \times \Delta H_f$	$k_l \times \Delta H_f$	$\rho_s \times f_b$				
$n \times T_1$	$a \times T_3$	$\lambda \times \rho_l$	$k_l \times T_p$	$\rho_s \times k_s$			
$n \times T_2$	$a \times T_4$	$b \times \rho_l$	$Cp_l \times k_l$	$Cp_s \times k_s$	$\Delta H_f \times \rho_a$	$f_b \times N$	
$n \times T_4$	$a \times T_2$	$b \times N$	$\rho_l \times f_b$	$Cp_s \times \rho_a$	$k_s \times \Delta H_f$		
$a \times \lambda$	$\rho_l \times T_3$	$Cp_l \times N$	$k_l \times k_s$	$T_p \times \rho_s$	$N \times T_1$		
$a \times Cp_l$	$\lambda \times Cp_s$	$b \times \rho_s$	$k_l \times T_4$				
$a \times \rho_s$	$\lambda \times T_p$	$b \times Cp_l$	$\rho_l \times k_l$	$k_s \times T_3$	$\rho_a \times T_1$		
$\lambda \times b$	$Cp_l \times T_p$	$\rho_s \times Cp_s$	$T_1 \times T_2$	$T_3 \times T_4$			
$\lambda \times T_2$	$b \times T_1$	$Cp_l \times \rho_a$	$k_l \times \Delta H_f$	$f_b \times T_3$			
$\lambda \times T_4$	$b \times T_3$	$Cp_l \times k_s$	$k_l \times Cp_s$	$f_b \times T_1$			
$b \times k_l$	$\rho_l \times Cp_l$	$\rho_s \times Cp_s$	$Cp_s \times T_3$	$\Delta H_f \times T_1$			
$Cp_l \times N$	$k_l \times f_b$	$\rho_s \times T_2$	$Cp_s \times T_1$	$\Delta H_f \times T_3$			

Como se pode ver na Tabela 4.4-3, todos os 190 efeitos de 2ª ordem estão confundidos, não sendo possível diferenciá-los, portanto, resolveu-se desconsiderá-los nas análises.

As Tabelas 4.4-4 e 4.4-5, a seguir, apresentam as tabelas ANOVA para as análises da vazão mássica e da pressão na saída da extrusora, utilizando-se um nível de significância (α) igual a 0,05.

Tabela 4.4-4: Tabela ANOVA para as análises da vazão mássica.

	SQ	v	MQ = SQ/v	F	p
Curvatura	5,107	1	5,107	0,459	5,02E-01
η_0	72,702	1	72,702	6,539	1,42E-02
n	35,105	1	35,105	3,158	8,26E-02
a	47,910	1	47,910	4,309	4,39E-02
λ	167,571	1	167,571	15,072	3,51E-04
b	5,656	1	5,656	0,509	4,80E-01
ρ_l	1724,093	1	1724,093	155,076	7,43E-16
Cp_l	0,048	1	0,048	0,004	9,48E-01
k_l	6,142	1	6,142	0,552	4,61E-01
T_p	134,428	1	134,428	12,091	1,17E-03
ρ_s	17,380	1	17,380	1,563	2,18E-01
Cp_s	0,379	1	0,379	0,034	8,54E-01
k_s	6,501	1	6,501	0,585	4,49E-01
ΔH_f	0,840	1	0,840	0,076	7,85E-01
ρ_a	6,415	1	6,415	0,577	4,52E-01
f_b	96,939	1	96,939	8,719	5,09E-03
N	2997,297	1	2997,297	269,596	3,90E-20
T_1	128,382	1	128,382	11,548	1,47E-03
T_2	26,067	1	26,067	2,345	1,33E-01
T_3	40,210	1	40,210	3,617	6,39E-02
T_4	101,441	1	101,441	9,124	4,23E-03
Erro	478,063	43	11,118		
SQ total	6098,680	64			

Tabela 4.4-5: Tabela ANOVA para as análises da pressão na saída da extrusora.

	SQ	v	MQ = SQ/v	F	p
Curvatura	0,614	1	0,614	0,176	6,77E-01
η_0	188,305	1	188,305	54,111	3,94E-09
n	68,041	1	68,041	19,552	6,55E-05
a	130,375	1	130,375	37,464	2,44E-07
λ	386,440	1	386,440	111,047	1,72E-13
b	41,337	1	41,337	11,879	1,28E-03
ρ_l	1,844	1	1,844	0,530	4,71E-01
Cp_l	0,826	1	0,826	0,237	6,29E-01
k_l	1,885	1	1,885	0,542	4,66E-01
T_p	0,165	1	0,165	0,047	8,29E-01
ρ_s	0,147	1	0,147	0,042	8,38E-01
Cp_s	0,362	1	0,362	0,104	7,49E-01
k_s	0,914	1	0,914	0,263	6,11E-01
ΔH_f	0,659	1	0,659	0,189	6,66E-01
ρ_a	0,067	1	0,067	0,019	8,91E-01
f_b	3,676	1	3,676	1,056	3,10E-01
N	0,005	1	0,005	0,001	9,70E-01
T_1	1,199	1	1,199	0,344	5,60E-01
T_2	0,238	1	0,238	0,068	7,95E-01
T_3	2,986	1	2,986	0,858	3,59E-01
T_4	318,558	1	318,558	91,540	3,24E-12
Erro	149,638	43	3,480		
SQ total	1298,279	64			

Os valores de p , nas Tabelas 4.4-4 e 4.4-5, representam os menores níveis de significância que levariam à rejeição da hipótese nula para os dados fornecidos, ou seja, o valor de p é o menor valor de α em que os dados são significativos.

Em um planejamento fatorial com 2 níveis, pode-se definir o efeito médio de um fator como a mudança na resposta produzida pela variação no nível de um fator ponderado sobre o nível do outro fator.

Para um valor de $\alpha = 0,05$, observa-se que os fatores η_0 , a , λ , ρ_l , T_p , f_b , N , T_1 e T_4 apresentaram efeitos significativos no caso da vazão mássica. A Tabela 4.4-6 mostra o efeito dos fatores significativos nos valores preditos de vazão mássica.

Tabela 4.4-6: Efeitos significativos nos valores preditos de vazão mássica.

Variável de Resposta	Efeitos Significativos								
	N	ρ_l	λ	T_p	T_1	T_4	f_b	η_0	a
\dot{M}	13,7	10,4	3,2	2,9	-2,8	2,5	2,5	-2,1	-1,7

Os resultados mostrados na Tabela 4.4-6 indicam que os valores preditos de vazão mássica dependem tanto das condições de operação da extrusora quanto das propriedades reológicas e físicas dos materiais. Ao se analisar o sinal dos efeitos de cada fator, observam-se alguns resultados intuitivos; outros nem tanto. Por exemplo, quando se aumenta a velocidade de rotação do parafuso, aumenta-se a vazão mássica da extrusora, pois esse fator afeta diretamente a taxa de cisalhamento que, por sua vez, está relacionado com a velocidade de deslocamento do material. O efeito da massa específica do líquido também é coerente, visto que, quanto maior o seu valor, mais massa por unidade de volume do material será transportada. Em relação aos parâmetros reológicos, já se esperava que a vazão mássica dependesse do comportamento da curva de viscosidades do material. No entanto, conforme se mencionou, seria mais apropriado analisar a curva de viscosidades inteira ao invés de avaliar cada parâmetro separadamente, visto que cada um deles explica apenas uma parte da curva de viscosidades.

Primeiramente, avaliaram-se os efeitos dos parâmetros de forma isolada, considerando-se que os outros parâmetros apresentam valores fixos. Então, no caso do efeito do fator λ , como já se comentou, esse parâmetro indica o comprimento do platô Newtoniano, sendo que, quanto maior o seu valor, menor o comprimento do mesmo. Assim, considerando-se dois materiais com o mesmo M_w , a viscosidade do material que apresentar maior valor do parâmetro λ vai decrescer a taxas de cisalhamento mais baixas do que no caso do material com menor λ , assim, seu escoamento será mais fácil.

O efeito da temperatura de plastificação não é tão claro. Na verdade, é provável que o efeito desse fator dependa do desenho do parafuso, pois ele deve estar associado ao desenvolvimento de pressão ao longo do eixo da extrusora. Em simulações

preliminares, não apresentadas nesta dissertação, tentou-se reproduzir os perfis de pressão obtidos experimentalmente. Ao contrário do que se observou nos resultados experimentais, em que o maior valor de pressão foi obtido no início da primeira seção de compressão do parafuso, os resultados preditos mostraram o pico de pressão na segunda seção de compressão do parafuso. Apesar de não coincidirem, tanto os valores experimentais quanto os valores preditos indicaram que o transporte de sólidos é o responsável por desenvolver a pressão utilizada para transportar o material nas outras zonas funcionais da extrusora. Em função disso, quanto maior o valor de T_p , mais tempo o material permanece no estado sólido e, portanto, mais tempo ele tem para desenvolver a pressão necessária para transportar o material nas zonas seguintes do equipamento. No entanto, no caso de parafusos em que a zona de transporte de sólidos não é a responsável em desenvolver pressão, o efeito de T_p deve ser o contrário, ou seja, quanto maior seu valor, menor a vazão de material.

Pode-se seguir a mesma linha de raciocínio para tentar-se explicar o efeito do fator T_1 . Segundo os resultados do planejamento de experimentos, quando se aumenta o valor da temperatura na 1ª zona de aquecimento, diminui o valor da vazão mássica predita. Em termos de simulação, isso é devido ao fato de que temperaturas altas em T_1 antecipam o processo de plastificação do material, diminuindo a capacidade de desenvolvimento de pressão nas primeiras zonas da extrusora, conseqüentemente, diminuindo a vazão. Na prática, um aumento da temperatura na primeira zona de aquecimento da extrusora diminui o fator de atrito entre o polímero e o barril (f_b), diminuindo a capacidade de transporte de sólidos. Por outro lado, um aumento na temperatura na 4ª zona de aquecimento (T_4) aumenta a vazão mássica, visto que se diminui a viscosidade do polímero, facilitando o fluxo de material.

A próxima análise refere-se ao efeito do fator de atrito polímero-barril. Como se comentou, esse parâmetro afeta o transporte de sólidos e, quanto maior o seu valor, maior a capacidade da extrusora transportar as partículas de polímero.

Em se tratando do parâmetro η_0 , seu efeito também é coerente. Ao se considerar dois polímeros com a mesma distribuição de massas molares, a resina que apresentar maior valor de η_0 , ou seja, maior valor de M_w , possuirá maior resistência ao fluxo, assim, terá maior dificuldade em ser transportada nos canais da extrusora. Dessa forma, essa resina apresentará menor valor de \dot{M} do que o polímero com menor η_0 .

Outro fator reológico que apresentou efeito significativo foi o parâmetro a . Sabe-se que, quanto maior o valor do parâmetro a , mais acentuada é a transição do comportamento Newtoniano ao comportamento da lei da potência. Assim, considerando-se dois polímeros com o mesmo valor de M_w , a viscosidade da resina que apresentar maior valor do parâmetro a , vai manter um comportamento Newtoniano a taxas de cisalhamento maiores do que a resina que possuir um valor de a menor, dessa forma, dificultando seu fluxo e, conseqüentemente, diminuindo a vazão mássica.

Conforme se pode observar na Tabela 4.4-5, para um valor de $\alpha = 0,05$, nota-se que os fatores λ , T_4 , η_0 , a , n e b apresentaram efeitos significativos nos valores preditos da pressão na saída da extrusora. Esses efeitos estão mostrados na Tabela 4.4-7 a seguir.

Tabela 4.4-7: Efeitos significativos nos valores preditos de pressão na saída da extrusora.

Variável de Resposta	Efeitos Significativos					
	λ	T_4	η_0	a	n	b
$P_{saída}$	-4,9	-4,5	3,4	2,9	2,1	-1,6

Os resultados apresentados na Tabela 4.4-7 mostram que os parâmetros reológicos possuem o papel importante nos valores preditos de $P_{saída}$, pois o comportamento da curva de viscosidades afeta o desenvolvimento de pressão na extrusora. As análises dos parâmetros reológicos seguem a mesma lógica do que as avaliações dos efeitos nos valores preditos de vazão mássica. Assim, analisou-se cada parâmetro reológico separadamente. Por exemplo, no caso do parâmetro λ , quanto maior o seu valor, menor o valor de $P_{saída}$. Isso é coerente, pois, considerando-se dois materiais com a mesma massa molar, a viscosidade da resina que apresentar maior valor do parâmetro λ vai começar a diminuir a taxas de cisalhamento menores do que no caso da resina de maior λ , assim, o seu transporte vai desenvolver pouca pressão.

Em relação à temperatura na 4ª zona de aquecimento do barril, seu efeito é esperado, pois, quanto maior for T_4 , menor a viscosidade do material na saída da extrusora, portanto, menor a capacidade de desenvolver pressão através do transporte do fluido (Equação 2.3-26 e 2.3-47). O efeito de η_0 também é esperado. Ao se considerar dois materiais com a mesma DMM , o polímero que apresentar maior η_0 (maior M_w) vai

desenvolver mais pressão devido a seu transporte, resultando em um maior valor de $P_{saída}$ do que a resina com menor η_0 . No caso do efeito do parâmetro a , considerando-se dois materiais com o mesmo valor de M_w , a viscosidade da resina que possuir maior valor de a vai começar a diminuir em taxas de cisalhamento mais elevadas do que a viscosidade do material com menor valor do parâmetro mencionado, assim, desenvolverá mais pressão, conduzindo a um maior valor de $P_{saída}$. Em relação ao parâmetro n , considerando-se dois materiais com mesmos valores de massa molar média ponderal, o polímero que possuir maior valor desse parâmetro será menos sensível a mudanças na taxa de cisalhamento, dessa forma, apresentará maior resistência ao escoamento em relação ao material com menor n , desenvolvendo mais pressão na saída da extrusora.

No caso do parâmetro b , considerando-se dois materiais cuja dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento é semelhante, se esses dois materiais forem submetidos a mesma mudança de temperatura, a viscosidade do material com maior valor de b diminuirá mais do que a do material com menor valor desse parâmetro. Dessa forma, o material que possui maior valor de b vai desenvolver menos pressão na saída da extrusora.

De posse dos resultados dos fatores que apresentaram efeitos significativos nos valores de \dot{M} e de $P_{saída}$, pode-se tentar explicar os comportamentos na extrusão das amostras PP – A e PS - A. Os dados experimentais, bem como os resultados preditos pelo Flow 2000, indicaram valores de vazão mássica nos testes com a amostra de PS superiores aos valores com a amostra PP – A. Comportamento contrário ocorreu com os dados de pressão na saída da extrusora, em que se obteve valores de $P_{saída}$ nos testes e nas simulações com a amostra PP – A superiores aos valores obtidos nos testes com a amostra de poliestireno. No caso da vazão mássica, consultando os resultados mostrados na Tabela 4.4-4, os maiores valores de ρ_l e de λ da amostra de PS, em relação à amostra PP – A, justificam os maiores valores de \dot{M} nos testes e nas simulações com esse material. No caso da pressão na saída da extrusora, o menor valor de λ da amostra PP - A bem como a menor temperatura definida na 4ª zona de aquecimento do barril na extrusão da amostra de polipropileno, justificam os maiores valores de $P_{saída}$ nos testes e nas simulações utilizando-se essa resina.

4.5 Reformulação dos Modelos Simplificados e Estimação de seus Parâmetros

No desenvolvimento das equações simplificadas, partiu-se de modelos em que se relacionaram linearmente todos os 20 fatores considerados no planejamento de experimentos. Atribuiu-se a esses modelos a terminologia *MSZ*, i.e., Modelos Simplificados Zero, pois as outras equações simplificadas propostas são resultados de modificações das equações *MSZ*. Em todos os modelos estudados, ajustaram-se os valores de seus parâmetros aos resultados de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelo Flow 2000 (Tabela 4.4-2) utilizando-se o método de Gauss-Newton em regressões multivariáveis por mínimos quadrados.

O modelo simplificado para o cálculo da vazão mássica contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos (\dot{M}_{MSZ}) é o seguinte:

$$\begin{aligned} \dot{M}_{MSZ} = & -8,06.10^1 - 1,66.10^{-4} \eta_0 - 1,51.10^1 n - 7,22.10^0 a + \\ & + 6,80.10^0 \lambda + 1,86.10^1 b + 2,70.10^{-2} \rho_1 + 9,56.10^{-5} Cp_l + \\ & + 1,80.10^1 k_1 + 7,28.10^{-2} T_p + 3,08.10^{-3} \rho_s + 2,00.10^{-4} Cp_s + \\ & - 3,16.10^0 k_s - 1,93.10^{-6} \Delta H_f + 3,43.10^{-3} \rho_a + 8,21.10^1 f_b + \\ & + 2,74.10^{-1} N - 5,66.10^{-2} T_1 - 2,55.10^{-2} T_2 + 3,17.10^{-2} T_3 + 5,04.10^{-2} T_4 \end{aligned} \quad (4.5-1)$$

A Figura 4.5-1 mostra uma comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 ($Vazão_F$) e pelo modelo simplificado contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos ($Vazão_{MSZ}$).

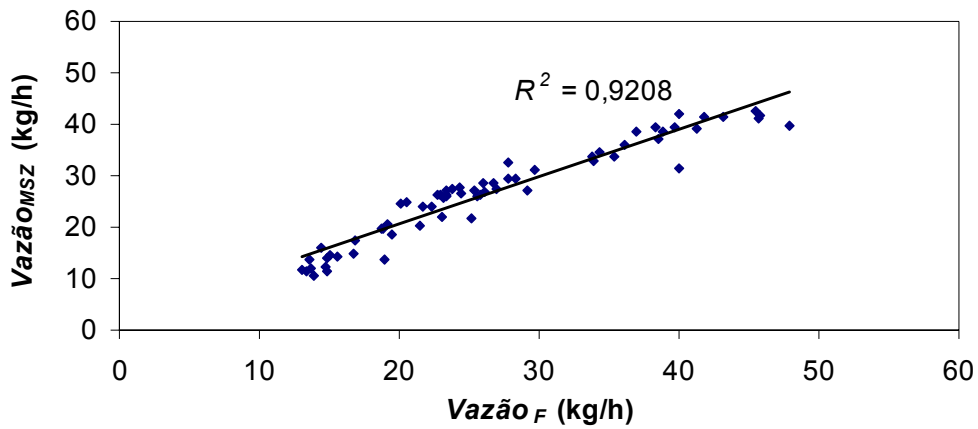


Figura 4.5-1: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos.

Como se pode ver na Figura 4.5-1, obteve-se pouca concordância entre os valores de \dot{M} preditos pelo modelo simplificado MSZ e pelo Flow 2000 ($R^2 = 0,9208$).

A Equação 4.5-2, a seguir, apresenta o modelo simplificado para o cálculo da pressão na saída da extrusora contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos ($P_{saídaMSZ}$).

$$\begin{aligned}
 P_{saídaMSZ} = & 7,85 \cdot 10^0 + 2,67 \cdot 10^{-4} \eta_0 + 2,10 \cdot 10^1 n + 1,19 \cdot 10^1 a + \\
 & -1,03 \cdot 10^1 \lambda - 5,03 \cdot 10^1 b + 8,82 \cdot 10^{-4} \rho_1 + 3,92 \cdot 10^{-4} Cp_l + \\
 & + 9,95 \cdot 10^0 k_1 - 2,55 \cdot 10^{-3} T_p + 2,84 \cdot 10^{-4} \rho_s - 1,94 \cdot 10^{-4} Cp_s + \\
 & -1,18 \cdot 10^0 k_s + 1,71 \cdot 10^{-6} \Delta H_f + 3,48 \cdot 10^{-4} \rho_a + 1,60 \cdot 10^1 f_b + \\
 & + 3,48 \cdot 10^{-4} N - 5,47 \cdot 10^{-3} T_1 + 2,44 \cdot 10^{-3} T_2 - 8,64 \cdot 10^{-3} T_3 - 8,92 \cdot 10^{-2} T_4
 \end{aligned} \tag{4.5-2}$$

A Figura 4.5-2 mostra uma comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 ($P_{saídaF}$) e pelo modelo simplificado contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos ($P_{saídaMSZ}$).

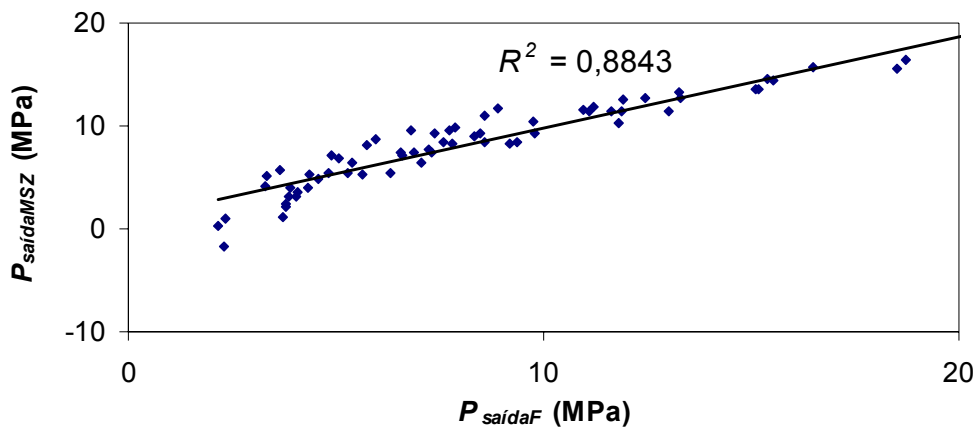


Figura 4.5-2: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado contendo todos os fatores considerados no planejamento de experimentos.

Com base nos resultados apresentados na Figura 4.5-2, observa-se que, além de conduzir a pouca concordância em relação aos valores de P_{saida} preditos pelo Flow 2000 ($R^2 = 0,8843$), o modelo *MSZ* calculou um valor negativo para a pressão na saída da extrusora.

Como forma de tentar aprimorar os modelos *MSZ*, construíam-se equações relacionando-se linearmente apenas os fatores cujos efeitos foram considerados significativos nos resultados de \dot{M} (Tabela 4.4-6) e de P_{saida} (Tabela 4.4-7) de acordo com a análise de variância (ANOVA). Atribuiu-se a esses modelos a terminologia *MSSI*, i.e., Modelos Simplificados Sem Interação. O modelo simplificado para o cálculo da vazão mássica que não contempla os efeitos de interação entre os fatores (\dot{M}_{MSSI}) é o seguinte:

$$\begin{aligned} \dot{M}_{MSSI} = & -7,37 \cdot 10^1 + 2,74 \cdot 10^{-1} N + 2,70 \cdot 10^{-2} \rho_1 + 6,80 \cdot 10^0 \lambda + \\ & + 7,28 \cdot 10^{-2} T_p - 5,67 \cdot 10^{-2} T_1 + 5,04 \cdot 10^{-2} T_4 + 8,20 \cdot 10^1 f_b + \\ & - 1,66 \cdot 10^{-4} \eta_0 - 7,22 \cdot 10^0 a \end{aligned} \quad (4.5-3)$$

A Figura 4.5-3 mostra uma comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 ($Vazão_F$) e pelo modelo simplificado que não contempla os efeitos de interação entre os fatores ($Vazão_{MSSI}$).

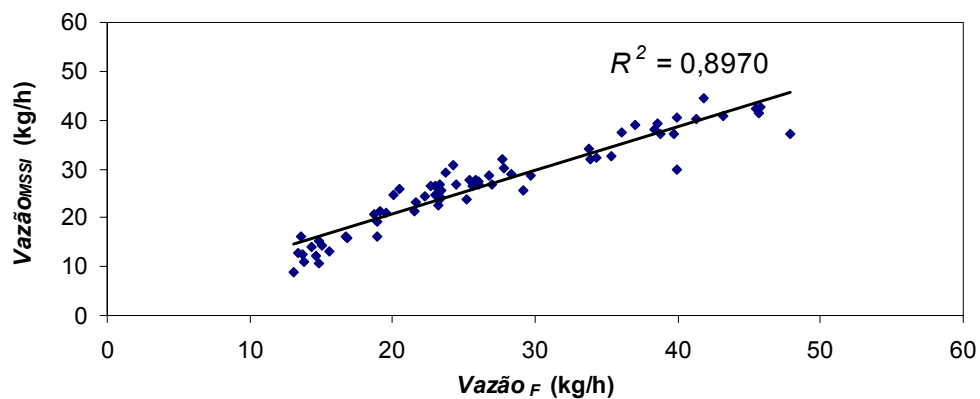


Figura 4.5-3: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que não contempla os efeitos de interação entre os fatores.

Com base na Figura 4.5-3, observa-se que a aplicação do modelo *MSSI* resultou em uma concordância menor em relação aos resultados de \dot{M} preditos pelo simulador comercial quando comparado à aplicação do modelo *MSZ* ($R^2 = 0,8970$ com *MSSI* versus $0,9208$ com *MSZ*).

A Equação 4.5-4, a seguir, apresenta o modelo simplificado para o cálculo da pressão na saída da extrusora que não contempla os efeitos de interação entre os fatores ($P_{saídaMSSI}$).

$$P_{saídaMSSI} = 1,74 \cdot 10^1 - 1,03 \cdot 10^1 \lambda - 8,92 \cdot 10^{-2} T_4 + 2,67 \cdot 10^{-4} \eta_0 + 1,19 \cdot 10^1 a + 2,10 \cdot 10^1 n - 5,03 \cdot 10^1 b \quad (4.5-4)$$

A Figura 4.5-4 mostra uma comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 ($P_{saídaF}$) e pelo modelo simplificado que não considera os efeitos de interação entre os fatores ($P_{saídaMSSI}$).

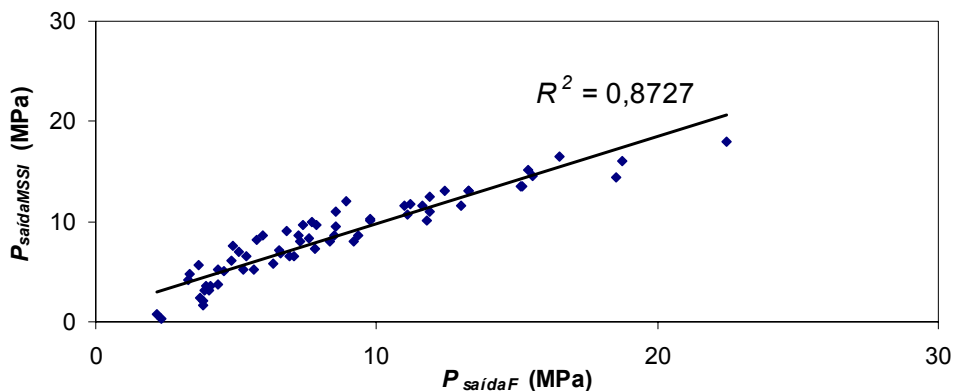


Figura 4.5-4: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que não contempla os efeitos de interação entre os fatores.

Da mesma forma que ocorreu para a vazão, a Figura 4.5-4 indica que a aplicação do modelo *MSSI* para o cálculo da pressão na saída da extrusora conduziu a uma concordância menor em relação aos resultados preditos pelo Flow 2000 quando comparado à aplicação do modelo *MSZ* ($R^2 = 0,8727$ com *MSSI* versus $0,8843$ com *MSZ*). No entanto, a aplicação do modelo *MSSI* não conduziu a valor negativo algum para $P_{saída}$ como no caso da aplicação do modelo *MSZ*.

Apesar de os modelos *MSSI* apresentarem um menor número de termos do que os modelos *MSZ*, tornando-os mais práticos para serem aplicados, observa-se que ambos conduzem a baixa concordância em relação os valores de vazão mássica e de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000. Com base nisso, procedeu-se a uma outra tentativa visando melhorar o poder preditivo dessas equações semi-empíricas. Nessa outra abordagem, em vez de considerar que cada fator cujo efeito foi considerado significativo segundo a ANOVA afeta separadamente as variáveis de resposta, utilizaram-se os parâmetros reológicos em 4 termos diferentes de viscosidades na forma dos modelos de Carreau-Yasuda e de Andrade-Eyring modificado. Cada termo desses levou em conta a temperatura em uma das 4 zonas de aquecimento do barril. Além disso, adaptou-se a funcionalidade desses termos de viscosidade de acordo com as variáveis de resposta, ou seja, considerou-se que a vazão mássica é proporcional ao inverso da viscosidade, e a pressão na saída da extrusora é diretamente proporcional à viscosidade. Além disso, como o planejamento de experimentos utilizado não forneceu nenhuma informação sobre as interações entre os fatores, resolveu-se avaliar interações entre os

termos principais do modelo. Atribuiu-se a esses modelos a terminologia *MSCI*, i.e., Modelos Simplificados Com Interação. O modelo simplificado para o cálculo da vazão mássica que contempla os efeitos de interação de segunda ordem entre os fatores é o seguinte:

$$\begin{aligned}
 \dot{M}_{MSSI} = & -2,36.10^2 + 9,76.10^{-2} \rho_1 - 7,19.10^{-1} N + 9,57.10^{-1} T_p + \\
 & + 4,51.10^2 f_b - 4,69.10^4 \eta(T_1)^{-1} + 1,34.10^4 \eta(T_2)^{-1} + \\
 & + 7,19.10^4 \eta(T_3)^{-1} - 3,66.10^4 \eta(T_4)^{-1} + 3,77.10^{-4} \rho_1 N + \\
 & + 1,10.10^{-4} \rho_1 T_p - 2,23.10^{-4} \rho_1 f_b - 8,56.10^{-1} \rho_1 \eta(T_1)^{-1} + \\
 & - 2,08.10^1 \rho_1 \eta(T_2)^{-1} - 2,24.10^0 \rho_1 \eta(T_3)^{-1} + 2,75.10^1 \rho_1 \eta(T_4)^{-1} + \\
 & - 9,65.10^{-5} N T_p + 1,15.10^0 N f_b + 9,54.10^{-1} N \eta(T_1)^{-1} + \\
 & - 2,18.10^2 N \eta(T_2)^{-1} + 5,05.10^1 N \eta(T_3)^{-1} + 1,60.10^2 N \eta(T_4)^{-1} + \\
 & - 1,80.10^0 T_p f_b - 4,09.10^1 T_p \eta(T_1)^{-1} - 2,29.10^1 T_p \eta(T_2)^{-1} + \\
 & + 3,26.10^1 T_p \eta(T_3)^{-1} + 5,33.10^1 T_p \eta(T_4)^{-1} + 8,94.10^4 f_b \eta(T_1)^{-1} + \\
 & + 4,80.10^4 f_b \eta(T_2)^{-1} - 1,36.10^5 f_b \eta(T_3)^{-1} - 9,13.10^3 f_b \eta(T_4)^{-1} + \\
 & + 2,33.10^6 \eta(T_1)^{-1} \eta(T_2)^{-1} - 4,69.10^4 \eta(T_1)^{-1} \eta(T_3)^{-1} + \\
 & - 1,01.10^6 \eta(T_1)^{-1} \eta(T_4)^{-1} - 7,75.10^5 \eta(T_2)^{-1} \eta(T_3)^{-1} + \\
 & - 1,09.10^6 \eta(T_2)^{-1} \eta(T_4)^{-1} + 5,39.10^5 \eta(T_3)^{-1} \eta(T_4)^{-1}
 \end{aligned} \tag{4.5-5}$$

Os termos das viscosidades são dados pela Equação 4.5-6 a seguir:

$$\eta(T_i) = \frac{\eta_0 \left(\exp(-b(T_i - T_{ref})) \right)}{\left[1 + (\lambda \dot{\gamma} \left(\exp(-b(T_i - T_{ref})) \right))^a \right]^{\left(\frac{1-n}{a} \right)}}, \quad i = 1, 2, 3 \text{ e } 4 \tag{4.5-6}$$

em que o termo da taxa de cisalhamento é dado por (Morton-Jones, 1989):

$$\dot{\gamma} = \frac{\pi D N}{H} \tag{4.5-7}$$

em que D é o diâmetro da extrusora, N é a velocidade de rotação do parafuso e H é a altura do canal da seção de dosagem do parafuso.

Utilizou-se a mesma altura H na descrição da taxa de cisalhamento em todas as zonas de aquecimento em uma tentativa de minimizar o erro em considerar as alturas

das seções de alimentação e da primeira e segunda seção de compressão. Nessas seções, existe uma coexistência entre sólido e líquido. Assim, caso se utilizasse os valores de H correspondente às zonas de aquecimento, estar-se-ia considerando que o líquido preenche toda a altura do canal.

A Figura 4.5-5 apresenta uma comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 ($Vazão_F$) e pelo modelo simplificado que contempla os efeitos de interação de segunda ordem entre os fatores ($Vazão_{MSCI}$).

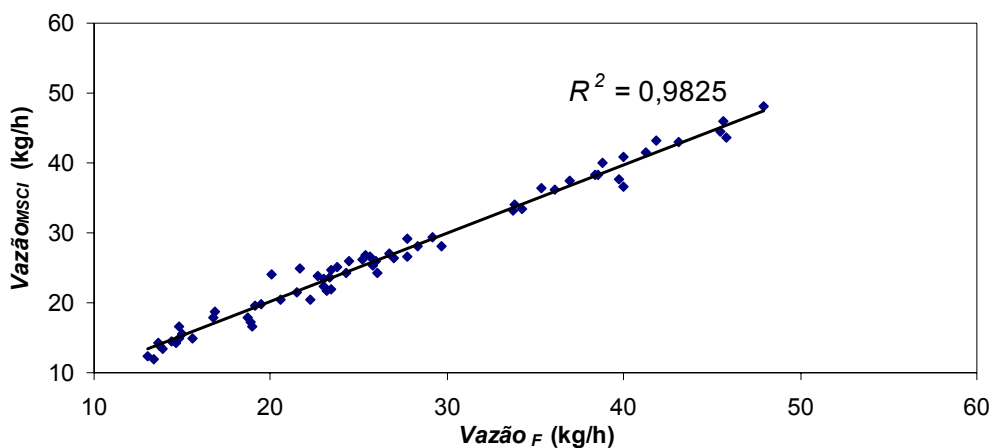


Figura 4.5-5: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que contempla os efeitos de interação de segunda ordem entre os fatores.

Como se pode ver na Figura 4.5-5, o modelo simplificado consegue reproduzir os valores de vazão mássicas preditos pelo simulador comercial com boa precisão. Com esse modelo, obteve-se um valor de coeficiente de correlação linear (R^2) de 0,9825.

Para construir-se o modelo simplificado para o cálculo da pressão na saída da extrusora, além de considerarem-se os efeitos significativos segundo a análise de variância, também se consideraram outros fatores, cujas interações talvez fossem importantes. Além dos termos das viscosidades, também se levaram em conta os efeitos da massa específica aparente, da massa específica do material no estado líquido e o fator de atrito polímero-barril. Consideraram-se também as interações de segunda ordem entre os fatores e, no caso dos termos das viscosidades, consideraram-se também as interações de terceira ordem. A expressão para o cálculo da pressão na saída da extrusora, segundo essa abordagem, é a seguinte:

$$\begin{aligned}
 P_{saída\ MSCI} = & 6,06.10^1 - 6,98.10^{-3} \rho_1 - 6,59.10^{-2} \rho_a - 1,09.10^2 f_b + \\
 & -1,80.10^{-1} N - 4,71.10^{-2} \eta(T_1) + 3,83.10^{-2} \eta(T_2) - 1,23.10^{-2} \eta(T_3) + \\
 & + 2,51.10^{-2} \eta(T_4) + 7,08.10^{-6} \rho_1 \rho_a - 2,90.10^{-3} \rho_1 f_b + 6,15.10^{-5} \rho_1 N + \\
 & + 7,39.10^{-7} \rho_1 \eta(T_1) + 1,02.10^{-5} \rho_1 \eta(T_2) + 3,01.10^{-6} \rho_1 \eta(T_3) + \\
 & -1,47.10^{-5} \rho_1 \eta(T_4) + 1,21.10^{-1} \rho_a f_b - 8,22.10^{-5} \rho_a N + \\
 & -9,79.10^{-6} \rho_a \eta(T_1) - 7,31.10^{-6} \rho_a \eta(T_2) + 3,49.10^{-6} \rho_a \eta(T_3) + \\
 & + 9,90.10^{-6} \rho_a \eta(T_4) + 3,74.10^{-1} f_b N + 9,55.10^{-2} f_b \eta(T_1) + \\
 & -9,88.10^{-2} f_b \eta(T_2) + 1,82.10^{-2} f_b \eta(T_3) + 4,94.10^{-3} f_b \eta(T_4) + \\
 & -4,26.10^{-6} N \eta(T_1) + 1,52.10^{-4} N \eta(T_2) - 3,94.10^{-5} N \eta(T_3) + \\
 & -8,68.10^{-5} N \eta(T_4) + 2,57.10^{-7} \eta(T_1) \eta(T_2) - 4,58.10^{-7} \eta(T_1) \eta(T_3) + \\
 & + 3,24.10^{-6} \eta(T_1) \eta(T_4) + 5,09.10^{-6} \eta(T_2) \eta(T_3) - 6,74.10^{-6} \eta(T_2) \eta(T_4) + \\
 & -1,46.10^{-6} \eta(T_3) \eta(T_4) - 2,14.10^{-9} \eta(T_1) \eta(T_2) \eta(T_3) + 2,05.10^{-10} \eta(T_2) \eta(T_3) \eta(T_4) + \\
 & + 3,88.10^{-9} \eta(T_1) \eta(T_2) \eta(T_4) + 1,37.10^{-10} \eta(T_1) \eta(T_3) \eta(T_4)
 \end{aligned}
 \tag{4.5-8}$$

A Figura 4.5-6, a seguir, apresenta uma comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 ($P_{saídaF}$) e pelo modelo simplificado que contempla os efeitos de interação entre os fatores ($P_{saídaMSCI}$).

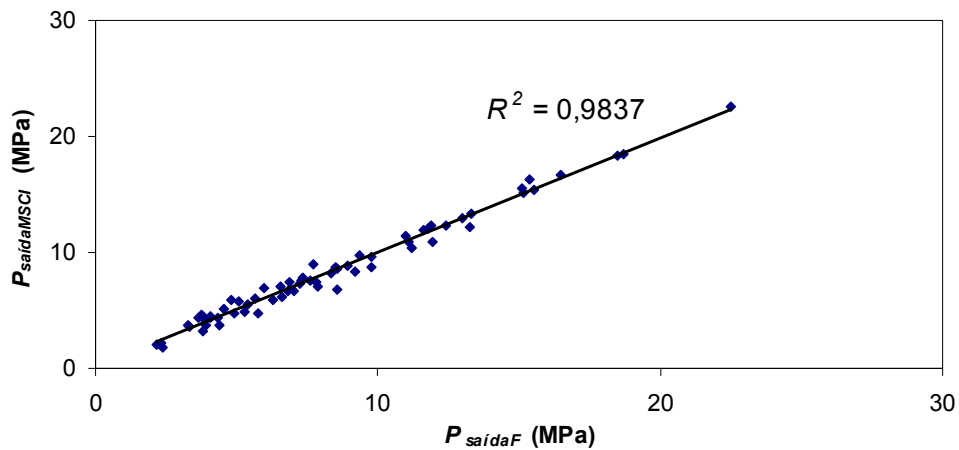


Figura 4.5-6: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado que contempla os efeitos de interação entre os fatores.

Conforme se pode observar na Figura 4.5-6, os valores de pressão na saída da extrusora preditos pelo modelo simplificado estão em boa concordância com o valores preditos pelo Flow 2000. Com esse modelo, obteve-se um valor de coeficiente de correlação, em relação aos valores preditos pelo Flow 2000, de 0,9837.

No entanto, pode-se perceber que ambos modelos simplificados que contemplam os efeitos de interação entre os fatores apresentam muitos termos. Como se pode ver, o modelo *MSCI* para o cálculo da vazão mássica possui 36 termos, e o modelo *MSCI* para o cálculo da pressão na saída da extrusora possui 41 termos. Em função disso, utilizou-se o procedimento *SROV* (Shacham e Brauner, 2003; Finkler, 2003) para selecionar-se apenas os termos importantes nas expressões para o cálculo de \dot{M} e de $P_{saída}$. Atribuiu-se a esses modelos a terminologia *MSCIR*, i.e., Modelos Simplificados Com Interação Reduzidos.

De acordo com os resultados do procedimento *SROV*, das 36 variáveis explicativas presentes no modelo simplificado para o cálculo da vazão mássica, apenas 10 eram importantes. A Figura 4.5-7, a seguir, apresenta uma relação entre o número de parâmetros do modelo para o cálculo da vazão mássica e o coeficiente de correlação linear (R^2) resultante.

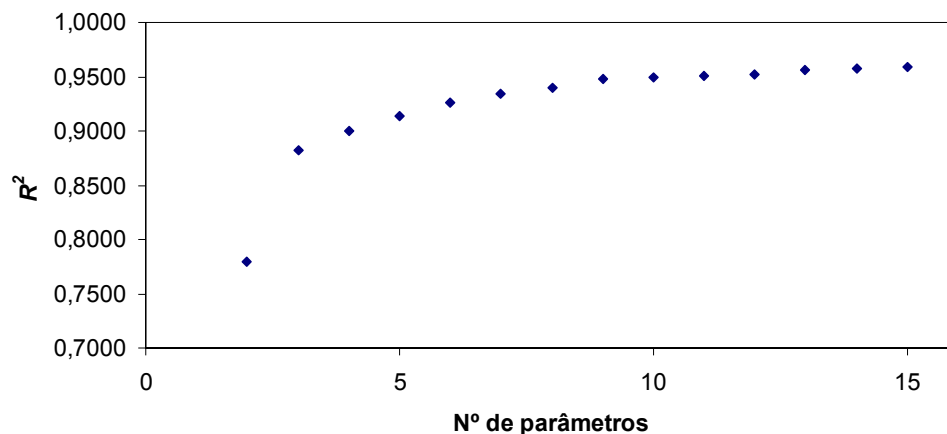


Figura 4.5-7: Relação entre o número de parâmetros do modelo para o cálculo da vazão mássica e o coeficiente de correlação linear (R^2) resultante.

A Figura 4.5-7 indica que o ganho no poder preditivo do modelo *MSCI* para o cálculo da vazão mássica a partir de 10 termos é muito pequeno. O modelo *MSCIR* para o cálculo da vazão mássica segundo o procedimento *SROV* é o seguinte.

$$\begin{aligned} \dot{M}_{MSCIR} = & 5,44.10^0 - 1,25.10^1 f_b + 3,06.10^{-4} \rho_1 N - 2,72.10^4 \eta(T_1)^{-1} + \\ & + 4,65.10^4 f_b \eta(T_1)^{-1} + 5,26.10^0 N \eta(T_2)^{-1} + 8,77.10^{-1} \rho_1 \eta(T_3)^{-1} + \\ & - 2,43.10^1 N \eta(T_4)^{-1} + 3,32.10^1 T_p \eta(T_4)^{-1} - 3,65.10^5 \eta(T_2)^{-1} \eta(T_4)^{-1} \end{aligned} \quad (4.5-9)$$

Ao se analisar a Equação 4.5-9, não se entende o motivo pelo qual o coeficiente do termo referente ao fator de atrito polímero-barril apresenta um sinal negativo. Isso sugere que, quanto maior for o fator de atrito, menor a vazão mássica. Isso não representa a realidade, pois, quanto maior a aderência entre o material e o barril, maior facilidade para o polímero ser transportado. Além disso, o sinal negativo do termo $\eta(T_1)^{-1}$ também não é coerente. Segundo esse modelo, quanto menor for a viscosidade do material, menor é o valor da vazão mássica. Apesar disso, as interações selecionadas estão de acordo com o esperado, pois as mesmas relacionam fatores presentes nas equações clássicas de transporte do material, tais como o fator de atrito, a velocidade de rotação, a massa específica e a viscosidade.

A Figura 4.5-8 apresenta uma comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 ($Vazão_F$) e pelo modelo simplificado reduzido ($Vazão_{MSCIR}$).

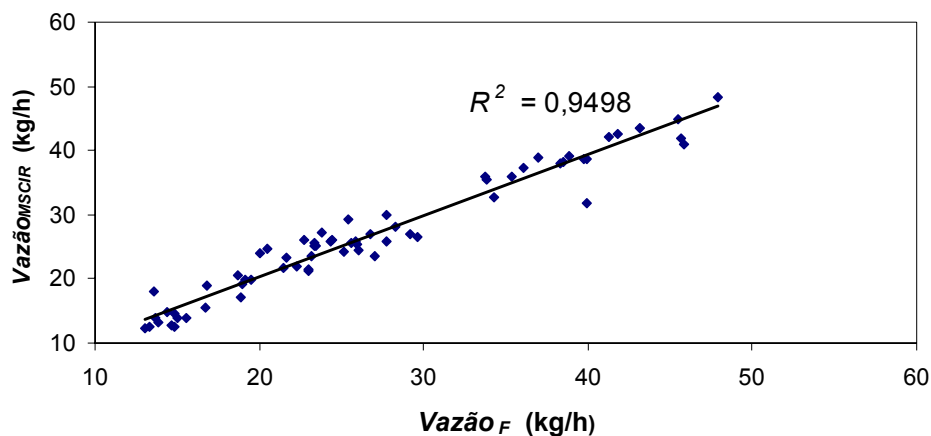


Figura 4.5-8: Comparação entre os resultados de vazão mássica preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado reduzido.

A comparação apresentada na Figura 4.5-8 indica que o modelo simplificado reduzido consegue reproduzir de forma razoável os valores preditos pelo simulador comercial. No entanto, como já se esperava, por apresentar 27 parâmetros a menos do que o modelo original, a variância entre os resultados preditos aumentou, conforme se pode inferir pelo valor de R^2 ($\sim 0,98$ contra $\sim 0,95$).

Segundo os resultados do procedimento SROV, das 41 variáveis explicativas presentes no modelo simplificado para o cálculo de $P_{saída}$, apenas 6 eram importantes. A Figura 4.5-9 apresenta uma relação entre o número de parâmetros do modelo para o

cálculo da pressão na saída da extrusora e o coeficiente de correlação linear (R^2) resultante.

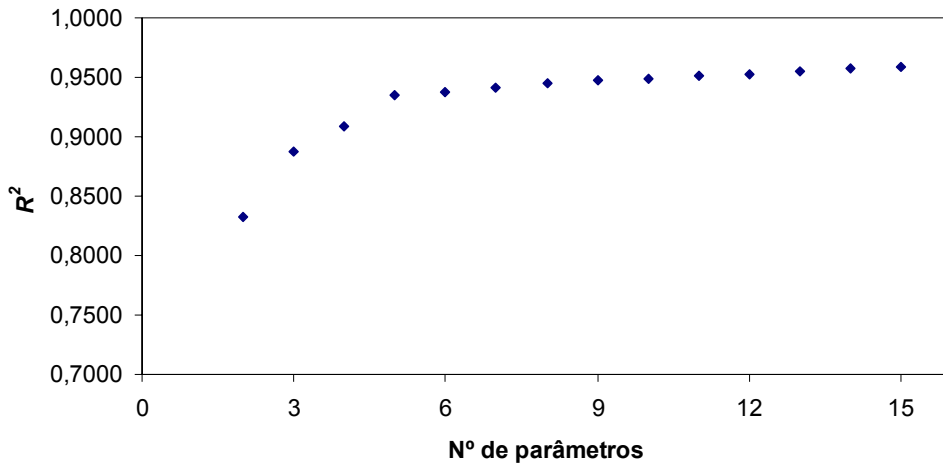


Figura 4.5-9: Relação entre o número de parâmetros do modelo para o cálculo da pressão na saída da extrusora e o coeficiente de correlação linear (R^2) resultante.

De acordo com os resultados mostrados na Figura 4.5-9, ganha-se pouco no poder preditivo do modelo *MSCI* para o cálculo de $P_{saída}$ a partir de 6 termos. O modelo *MSCIR* para o cálculo da pressão na saída da extrusora de acordo com o procedimento *SROV* é o seguinte.

$$P_{saída\ MSCIR} = -3,17.10^0 + 1,77.10^{-3} \eta(T_2) + 8,16.10^{-3} \eta(T_4) + 8,98.10^{-2} f_b N - 2,33.10^{-4} f_b \eta(T_4) - 1,54.10^{-6} \eta(T_2)\eta(T_4) \quad (4.5-10)$$

Ao se avaliar a Equação 4.5-10, observa-se que foi uma boa escolha adicionar o fator de atrito polímero-barril nas análises. Apesar de o fator de atrito f_b não ter apresentado efeito significativo nas análises de variância, duas interações contendo essa variável foram selecionadas pelo procedimento *SROV*. A Figura 4.5-10 apresenta uma comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo *Flow 2000* ($P_{saídaF}$) e pelo modelo simplificado reduzido ($P_{saídaMSR}$).

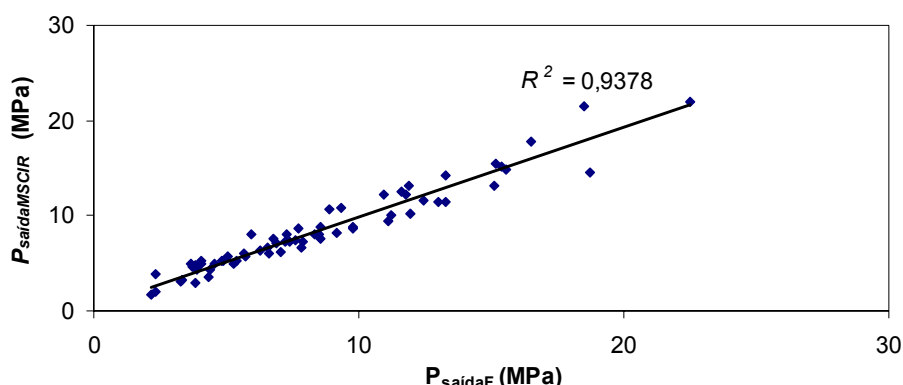


Figura 4.5-10: Comparação entre os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo Flow 2000 e pelo modelo simplificado reduzido.

Como se pode ver na Figura 4.5-10, mesmo com poucos parâmetros, o modelo simplificado reduzido consegue prever, com boa precisão, os resultados de pressão na saída da extrusora preditos pelo simulador comercial. A redução de 41 para 6 termos do modelo para o cálculo de $P_{saída}$ resultou em um aumento da variância entre os resultados preditos. Isso se pode observar comparando-se os valores do coeficiente de correlação (R^2). O modelo com 41 parâmetros conduz a um R^2 na ordem de 0,98, enquanto que o modelo com 6 parâmetros resulta em um coeficiente de correlação na ordem de 0,94.

Com base nos resultados apresentados anteriormente, observou-se que o poder preditivo dos modelos *MSCI* e *MSCIR* é superior ao dos modelos *MSZ* e *MSSI*. Então, para verificar-se a qualidade dos modelos simplificados *MSCI* e *MSCIR* propostos, compararam-se os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ calculados através dessas equações com os resultados obtidos experimentalmente para as amostras PP - A e PS - A. Posteriormente, realizaram-se novos experimentos na extrusora, utilizando-se as amostras PS - A e PP - B com base em predições dos modelos simplificados para validá-los. Apresentam-se essas etapas na próxima seção deste capítulo.

4.6 Verificação e Validação dos Modelos Propostos

Nesta seção, apresenta-se a última etapa deste trabalho, que consistiu na verificação e na validação dos modelos propostos. As Tabelas 4.6-1e 4.6-2 apresentam

comparações entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados *MSCI* e *MSCIR*, respectivamente, com os dados experimentais para a amostra PP – A.

Tabela 4.6-1: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados *MSCI* com os dados experimentais para a amostra PP - A.

N (rpm)	\dot{M}_{MSCI} (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaMSCI}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	20,9	19,5	-7,0	5,9	6,4	7,4
80	23,2	21,6	-7,7	6,0	6,8	10,7
90	25,6	23,6	-8,2	6,2	7,0	11,9
100	27,8	25,9	-7,7	6,3	7,3	13,2

Tabela 4.6-2: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados *MSCIR* com os dados experimentais para a amostra PP - A.

N (rpm)	\dot{M}_{MSCIR} (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaMSCIR}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	21,0	19,5	-7,4	6,0	6,4	6,7
80	23,5	21,6	-8,7	6,1	6,8	9,6
90	25,9	23,6	-9,5	6,3	7,0	10,0
100	28,2	25,9	-9,1	6,5	7,3	10,5

Ao se comparar os resultados mostrados nas Tabelas 4.6-1 e 4.6-2, observa-se que os modelos *MSCIR* conduzem a uma concordância menor entre os valores preditos e experimentais de \dot{M} obtidos na extrusão da amostra PP – A e a uma concordância maior nas análises de $P_{saída}$ em relação aos modelos *MSCI*. Tanto com o modelo *MSCI* quanto com o modelo *MSCIR*, obtiveram-se diferenças percentuais menores do que 10% em relação aos valores de \dot{M} obtidos experimentalmente. Ao se comparar os resultados dos modelos *MSCI* e *MSCIR* com os resultados das predições do simulador comercial (Tabela 4.3-5), nota-se que as diferenças percentuais também se encontram nessa faixa de variação. Em relação à pressão na saída da extrusora, as diferenças percentuais entre os valores preditos pelos modelos *MSCI* e *MSCIR* e os experimentais também estão na faixa dos 10%, no entanto, com o simulador comercial, observaram-se diferenças inferiores a 5%. Não se observa uma tendência nos desvios no caso das predições de ambos modelos para a vazão mássica. Entretanto, nota-se uma tendência nos desvios no

caso dos resultados da pressão na saída da extrusora, indicando um erro sistemático nos valores preditos.

As Tabelas 4.6-3 e 4.6-4, a seguir, apresentam comparações entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados *MSCI* e *MSCIR*, respectivamente, com os dados experimentais para a amostra PS - A.

Tabela 4.6-3: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados *MSCI* com os dados experimentais para a amostra PS - A.

N (rpm)	\dot{M}_{MSCI} (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaMSCI}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	24,5	21,8	-12,5	6,3	5,8	-8,1
80	27,9	24,8	-12,6	6,5	5,9	-10,0
90	31,1	27,5	-13,2	6,7	6,1	-8,9
100	33,9	31,2	-8,6	6,9	6,4	-9,1

Tabela 4.6-4: Comparação entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos simplificados *MSCIR* com os dados experimentais para a amostra PS - A.

N (rpm)	\dot{M}_{MSCIR} (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaMSCIR}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
70	24,4	21,8	-12,0	6,3	5,8	-9,0
80	27,5	24,8	-10,9	6,4	5,9	-8,7
90	30,5	27,5	-10,7	6,5	6,1	-6,2
100	33,3	31,2	-6,6	6,8	6,4	-6,4

Os resultados mostrados nas Tabelas 4.6-3 e 4.6-4 revelam que os modelos *MSCIR* conduzem a uma concordância maior entre os valores preditos e experimentais de \dot{M} e de $P_{saída}$ obtidos na extrusão da amostra PS - A em relação aos modelos *MSCI*. Da mesma forma que se observou no caso da amostra de polipropileno, obtiveram-se diferenças percentuais em relação aos valores de \dot{M} preditos pelos modelos e obtidos experimentalmente na faixa dos 10% para a amostra de poliestireno. Com o Flow 2000 (Tabela 4.3-6), obtiveram-se desvios inferiores a 5%. Em se tratando de $P_{saída}$, os desvios percentuais entre os valores preditos pelos modelos *MSCI* e *MSCIR* e os obtidos experimentalmente são na ordem dos 10%, da mesma forma que se obteve com o

simulador comercial. Análogo às predições da extrusão da amostra PP - A, não se observou tendências nos valores dos desvios percentuais nas predições de \dot{M} , mas houve tendência nos valores dos desvios nas predições de $P_{saída}$ na extrusão da amostra de PS.

De maneira geral, obteve-se boa concordância entre os valores de \dot{M} e de $P_{saída}$ preditos pelos modelos *MSCI* e *MSCIR* e os valores experimentais obtidos na extrusão da amostra PP – A e PS – A. No entanto, como a idéia deste trabalho é desenvolver modelos de simples aplicação, conclui-se que apenas os modelos *MSCIR* apresentam essa característica.

Com o objetivo de simular uma aplicação real para os modelos simplificados reduzidos, utilizaram-se as equações desenvolvidas para calcular condições de operação na extrusora de acordo com um desempenho desejado do equipamento. Para esse novo conjunto de testes, utilizou-se a mesma amostra de poliestireno (PS - A) e outra amostra de polipropileno (PP - B).

Na Tabela 4.6-5, a seguir, apresentam-se as condições de testes que se realizou na extrusora com base nas predições do modelo simplificados reduzido para o cálculo da vazão mássica .

Tabela 4.6-5: Condições de testes na extrusora com base nas predições do modelo *MSCIR* para o cálculo da vazão mássica.

Testes	Material	N (rpm)	T ₁ (°C)	T ₂ (°C)	T ₃ (°C)	T ₄ (°C)	T _{matriz} (°C)
1	PP - B	70	200	200	200	200	200
2	PP - B	87	200	200	200	200	200
3	PP - B	70	180	190	200	200	200
4	PS - A	70	200	200	200	200	200
5	PS - A	87	200	200	200	200	200
6	PS - A	70	180	190	200	200	200

No teste 1, elaborou-se uma condição de operação da extrusora, utilizando-se a amostra PP - B, que já se avaliou com a amostra PP - A. A idéia é que, com esse teste, consiga-se avaliar a sensibilidade dos modelos a mudanças na reologia do material. No teste 2, considerou-se uma condição de operação do equipamento que, segundo o

modelo simplificado para a predição de \dot{M} , conduziria a um aumento de 20% nos valores de vazão mássica obtidas nas condições do teste 1. No teste 3, considerou-se uma condição de operação da extrusora que, de acordo com o modelo para o cálculo da vazão mássica, obtém-se um aumento no valor de \dot{M} , diminuindo-se os valores de temperaturas nas duas primeiras zonas de aquecimento da extrusora. Nos testes 4, 5 e 6, trabalhou-se com as mesmas condições dos testes 1, 2 e 3, respectivamente, no entanto, utilizou-se a amostra PS - A.

A Tabela 4.6-6 apresenta uma comparação entre os valores preditos pelos modelos simplificados reduzidos e os dados experimentais de \dot{M} e de $P_{saída}$ obtidos no segundo conjunto de testes na extrusora.

Tabela 4.6-6: Comparação entre os valores preditos pelos modelos *MSCIR* e os dados experimentais de \dot{M} e de $P_{saída}$ obtidos no segundo conjunto de testes na extrusora.

Condição	\dot{M}_{MSCIR} (kg/h)	\dot{M}_E (kg/h)	$\Delta\dot{M}$ (%)	$P_{saídaMSCIR}$ (MPa)	$P_{saídaE}$ (MPa)	$\Delta P_{saída}$ (%)
Teste 1 (PP - A)	20,6	19,5	-5,4	6,5	6,4	-1,7
Teste 1 (PP - B)	20,7	18,8	-10,0	6,4	3,4	-87,3
Teste 2 (PP - B)	24,8	23,6	-5,1	6,6	3,8	-75,9
Teste 3 (PP - B)	20,8	19,4	-7,4	6,5	3,4	-91,1
Teste 4 (PS - A)	23,5	26,3	10,8	7,4	3,6	-108,5
Teste 5 (PS - A)	28,7	31,3	8,3	7,4	3,9	-91,6
Teste 6 (PS - A)	23,9	26,7	10,4	7,5	3,8	-99,8

Ao se comparar os valores de pressão na saída da extrusora obtidos no primeiro conjunto de testes (Tabelas 4.1-1 e 4.2-1) com os valores de $P_{saída}$ obtidos no segundo conjunto de experimentos (Tabela 4.6-6), observa-se que os dados nos testes mais recentes são consideravelmente mais baixos. Talvez isso tenha ocorrido devido a problemas de calibração nos sensores de pressão ou devido ao uso de uma tela⁴ (peneira) diferente daquela utilizada no primeiro conjunto de testes. Como os

⁴ É comum utilizar-se peneiras (chamadas de conjunto troca-telas) antes da matriz para manipular o nível de pressão na saída da extrusora, alinhar o fluxo de material e evitar que impurezas permaneçam no produto final.

experimentos não aconteceram em condições de operação equivalentes, a validação dos modelos ficou comprometida. Mesmo assim, observa-se que os valores de vazão mássica mostrados nas Tabelas 4.1-1 e 4.2-1 são semelhantes aos valores de \dot{M} apresentados na Tabela 4.6-6. Além disso, de acordo com essas tabelas, nota-se que as diferenças entre os valores preditos de vazão mássica e os dados obtidos experimentalmente mantiveram-se na mesma faixa de variação daquelas obtidas nas análises do primeiro conjunto de testes. Observa-se uma pequena diferença ao se comparar o valor de \dot{M}_{MSCIR} referente à simulação da extrusão da amostra PP - A na velocidade de rotação de 70 rpm (Tabela 4.6-2) com o resultado do Teste 1 (Tabela 4.6-6). Talvez essa diferença (21,0 kg/h *versus* 20,6 kg/h) deva-se também ao fato de ter-se definido perfis de temperatura diferentes nas simulações. Obteve-se o valor de 21,0 kg/h utilizando-se os valores de $T_{interna}$ (medido na extrusora) na definição do perfil de temperatura nas simulações. Por outro lado, obteve-se o valor de 20,6 kg/h utilizando-se os valores de $T_{definido}$ (programado na extrusora) na definição do perfil de temperatura nas simulações. Então, comparando-se os valores de \dot{M}_{MSCIR} e de \dot{M}_E associados aos testes 1 e 2 (Tabela 4.6-6), pode-se sugerir que os modelos são mais sensíveis a mudanças na definição dos perfis de temperaturas nas zonas de aquecimento do barril da extrusora do que a mudanças na reologia dos materiais.

Cabe salientar que a discrepância existente entre os dados experimentais e os valores obtidos pelos modelos *MSCIR* é inevitável, visto que os resultados calculados utilizando-se as equações semi-empíricas possuem tanto desvios devido a erros de predição do simulador comercial e decorrentes da estrutura do modelo quanto devido a erros na etapa de estimação de parâmetros. No entanto, consideram-se satisfatórias as predições dos modelos simplificados, principalmente, no cálculo da vazão mássica que é de maior interesse prático sem dúvida alguma.

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste trabalho, utilizou-se uma abordagem alternativa para a obtenção de modelos matemáticos para a aplicação no estudo da extrusão de polímeros. Com base em dados experimentais da extrusão de PP e de PS e resultados preditos por um simulador comercial, desenvolveram-se equações semi-empíricas para o cálculo da vazão mássica e da pressão na saída de extrusoras de parafuso simples. Definiram-se as variáveis independentes desses modelos (propriedades dos materiais e condições de operação da extrusora) com base em técnicas de planejamento de experimentos e de regressão multivariável.

Ao se levar em conta a capacidade preditiva das equações desenvolvidas, concluiu-se que os modelos simplificados que contêm interações entre as variáveis independentes (*MSCI* e *MSCIR*) são melhores que os modelos que não contemplam interações (*MSZ* e *MSSI*). Ao se levar em conta também a simplicidade das equações desenvolvidas, os modelos simplificados reduzidos (*MSCIR*) são os melhores.

Comparações com resultados preditos por um simulador comercial e com dados experimentais mostraram que os modelos *MSCIR* desenvolvidos apresentam um bom poder preditivo. Eles apresentam vantagens em relação aos modelos analíticos encontrados na literatura, pois levam em conta variáveis representativas tanto do transporte de sólidos quanto do transporte de fluido, permitindo uma avaliação mais completa do efeito das características dos materiais na extrusão. No entanto, a principal contribuição deste trabalho foi que se desenvolveu uma alternativa mais viável em relação aos pacotes computacionais comerciais em aplicações em que não se necessita de informações minuciosas sobre o processo, i.e, alcançou-se o objetivo pretendido. Em termos de aplicações reais para o modelo \dot{M}_{MSCIR} , podem-se citar as situações em que se deseja prever se haverá perda ou ganho de produtividade de uma extrusora na troca de resinas. Nesses casos, esses modelos são muito úteis, pois apresentam boa precisão. Em termos da importância do desenvolvimento do modelo $P_{saídaMSCIR}$, deve-se perceber

que se utilizam esses valores como um indicativo de desempenho e de operabilidade da extrusora. Por exemplo, caso se observe, que a diferença entre os valores preditos e experimentais estão aumentando ao longo do tempo, isso é um indicativo de desgaste do parafuso. Além disso, caso se deseje testar um material na extrusora, em determinada condição de operação, e as simulações indicarem valores de $P_{saída}$ preditos muito grandes, é melhor que se utilizem temperaturas mais altas nas zonas de aquecimento do equipamento. Então, com base nos resultados das comparações dos valores preditos com os dados experimentais, observa-se que o modelo simplificado para o cálculo da pressão na saída da extrusora se ajusta a essa proposta.

Cabe salientar que a metodologia proposta neste trabalho, em princípio, também poderia ser aplicada para o cálculo de outras variáveis importantes relacionadas à extrusão de polímeros. Pode-se citar o cálculo da temperatura no interior da extrusora bem como o cálculo do comprimento necessário para plastificar o material.

A dificuldade associada ao cálculo da temperatura refere-se ao fato de que é difícil relacionar os valores de temperaturas medidos com os valores preditos através das simulações. Em geral, quando se mede a temperatura do polímero, utilizam-se sensores que se situam próximos à parede interna do barril da extrusora. Nessa região, a temperatura medida do material é muito próxima à temperatura dos elementos aquecedores do barril. No entanto, sabe-se que a dissipação viscosa do polímero pode elevar a temperatura do material, situado no interior dos canais do parafuso, a níveis em torno de 30°C a mais do que as temperaturas definidas nas zonas de aquecimento do barril. Esse efeito da dissipação é contemplado nos cálculos realizados pelos simuladores, sendo que os valores preditos tratam-se de médias que levam em conta tanto as temperaturas nas paredes quanto as no interior dos canais do parafuso. Em função disso, achou-se que não seria apropriado comparar os valores medidos pelos sensores (situados na superfície interna do barril) com os valores preditos pelas simulações (valores médios de todas as regiões do canal).

A dificuldade em desenvolverem-se modelos para o cálculo da distância necessária para plastificar o material, segundo a metodologia proposta nesta dissertação, ocorre devido à dificuldade em medir-se essa variável. Na realidade, deve-se dispor de um equipamento que tenha um mecanismo de fácil extração do parafuso para se acompanhar os locais onde o material começa a plastificar. Então, a dificuldade em

dispor-se de uma extrusora desse tipo não permitiu que essa variável fosse contemplada neste estudo.

Salienta-se que os resultados apresentados neste trabalho valem apenas para o conjunto de materiais/extrusora/matriz utilizado, mas o procedimento desenvolvido é válido para qualquer polímero e para qualquer extrusora de parafuso único.

Como continuação para esse trabalho, pretende-se validar os modelos propostos e validar e melhorar a metodologia proposta. Para validarem-se os modelos, devem-se realizar testes adicionais na extrusora quando se conseguir reproduzir os valores de pressão na saída da extrusora obtidos nos primeiros experimentos. Para validar-se a metodologia, devem-se realizar estudos análogos em outras extrusoras. No momento, existe a possibilidade de fazer-se um trabalho análogo ao apresentado nesta dissertação, utilizando-se uma extrusora de 150 mm de diâmetro assim que o equipamento em questão estiver com uma instrumentação adequada para que o estudo seja desenvolvido. Para aprimorar-se a metodologia proposta, necessita-se melhorar a etapa de obtenção de resultados preditos por simulação que servem para ajustar os parâmetros dos modelos simplificados. No momento, estudam-se duas possibilidades de fazer-se isso: implementar os modelos clássicos de extrusão para que se tenha uma capacidade maior de interferir na qualidade das simulações ou aplicar um método de otimização para ajustar os valores de f_b visando a obtenção de uma melhor concordância entre os resultados preditos pelo simulador comercial com os dados experimentais. Além disso, deve-se estudar uma forma de incluir características geométricas e de operação da matriz nos modelos simplificados de forma que se consiga uma versatilidade maior para as equações. Ao contrário das outras atividades citadas, já se tentou realizar essa referente à matriz e não se obteve êxito até o momento.

Referências Bibliográficas

- Amellal, K., Lafleur, P. G., Arpin, B., **Computer Aided Design of Single-Screw Extruders**, Elsevier, 1989.
- Bates, D. M., Watts, D. G., **Nonlinear Regression Analysis and its Applications**, John Wiley & Sons, Nova York, 1988.
- Belski, V., **Computer Aided Analysis and Design in Plastic Extrusion**, Viadelo s. r. l., (versão eletrônica), 2002.
- Bird, R. B., Armstrong R. C., Hassager O., **Dynamics of Polymeric Liquids - Fluid Mechanics**, v. 1, p. 1-648, John Wiley & Sons, Nova York, 1987.
- Bretas R. E. S., D'avila M. A., **Reologia de Polímeros Fundidos**, v.1, p. 1-195, Editora da UFSCar, São Carlos, 2000.
- Broyer E., Tadmor Z., **Solids Conveying in Screw Extruders – Part I: A Modified Isothermal Model**, Polymer Engineering and Science, v. 12, p. 12-24, 1972.
- Campbell, G. A., Dontula, N., **Solids Transport in Extruders**, International Polymer Processing, v. 10, p. 30-35, 1995.
- Campbell, G. A., Baird, J. C., **Single Screw Solids Conveying – Different Polymers and A General Purpose Screw**, ANTEC, (versão eletrônica), 2003.
- Carreau, P. J., **Rheological Equations from Molecular Network Theories**, Tese de Doutorado, Universidade de Wisconsin, Madison, 1968.
- Cox, A. P. D., Fenner, R. T., **Melting Performance in the Single Screw Extrusion of Thermoplastics**, Polymer Engineering and Science, v. 20, p. 561-571, 1980.
- Cox, W. P., Merz, E. H., **Correlation of Dynamic and Steady-Flow Viscosities**, Polymer Engineering and Science, v. 28, p. 619-622, 1958.
- Cross, M. M., **Rheology of Non-Newtonian Fluids: A New Flow Equation for Pseudoplastic Systems**, Journal of Colloid Science, v. 20, p. 417-437, 1965.

- Cunha, A. L., **Modelling and Optimisation of Single Screw Extrusion**, Tese de Doutorado, Escola de Engenharia, Universidade do Minho, Guimarães, 2000.
- Darnell, W. H., Mol, E. A. J., **Solids Conveying in Extruders**, Society of Plastics Engineers, v. 12, p. 20-29, 1956.
- Dekker, J., *Kunststoffe*, v. 66, p. 130, 1976.
- De Waele, A., **Viscometry and Plastometry**, Oil Color Chemical Association, v. 6, p. 33-69, 1923.
- Donovan, R. C., *Polymer Engineering and Science*, v. 11, p. 247, 1971.
- Edmondson, I. R., Fenner, R. T., *Polymer*, v. 16, p. 49, 1975.
- Elbirli, B. , Lindt, J.T., Gottgetreu, S.R. e Baba, S.M., **Mathematical Modelling of Melting of Polymers in a Single-Screw Extruder**, *Polymer Engineering and Science*, v. 24, p. 988-999, 1984.
- Fenner, R.T., **Developments in the Analysis of Steady Screw Extrusion of Polymers**, *Polymer*, v. 18, p. 617-635, 1977.
- Flow 2000, **Manual de instrução**, CD-ROM, v. 5.2, 2002.
- Finkler, T. F., **Desenvolvimento de uma Ferramenta para Obtenção de Modelos Empíricos**, Dissertação de Mestrado, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.
- Hagen, G., *Berliner Monatsberichte Akad. D. Wiss.*, p. 35-42, 1852.
- Halmos, A. L., Person, J. R. A., Trottnow, R., v. 19, p. 1119, 1978.
- Han, C. D., Lee, K. Y. Wheeler, N. C., **An Experimental Study on Plasticating Single-Screw Extrusion**, *Polymer Engineering and Science*, v. 30, p. 1557-1567, 1990.
- Han, C. D., Lee, K. Y. Wheeler, N. C., **Plasticating Single-Screw Extrusion of Amorphous Polymers: Development of a Mathematical Model and Comparison with Experiment**, *Polymer Engineering and Science*, v. 36, p. 1360-1376, 1996.
- Hyun, K. S., Spalding, M. A., **Bulk Density of Solid Polymer Resins as a Function of Temperature and Pressure**, *Polymer Engineering and Science*, v. 30, p. 571-576, 1990.

- Hyun, K. S., Spalding, M. A., **A New Model for Solids Conveying in Single-Screw Plasticating Extruders**, ANTEC, (versão eletrônica), 1997.
- Lee, K. Y., Han, C. D., **Analysis of the Performance of Plasticating Single-Screw Extruders with a New Concept of Solid-Bed Deformation**, Polymer Engineering and Science, v. 30, p. 665-676, 1990.
- Lindt, J. T., **Mathematical Modelling of Melting of Polymers in a Single-Screw Extruder – A Critical Review**, Polymer Engineering and Science, v. 25, p. 585-588, 1985.
- Macosko, C.W., **Rheology: Principles, Measurements and Applications**, p. 1-550, VCH Publishers, Nova York, 1994.
- Maddock, B. H., **A Visual Analysis of Flow and Mixing in Extruder**, Society of Plastics Engineers, v. 15, p. 383-394, 1959.
- MC BASE, **Base de Dados CAMPUS**, CD-ROM, v. 4.5, 2002.
- McKelvey, J. M., **Polymer Processing**, John Wiley & Sons, Nova York, 1962.
- Menges, G.; Klenk, P., *Kunststoffe*, v. 57, p. 590-598., 1967.
- Menges, G.; Osswald, T. A., **Polymer Processing**, (versão eletrônica), 1996.
- Montgomery, D, **Design and Analysis of Experiments**, 5ª ed. Engineers, John Wiley & Sons, Nova York, 2001.
- Moore, E. R., **Styrene Polymers**, The Dow Chemical Company, Reimpressão da **Encyclopedia of Polymer and Engineering**, v. 16, p. 1-246, 2ª ed., John Wiley & Sons, Nova York, 1989.
- Morton-Jones, D.H., **Polymer Processing**, Chapman & Hall, Londres, 1989.
- Ostwald, W., **Ueber Die Geschwindigkeitsfunction der Viskositat Disperser Systeme**, *Kolloid-Z*, v. 36, p. 99-117, 1925.
- Potente, H., **Fundamental Mechanisms in Polymer Processing – Extrusion**, ANTEC, (versão eletrônica), 1998.
- Rauwendaal, C., **Polymer Extrusion**, 3ª ed., p. 1-566, Carl Hanser Verlag, Munique, 1986a.
- Rauwendaal, C., **Extruder Screws with Barrier Sections**, Polymer Engineering and Science, v. 26, p. 1245-1253, 1986b.

- Rauwendaal, C., Osswald, T. A., Tellez, G., Gramann, P. J., **Flow Analysis in Screw Extruders-Effect of Kinematic Conditions**, International Polymer Processing, v. 13, p. 327-333, 1998.
- Shacham, M., Brauner, N., **The SROV Program for Data Analysis and Regression Model Identification**, Chemical Engineering and Processing, v. 27, p. 701-714, 2003.
- Shapiro, J. A., Halmos, A. L., Person, J. R. A., Polymer, v. 17, p. 905, 1976.
- Spalding, M. A., Kirkpatrick, D. E., Hyun, K. S., **Coefficients of Dynamic Friction for Low Density Polyethylene**, Polymer Engineering and Science, v. 33, p. 423-430, 1993.
- Spalding, M. A., Hyun, K. S., **Coefficients of Dynamic Friction as a Function of Temperature, Pressure, and Velocity for Several Polyethylene Resins**, Polymer Engineering and Science, v. 35, p. 557-563, 1995a.
- Spalding, M. A., Hyun, K. S., Jenkins, S. R., Kirkpatrick, D. E., **Coefficients of Dynamic Friction and the Mechanical Melting Mechanism for Vinylidene Chloride Copolymers**, Polymer Engineering and Science, v. 35, p. 1907-1916, 1995b.
- Spalding, M. A., Hyun, K. S., Hughes, K. R., **Stress Distribution in Solid Polymer Compacts**, ANTEC, (versão eletrônica), 1996.
- Tadmor, Z., **Fundamentals of Plasticating Extrusion**, Polymer Engineering and Science, v. 6, p. 185-190, 1966.
- Tadmor, Z., Duvdevani, I.J., Klein, I., **Melting in Plasticating Extruders – Theory and Experiments**, Polymer Engineering and Science, v. 7, p. 198-217, 1967.
- Tadmor, Z., Klein, I., **Engineering Principles of Plasticating Extrusion**, Van Nostrand Reinhold, Nova York, 1970.
- Tadmor, Z., Broyer, E., **Solids Conveying in Screw Extruders – Part II: Non Isothermal Model**, Polymer Engineering and Science, v. 12, p. 378-386, 1972.
- Tadmor, Z., Gogos, C., **Principles of Polymer Processing**, Chemical Publishing, Nova York, 1979.
- Tanner, R. I., **Engineering Rheology**, Oxford University Press, Nova York, 1985.
- Vlcek, J.; Perdikoulis, J., **Application of a Single Screw Extruder Simulation Towards Design**, ANTEC, (versão eletrônica), 2002.

- Walker, D.M., **Approximate Theory for Pressures and Arching in Hoppers**, Chemical Engineering Science, v. 21, p. 975-997, 1966.
- Wilczyński, K., **SSEM: A Computer Model for a Polymer Single-Screw Extrusion**, Journal of Materials Processing Thecnology, (versão eletrônica), 2001.
- Williams, M. L., Landel, R. F., Ferri, J. D., **The Temperature Dependence of Relaxation Mechanisms in Amorphous Polymers and other Glass-Forming Liquids**, Am. Chemical Society, v. 77, p. 3701-3707, 1955.
- Wolf, C. R., Grave, E., **A Study of Parameters Related to Analysis of Transition Temperatures and Enthalpies of Polypropylene by Differential Scanning Calorimetry (DSC)**, Journal of Chemistry, v. 10, n. 11, p. 73-78, 2002.
- Yasuda, K., **Investigation of the Analogies Between Viscometric and Linear Viscoelastic Properties of Polystyrene Fluids**, Tese de Doutorado, MIT, Cambridge, 1979.
- Zhang, X., Hendro, W., Fujii, M., Tomimura, T., Imaishi, N., **Measurements of the Thermal Conductivity and Thermal Diffusivity of Polymer Melts with the Short-Hot-Wire Method**, International Journal of Thermophysics, v. 23, n. 4, p. 1077-1090, 2002. Int. J. Thermophysics, Vol. 23, No. 4, pp. 1077-1090, 2002.