UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS

MODELAGEM NUMÉRICA DO PERFIL TÉRMICO E DO ESCOAMENTO DE MATERIAL TERMOPLÁSTICO POR EXTRUSÃO EM UM CABEÇOTE CUSTOMIZADO PARA MANUFATURA ADITIVA

André Luiz Grando Santos

São Carlos-SP 2024

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS

MODELAGEM NUMÉRICA DO PERFIL TÉRMICO E DO ESCOAMENTO DE MATERIAL TERMOPLÁSTICO POR EXTRUSÃO EM UM CABEÇOTE CUSTOMIZADO PARA MANUFATURA ADITIVA

André Luiz Grando Santos

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais como requisito parcial à obtenção do título de DOUTOR EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS

Orientadora: Dra. Alessandra de Almeida Lucas Coorientadora: Dra. Zilda de Castro Silveira Agência Financiadora: CAPES - Processo: 88882.466360/2019-01

> São Carlos-SP 2024

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a minha esposa Elisabete Andréia Leonardi e a minha filha Maria Gabriela Leonardi Grando.

VITAE

Mestre em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal de Santa Catarina (2011). Bacharel em Engenharia Mecânica pela Universidade de Passo Fundo (2005).



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

Folha de Aprovação

Defesa de Tese de Doutorado do candidato André Luiz Grando Santos, realizada em 10/04/2024.

Comissão Julgadora:

Profa. Dra. Alessandra de Almeida Lucas (UFSCar)

Prof. Dr. Carlos Henrique Scuracchio (UFSCar)

Prof. Dr. Juliano Marini (UFSCar)

Prof. Dr. Marcelo Massayoshi Ueki (UFS)

Prof. Dr. Thiago André Carniel (Unochapecó)

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais.

AGRADECIMENTOS

As professoras Dra. Alessandra de Almeida Lucas e Dra. Zilda de Castro Silveira, pelas orientações, conselhos e discussões realizadas durante a realização desta pesquisa.

Aos professores do PPGCEM/UFSCar, Alessandra de Almeida Lucas, Carlos Henrique Scuracchio, José Alexandrino de Sousa, José de Anchieta Rodrigues, Juliano Marini, Leonardo Bresciani Canto, Marcello Rubens Barsi Andreeta, Pedro Augusto de Paula Nascente e Piter Gargarella, pelos conhecimentos e informações transmitidas durante as aulas.

Ao professor da UNOCHAPECÓ, Cristiano Reschke Lajús, pelo apoio na realização do projeto do DINTER. Aos colegas do DINTER, em especial, Ademar Tibola e Murilo Cesar Costelli, pela amizade e colaboração durante o período de realização do doutorado.

À minha família, especialmente à minha esposa Andréia Leonardi Grando e à minha filha Maria Gabriela Leonardi Grando, pelo apoio e compreensão durante o período de realização do doutorado.

Ao Dr. Joaquim Manoel Justino Neto, egresso do programa de pósgraduação do Departamento de Engenharia Mecânica (SEM) da Universidade de São Paulo, em especial, pela amizade, pela contribuição científica e pela troca de experiências durante o período de realização do doutorado.

A doutoranda Dávila Moreira Lopes da Silva, ao prof. Marcelo A. Chinelatto e ao técnico Ricardo Pereira do laboratório de polímeros do SMM EESC USP, pelo aporte técnico nos experimentos de reologia e troca de experiências.

Aos técnicos da secretaria do PPGCEM, pelo auxílio nos encaminhamentos administrativos.

À UFSCar e UNOCHAPECÓ pela realização do projeto do DINTER.

À CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior pelo apoio financeiro para realização deste trabalho com bolsa de estudos, processo nº 88882.466360/2019-01. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

Esse trabalho apresenta um procedimento para modelagem e análise numérica do escoamento de um fluido termoplástico com comportamento pseudoplástico aplicado a um cabeçote customizado miniaturizado vertical baseado em dupla rosca para manufatura aditiva. Trata-se de um estudo de caso que foi conduzido utilizando o cabeçote miniaturizado de um protótipo inovativo concebido em escala laboratorial de manufatura aditiva para fabricação direta utilizando como matéria-prima o PP RP141 em estado de pó. Os perfis de temperatura no cabeçote foram estimados e as técnicas adotadas foram validadas com dados experimentais de um protótipo do cabeçote extrusor. As pressões e detalhes do escoamento nos canais que formam o bico de extrusão (matriz) foram revelados através de modelo 3D. Os parâmetros adimensionais característicos dos tipos de elementos que constituem as roscas, também, foram determinados por modelo 3D. Um modelo de escoamento 1D, publicado por outro autor, foi modificado e codificado para a previsão das pressões e consequentemente a localização dos trechos totalmente preenchidos das roscas. Esse modelo modificado foi validado pela comparação com dados de casos documentados na literatura. Ainda, foram simulados os trechos preenchidos através de técnicas de imersão de malhas, em um modelo 3D, e detalhes do complexo escoamento nesses trechos foram discutidos. Por fim, uma comparação das pressões previstas com o modelo 1D modificado com as obtidas pelo modelo 3D revelaram uma boa aproximação entre os resultados dessas análises pela técnica proposta neste trabalho, estabelecendo assim um roteiro de procedimentos para exploração dos limites de processamento da unidade, composição de roscas, variáveis e materiais de processo, bem como auxiliar na tomada de decisões nas etapas projetiva de outras unidades e melhorias dessa inovadora variante da manufatura aditiva.

Palavras-chave: análise numérica; escoamento de termoplásticos; *printhead*; *powder feedstock*; dupla rosca; manufatura aditiva.

ABSTRACT

NUMERICAL MODELING OF THE THERMAL PROFILE AND FLOW OF THERMOPLASTIC MATERIAL THROUGH EXTRUSION IN A CUSTOMIZED HEAD FOR ADDITIVE MANUFACTURING

This work presents a procedure for modeling and numerical analysis of the flow of a thermoplastic fluid with pseudoplastic behavior applied to a custom miniature vertical head based on twin-screw extrusion for additive manufacturing. It is a case study conducted using the miniature head of an innovative prototype conceived on a laboratory scale for direct manufacturing using the PP RP141 raw material in powder form. The temperature profiles in the head were estimated, and the techniques adopted were validated with experimental data from a prototype of the extruder head. The pressures and flow details in the channels forming the extrusion nozzle (die) were revealed through a 3D model. The dimensionless parameters characteristic of the types of elements that constitute the screws were also determined by a 3D model. A 1D flow model published by another author was modified and coded to predict the pressures and, consequently, the location of the fully filled sections of the screws. This modified model was validated by comparison with documented cases in the literature. Furthermore, the filled sections were simulated using mesh immersion techniques in a 3D model, and details of the complex flow in these sections were discussed. Finally, a comparison of the pressures predicted by the modified 1D model with those obtained by the 3D model revealed a good approximation between the results of these analyses using the technique proposed in this work, thus establishing a procedural roadmap for exploring the processing limits of the unit, screw compositions, process variables, and materials, as well as aiding decision-making in the design stages of other units and improvements of this innovative variant of additive manufacturing.

Keywords: numerical analysis; thermoplastic flow; printhead; powder feedstock; twin screw; additive manufacturing.

viii

PUBLICAÇÕES

 JUSTINO NETTO, J.M.; SAROUT, A.I; SANTOS, A.L.G.; ALMEIDA LUCAS, A., CHINELATTO, M.A.; JORGE LINO, J.L.; GASPAR-CUNHA A.; JOSÉ ANTÓNIO COVAS, J.A.; SILVEIRA, Z.C. (2022) Design and validation of an innovative 3D printer containing a co-rotating twin screw extrusion unit. Additive Manufacturing Journal. Manuscript number: ADDMA_103192. ISSN 2214-8604. https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103192

ÍNDICE DE ASSUNTOS

	Pág.
FOLHA DE APROVAÇÃO	i
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	v
ABSTRACT	vii
PUBLICAÇÕES	ix
SUMÁRIO	xi
ÍNDICE DE TABELAS	xv
ÍNDICE DE FIGURAS	xvii
SÍMBOLOS E ABREVIATURAS	xxv
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Objetivo	4
2 CONCEITOS TEÓRICOS	5
2.1 Conceitos sobre reologia de polímeros	5
2.2 Equações de conservação governantes	7
2.3 Equações constitutivas	7
2.4 Modelagem e simulação do processamento de polímeros	8
2.4.1 Simulação do processo de extrusão dupla rosca	9
2.4.2 Modelo unidimensional (1D) – HME Model	11
2.5 Programa Ansys PolyFlow	15
2.5.1 Simulação do processo de extrusão – Técnica MST	16
2.5.2 Equação de conservação de massa	18
2.5.3 Equação do balanço de energia	19
2.5.4 Interpolação	19
2.5.5 Malha de elementos finitos	20
2.5.6 Dependência temporal	20
2.5.7 Estratégia de solução	21
2.6 Fundamentos da extrusão com dupla rosca	22
2.6.1 Elementos de rosca	25
2.6.1.1 Elementos de transporte	26

2.6.1.2 Elementos de mistura	27
2.6.2 Teoria da similaridade para extrusão com dupla rosca	28
2.7 Conceitos sobre Manufatura Aditiva (MA) por extrusão	31
3 MATERIAIS E MÉTODOS	37
3.1 MATERIAIS	37
3.1.1 Equipamento customizado de uma mini extrusora rosca dupla	37
3.2 Fluxograma de eventos	41
3.3 Simulação computacional – análise térmica	43
3.3.1 Delimitações	43
3.3.2 Geometria do barril	44
3.3.3 Sistema de aquecimento do barril	46
3.3.4 Propriedades térmicas dos materiais do barril	48
3.3.5 Configuração da dupla rosca	48
3.3.6 Perfil de temperaturas no barril	49
3.3.7 Hipóteses de estudo	50
3.3.8 Estimativa do calor para fusão do PP	52
3.3.9 Estimativa do tempo de aquecimento do barril (Regime transiente)	55
3.3.10 Determinação dos coeficientes convectivos naturais	57
3.3.11 Análise de independência do tamanho de malha CFD	62
3.3.12 Análise do passo temporal das análises transientes	64
3.3.13 Validação do modelo	64
3.3.14 Análise CFD – Transiente (Configuração II)	66
3.3.15 Análise CFD – Transiente Periódico (Configuração I)	67
3.3.16 Temperaturas na zona de alimentação	69
3.4 Simulação computacional – fluxo de material no interior do barril	70
3.4.1 Delimitações	70
3.4.2 Análise do fluxo no bico de impressão	72
3.4.2.1 Delimitação das Análises	72
3.4.2.2 Procedimentos das análises	73
3.4.3 Parâmetros adimensionais dos elementos de rosca	76
3.4.3.1 Procedimentos das Simulações	79
3.4.4 Modelo HME 1D modificado	81

3.4.4.1 Discretização do domínio computacional	83
3.4.4.2 Equações Governantes	86
3.4.4.3 Algoritmo Numérico	88
3.4.4.4 Validação do Modelo HME 1D Modificado	94
3.4.4.1 Cenário A	94
3.4.4.2 Cenário B	96
3.4.5 Análise do fluxo – Regiões plenamente cheias (f = 1)	98
3.4.5.1 Delimitações	98
3.4.5.2 Procedimentos da simulação	99
3.4.6 Ensaios Reológicos – PP RP141	103
3.4.6.1 Parâmetros Carreau-Yasuda e Lei de Arrhenius - PP RP141	105
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	109
4.1 Análise Térmica do Barril	109
4.1.1 Refinamento de malha – Testes de independência	109
4.1.2 Incremento temporal – Testes de independência	111
4.1.3 Validação do modelo computacional	112
4.1.4 Perfil de temperaturas	114
4.1.5 Propostas de melhorias	126
4.2 Análise do fluxo no barril	129
4.2.1 Pressões no bico	129
4.2.2 Parâmetros adimensionais - A1 e A2	135
4.2.3 Modelo HME-Modificado	138
4.2.3.1 Validação	138
4.2.3.2 Previsão dos locais plenamente cheios das roscas	141
4.2.4 Fluxo nos canais plenamente preenchidos ($f = 1$)	147
4.3 Síntese dos resultados	156
5 CONCLUSÕES	159
6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	161
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	163
APENDICE A	173
APÊNDICE B	199

xiv

ÍNDICE DE TABELAS

- 9
Tabela 1 - Parâmetros dimensionais do modelo de similaridade para extrusão
com dupla rosca
Tabela 2 – Torque estimado a diferentes velocidades angulares das roscas.
Adaptado de [10] 40
Tabela 3 – Potências nominais dos conjuntos de aquecedores resistivos. Fonte:
Adaptado de [10] 47
Tabela 4 – Propriedades térmicas dos materiais que constituem o barril. Fonte:
Adaptado de [71] 48
Tabela 5 – Propriedades térmicas do PP RP141. Fonte: Adaptado de [10] 53
Tabela 6 - Correlações empíricas da literatura para o número de Nusselt de
placas planas, submetidos a convecção natural, em diferentes orientações.
Fonte: Adaptado de [71]58
Tabela 7 – Parâmetros geométricos das faces representativas adotadas para a
determinação dos coeficientes convectivos para as configurações I e II. Fonte:
Elaborado pelo autor
Tabela 8 – Propriedades do ar a pressão ambiente e a temperatura de filme de
120°C. Fonte: Adaptado de [71]61
Tabela 9 – Número de Rayleigh, número de Nusselt e coeficientes convectivos
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado.
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor
médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor 61 Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 15 – Parâmetros geométricos da extrusora dupla rosca Clextral BC. Tabela 16 - Parâmetros geométricos e adimensionais dos distintos tipos de elemento que compões a dupla rosca Clextral BC conforme apresentados por Tabela 17 – Viscosidades obtidas dos ensaios de reômetria para PP RP141 nas temperaturas de 180°C, 200°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor......104 Tabela 18 – Parâmetros dos modelos Carreau-Yasuda e Lei Arrhenius obtidos de dados experimentais do PP RP141. Fonte: Elaborado pelo autor.107 Tabela 19 - Níveis de refinamento de malha adotados nos estudos da influência da qualidade da malha nos resultados das análises térmicas. Fonte: Elaborado pelo autor......109 Tabela 20 - Resultados dos testes de independência do passo temporal das análises transientes em função do número de elementos da malha CFD. Fonte: Elaborado pelo autor......111 Tabela 21 – Resultado das pressões consumidas no bico para as vazões de 20 g/h e 40 g/h nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.....130 Tabela 22 – Taxas de cisalhamento médias nas paredes do canal do bico para as vazões de 0,2kg/h e 0,4 kg/h, nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor......132 Tabela 23 – Parâmetros A1 e A2 obtidos dos resultados das simulações CFD para a composição de elementos que constituem a configuração da rosca dupla. Tabela 24 – Vazões e pressões, resultantes das simulações, empregados na

ÍNDICE DE FIGURAS

Pág.
Figura 2.1 - Curva típica de Viscosidade versus taxa de cisalhamento para um
polímero fundido a uma dada temperatura. Adaptado de [21]6
Figura 2.2 – Representação da transcrição do modelo geométrico representando
uma configuração de dupla rosca em termos de elementos discretos no modelo
HME. Adaptado de [35] 11
Figura 2.3 – Balanço de massas em um elemento numérico do modelo HME.
Adaptado de [35] 12
Figura 2.4 – a) Área em preto representa a área livre (Acr) da seção transversal
do elemento de rosca. b) linhas que representam a extensão do perímetro do
barril correspondente a lgap15
Figura 2.5 - Divisão de um elemento 2D em subelementos na técnica MST. A
linha verde representa a periferia da região rotante (rosca) que está imersa na
malha que representa o fluido. Adaptado de [39] 18
Figura 2.6 - a) Rosca dupla co-rotacional interpenetrante; b) Rosca dupla contra-
rotacional interpenetrante; c) Rosca dupla contra-rotacional não interpenetrante.
Adaptado de [47]24
Figura 2.7 - Efeito do número de filetes no desenvolvimento de fluxos
secundários parciais. Adaptado de [36] 27
Figura 2.8 – a) Curva de pressão característica de um elemento de dupla rosca.
b) Curva de potência característica de um elemento de dupla rosca
Figura 2.9 – Categorias e variações de técnicas aditivas. Adaptado de [57] 33
Figura 2.10 – Etapas dos processos MA. Adaptado de [58]
Figura 2.11 - Esquemático do processo FDM/FFF. Adaptado de [59]
Figura 2.12 – Materiais utilizados na tecnologia FDM/FFF. Adaptado de [64]. 35
Figura 2.13 – Mecanismos de extrusão por filamento (a), êmbolo (b) e rosca (c).
Adaptado de [66]
Figura 3.1 - a) Sistema Co-TSE para manufatura aditiva (MA). b) Subsistemas
principais. Adaptado de [10] 38
Figura 3.2 - Equipamento modularizado Co-TSE. a) posição de operação; b)
posição de manutenção. Fonte: Adaptado de [10]

Figura 3.3 – Esquema ilustrando a geometria do barril do cabeçote de extrusão dupla rosca e a localização e os limites das zonas de processamento do sistema Figura 3.4 - Fluxograma das etapas para a solução do problema proposto. Fonte: Figura 3.5 – Vista explodida dos componentes que constituem os módulos que formam o cabeçote extrusor na configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor. 45 Figura 3.6 - Vista explodida dos componentes que constituem os módulos que formam o cabeçote extrusor na configuração II. Fonte: Elaborado pelo autor. 46 Figura 3.7 - Nomenclatura adotada e disposição dos pares de aquecedores Figura 3.8 – Esquema ilustrando as zonas de processamento para a configuração da dupla rosca adotado no conceito inovador de cabeçote extrusor Figura 3.9 – Modelo representativo das parcelas de calor trocadas no processo de aquecimento e operação do cabeçote extrusor. Vermelho representa parcelas transferidas por condução e azul representam parcelas transferidas por convecção. Fonte: Elaborado pelo autor......51 Figura 3.10 - Diagrama para estimativa do tempo de aquecimento do barril, da temperatura de 20°C até 220°C, em função das potências de aquecimento e da massa, para o aço inox AISI 304 (Cp = 480 Jkg. K). Fonte: Elaborado pelo autor. Figura 3.11 – Esquema ilustrando a simplificação adotada na representação das faces (superfícies) para a determinação dos coeficientes convectivos para as

Figura 3.16 – Volume extraído correspondente aos canais que compõe o bico de impressão 3D. Fonte: Elaborado pelo autor. Fonte: Elaborado pelo autor. 73 Figura 3.17 – Domínio da análise: volume que representa o fluido no interior dos canais que formam o bico de impressão 3D. Fonte: Elaborado pelo autor. 74 Figura 3.18 - Representação da malha hexaédrica adotada na simulação do escoamento do bico de impressão. Fonte: Elaborado pelo autor. 75 Figura 3.19 – Representação dos locais onde as condições de contorno são impostas nas análises CFD do escoamento no bico. Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 3.20 – Composição da dupla rosca adotada nas simulações CFD. (A) elemento de transporte 20/40 com rosca direita, (B) e (D) elementos de malaxagem -60/15/3, (C) elemento de transporte 15/40 com rosca direita e (E) elemento de transporte 10/20 com rosca direita. Fonte: Elaborado pelo autor. 78 Figura 3.21 – Representação do domínio computacional constituído de dois subdomínios, um para representar o fluido e o outro para representar as roscas, segundo a técnica de superposição de malhas (MST). Fonte: Elaborado pelo autor. 79

Figura 3.22 – Representação dos locais onde as condições de contorno são impostas nas análises CFD para obtenção dos parâmetros A1 e A2 dos distintos tipos físicos de elementos que compões as roscas. Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 3.23 – Esquema ilustrando a discretização 1D do domínio computacional empregado no modelo HME-modificado e as componentes de fluxo para a geometria do barril e roscas na configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor. . 84

Figura 3.24 – Elemento unitário da malha 1D representando todas as componentes de fluxo associadas ao modelo HME 1D. Componentes de fluxo associadas ao transporte de arraste e componentes de fluxo associadas aos Figura 3.25 - Componentes de fluxo associados aos distintos tipos físicos de elementos que podem compor as roscas. (A) Elementos de transporte positivo. (B) Elementos de transporte negativo. (C) Elemento de transição entre fluxo positivo e negativo. (D) Elementos sem capacidade de transporte. (E) Elementos de transição entre fluxo negativo e positivo. (F) Elemento representativo da Figura 3.26 – Fluxograma descrevendo as rotinas de cálculos do algoritmo proposto para a solução numérica do modelo HME 1D - Modificado. Fonte: Figura 3. 27 - Esquema ilustrando o procedimento adotado para as correções das pressões no modelo HME 1D – Modificado. Fonte: Elaborado pelo autor. 92 Figura 3.28 - Esquema ilustrando a composição das roscas extrusoras e a localização dos sensores de pressão (PI) e temperatura (TI) conforme proposto no experimento de Eitzlmayr et. al. (2014) [34] para a validação do se modelo Figura 3.29 – Perfis de pressões, temperaturas e níveis de preenchimento, ao longo da dupla rosca para a velocidade de 60 rpm, obtidos para o polímero

Figura 4.15 – Distribuição de pressões no bico para as vazões de 0,2 kg/h e 0,4 kg/h nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 4.23 – Interface gráfica desenvolvida para o modelo HME-modificado demonstrando a sequência de abas para a inserção dos dados de entrada e monitoramento dos resultados das simulações, programado através do módulo *appDesigner* disponível no programa MATLAB. Fonte: Elaborado pelo autor.

SÍMBOLOS E ABREVIATURAS

\overline{Nu}_L	Número de Nusselt médio
$\dot{m}_{b,i}$	Componente vazão mássica associada a elementos de transporte a montante
$\dot{m}_{f,i}$	Componente de vazão mássica associada a elementos de transporte a jusante
$\dot{m}_{p,i}$	Componente de vazão mássica associada a elementos pressurizados
\overline{h}	Coeficiente convectivo médio
$\dot{\gamma}_r$	Taxa de cisalhamento representativa
ΔH _{fusão}	Entalpia de fusão
Ż	Derivada de tempo
<i>A</i> ₁	Parâmetro admissional da vazão característica
<i>A</i> ₂	Parâmetro admissional da pressão característica
<i>A</i> ₃	Parâmetro admissional derivado dos parâmetros característicos
A _{cr}	Área livre da seção transversal da dupla rosca
<i>B</i> ₁	Primeiro parâmetro de potência característica do elemento de rosca
<i>B</i> ₂	Segundo parâmetro de potência característica do elemento de rosca
C_p	Calor específico a pressão constante
L _c	Comprimento característico
Ż	Taxa de transferência de calor
T_0	Temperatura de referência
T_f	Temperatura de filme
\dot{V}	Vazão volumétrica
V _{livre}	Volume livre
a_T	Parâmetro dos modelos Lei de Arrhenius e WLF

k _{fb,i}	Parâmetros do modelo HME 1D associados aos elementos de transporte positivo e negativo
k _{p,i}	Parâmetros do modelo HME 1D associados aos elementos consumidores/geradores de pressão
l_{gap}	Comprimento característico da seção transversal da dupla rosca
'n	Vazão mássica
r_s	Fonte de calor da parte móvel
\overline{V}	Vetor velocidade local
Ϋ́	Taxa de cisalhamento
γcrit	Taxa de cisalhamento crítica
η_0	Viscosidade dinâmica a taxa de cisalhamento zero
η_r	Viscosidade representativa
ABS	Acrilonitrila Butadieno Estireno
AC	Conjunto de aquecimento
AISI	American Iron and Steel Institute
BEM	Boundary Element Mesh
CC	Condição de contorno
CFD	Computational Fluid Dynamics
Co-TSE	Co-rotating Twin Screw Extrusion Unit
EAM	Extrusion-based Additive Manufacturing
FFF	Fused Filament Fabrication
h	Parâmetro modelo HME 1D
HME	Hot Melt Extrusion
m	Índice de consistência
MA	Manufatura Aditiva
MEF	Método dos Elementos Finitos

xxvi

- MST Mesh Superposition Technique.
- PA Poliamida
- PC Policarbonato
- PEI Polieterimida
- PLA Poliácido Láctico
- POM Polioximetileno
- PP Polipropileno
- PS Poliestireno
- PSAI Poliestireno de Alto Impacto
- PTFE Politetrafluoretileno
- RTD Residence Time Distribution
- SSE Single Screw Extruders
- T_m Temperatura de fusão
- TSE Twin Screw Extrusion
- WLF Williams–Landel–Ferry
- K Matriz de rigidez
- M Matriz de massa
- X Vetor de incógnitas nodais
- C1 Constante do modelo WLF
- C2 Constante do modelo WLF
- D Diâmetro interno do barril
- *E* Energia de ativação
- *H* Função passo
- *K* Condutividade térmica
- *L* Comprimento do elemento de rosca

		٠	٠
VVV	ı	ı	ı
X X V	I	I	I

Р	Potência motriz
Q	Calor total
R	Constante universal dos gases
Ra	Número de Rayleigh
Т	Temperatura
f	Nível de preenchimento dos canais de extrusão
g	Aceleração da gravidade
т	Massa
n	Índice da lei das potências
n	Velocidade Angular
p	Escalar de pressão
t	Tempo
L	Comprimento do elemento de rosca
ν	Vetor velocidade
β	Fator de compressão relativa
η	Viscosidade dinâmica
θ	Fator de integração
λ	Tempo de relaxação
ρ	Densidade
τ	Tensor tensão total

1 INTRODUÇÃO

O processamento de extrusão de polímeros representa uma das maiores áreas de fabricação de produtos no segmento industrial. Amplamente utilizado na indústria de plásticos, o processo de extrusão consiste na conversão de matéria-prima em um produto com densidade e forma uniformes, realizada por meio da passagem forçada do material por uma matriz sob condições controladas [1] [2].

Enquanto as extrusoras com perfil de rosca única são normalmente adotadas para processar continuamente produtos com seção transversal constante (como por exemplo, perfis, tubos e canaletas, filmes e folhas, filamentos e fibras), o uso de diferentes perfis de roscas duplas corrotacionais são utilizadas para operações de compostagem, por exemplo, polimerização, homogeneização, devolatização, aditivação, blendas, modificação ou reforços de polímeros seguidos de peletização [3]. Esses equipamentos utilizam matériaprima polimérica sob a forma de pós ou pellets e, dependendo de suas características geométricas e condições de operação, podem transportar, fundir, misturar, desvolatilizar e gerar pressão de forma eficiente [4]. Esse tipo de matéria-prima apresenta potenciais aplicações na área de manufatura aditiva para a fabricação indireta e direta de uma maior variedade de filamentos ou a fabricação direta potencializando oportunidades de novas funcionalidades, como por exemplo, a fabricação de peças com funcionalidade controlada (lattice structures e complaint mechanisms), com pesquisa básica em materiais bioativados, medicamentos personalizados, materiais com respostas a estímulos externos que combinados com a impressão 3D geram o conceito de Impressão 4D [5] [6].

Desde metade dos anos 2000, têm sido propostos projeto de cabeçotes de impressão 3D baseados no processo de extrusão, com sistemas combinados de extrusão indireta (fabricação de filamentos) e direta (fabricação aditiva de peças), possibilitando o uso de polímeros previamente fundidos, granulados (pellets) ou em pó, combinados com materiais múltiplos (partículas metálicas, cerâmicas ou mesmo outros polímeros), para mistura e deposição direta do material resultante, evitando assim etapas precedentes associadas à fabricação de filamentos [7] [8] [9] [10].

Entretanto, a elaboração de filamentos para manufatura aditiva, a partir de materiais alternativos envolve etapas adicionais de processamento no estado fundido para que ocorra a mistura dos diferentes compostos e sua conformação, o que requer o atendimento de demandas específicas em termos das propriedades dos filamentos, implicando em maior consumo de recursos e na possibilidade de degradação térmica ao longo do processo [5] [11].

Justino Netto (2017) [12] identificando as limitações de mistura de cabeçotes de impressão 3D por extrusão listadas na literatura e em bases de patentes, nas quais a grande maioria se baseia em rosca simples com seção constante e, algumas com seção variável, como elemento extrusor e alguma modelagem numérica do fenômeno de extrusão [14] [15] [16] [17] e das vantagens conhecidas no uso de extrusoras de rosca dupla na indústria, no que refere a compostagem de polímeros e a elevada capacidade de mistura, propuseram um equipamento customizado modularizado para manufatura aditiva direta por extrusão.

Entretanto, estudos interdisciplinares envolvendo a concepção sistematizada do projeto do equipamento, fabricação e montagem, calibração do processo e validação experimental se apresentam em poucos trabalhos nessa linha e a adição de modelos numéricos baseados na natureza e escoamento do comportamento do polímero, ainda são poucos os trabalhos encontrados na literatura [12].

Dylan *et al.* (2016) [18] reforçam que, as condições de processamento da matéria-prima para Manufatura Aditiva (MA), assim como nas aplicações tradicionais de extrusão industrial exercem papel importante na determinação das propriedades finais das peças acabadas, portanto em sua qualidade final. A modelagem numérica de seus processos permite a viabilidade de sistemas de instrumentação e diferentes abordagens de controle (*on-line e in-line*) ao longo do processamento do material, aumentando a confiabilidade da produção (qualidade projetada no tempo).

Neste contexto, Malik, Kalyon e Golba (2014) [19] demonstram que o desenvolvimento de modelos computacionais para simulação dos efeitos acoplados entre a deformação, a transferência de calor e massa e a taxa de cisalhamento que ocorrem nas diferentes zonas de transformação de fase numa
extrusora dupla rosca permitem a otimização de parâmetros do processo e das geometrias das roscas e do barril.

Portanto, a estimativa do perfil temperatura x pressão ao longo do comprimento das roscas e também na saída do bocal de deposição, em função das variações de seus elementos até a plastificação completa do material até sua saída pela matriz/bocal é fundamental para a previsão de eventuais modos de falhas (travamento do sistema, misturas ineficientes, superaquecimento, entre outros).

Nos sistemas dupla-rosca, a vazão independe da velocidade de rotação das roscas, e as altas taxas de cisalhamento envolvidas na região de malaxagem, que efetivamente respondem pela qualidade da mistura dispersiva, envolvem fenômenos termomecânicos, que somente só podem ser previstos em modelos numéricos e estimados por um sistema de controle muito robusto [20] [2].

Dessa forma, o uso de programas computacionais com abordagens de resolução numérica das equações de Navier-Stokes para estimar parâmetros reológicos e dinâmicos do escoamento do material termoplástico, auxilia significativamente o processo de concepção técnica do equipamento e de sua otimização, bem como o procedimento de calibração do processo de extrusão. A abordagem de Análise Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD) inclui o uso de um conjunto de métodos numéricos, que permitem estimar parâmetros operacionais associados ao escoamento (direções das velocidades, distribuição de temperatura e de pressão).

Esse trabalho propõe o desenvolvimento e a implementação de um conjunto de técnicas de simulação para avaliação de características do escoamento de um material pseudoplástico para um sistema miniaturizado de extrusão por dupla-rosca aplicado a manufatura aditiva direta, utilizando o um modelo 1D da literatura aqui modificado, o módulo Polyflow do programa comercial Ansys® e o módulo Flow Simulation disponível no programa SolidWorks®. As validações dos procedimentos e das técnicas numéricas abordadas nesse trabalho ocorreram em duas etapas: com resultados numéricos de literatura e por meio da comparação de resultados experimentais obtidos com cabeçote de extrusão customizado e miniaturizado para fabricação aditiva direta [10].

1.1 Objetivo

Busca-se com este trabalho, como contribuição, estabelecer um roteiro de procedimentos, através de simulações numéricas 1D e 3D, para exploração detalhada dos limites de processamento da unidade, composição de roscas, variáveis e materiais de processo, bem como auxiliar na tomada de decisões nas etapas projetiva de outras unidades e orientar futuros desenvolvimentos e otimizações dessa inovadora abordagem de manufatura aditiva ainda pouco conhecida, e consequentemente ainda carente de publicação, que auxiliem a preencher essas lacunas de conhecimento.

2 CONCEITOS TEÓRICOS

2.1 Conceitos sobre reologia de polímeros

Segundo Bretas e D'Ávila (2005, p. 19) [21], reologia é a ciência que estuda o fluxo e a deformação da matéria por meio da análise, entre outras, das respostas (na forma de deformação ou tensões) de um material à aplicação de uma tensão ou de uma deformação. A matéria pode estar no estado líquido, sólido ou gasoso.

Para a maioria dos polímeros fundidos, o fluxo é caracterizado por apresentar um comportamento de fluido Newtoniano para taxas de cisalhamento muito baixas (abaixo de $10s^{-1}$) ou taxas de cisalhamento muito elevadas (acima de $10000s^{-1}$). Já, para as taxas de cisalhamento intermediárias, o fundido polimérico, apresenta comportamento não-Newtoniano, onde a relação entre o tensor tensão e as componentes do tensor taxa de deformação não é mais uma constante [21].

Fluidos como polímero fundido, que reduzem suas viscosidades à medida que a taxa de cisalhamento imposta é aumentada, são nomeados de fluidos pseudoplásticos [21]. A Figura 2.1 ilustra uma curva típica, para a grande maioria, dos polímeros no estado fundido, representando o comportamento da viscosidade em função da taxa de cisalhamento imposta.

Também, os poliméricos fundidos são considerados materiais especiais por apresentarem, simultaneamente, características de comportamento de materiais viscosos e elásticos. Este tipo de comportamento é denominado de viscoelástico [21]. Embora, em muitas situações, durante o processamento de polímeros, as características viscosas são predominantes em relação as características elásticas. Nestes casos, que ocorrem por exemplo em processos de extrusão, é possível desprezar as características elásticas na determinação da solução do campo de escoamento [20] [21].



Figura 2.1 - Curva típica de Viscosidade versus taxa de cisalhamento para um polímero fundido a uma dada temperatura. Adaptado de [21].

As relações entre o tensor tensão e as taxas de deformação são chamadas de equações reológicas ou equações constitutivas. No caso de polímeros fundidos, o tensor tensão depende somente das componentes do tensor taxa de deformação [21].

Como modelo constitutivo mais simples para descrever a dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento existe a Lei das Potências que é limitado a descrever a região entre os patamares Newtonianos [2] [21] [20].

O modelo da Lei das Potências, porém, não traz resultados satisfatórios, pois não considera a parte newtoniana do processo, que pode ser encontrada em baixas taxas de cisalhamento ou em elevadas. Por este motivo, equações reológicas mais sofisticadas e complexas foram criadas para que estes fenômenos possam ser descritos de maneira mais precisa. Este fato fez com que soluções numéricas mais elegantes sejam adotas [22].

Já, outro modelo reológico denominado de Carreau-Yasuda permite avaliar com boa precisão as regiões de baixas e médias taxas de cisalhamento (faixa comum para processos de extrusão), além da capacidade de considerar o efeito da temperatura pelo ajuste do valor da viscosidade a taxa de cisalhamento zero à medida que a temperatura é variada [21]. Esse modelo é empregado em diversos programas computacionais no estudo do fluxo de polímeros fundidos, porque oferece o melhor ajuste para a maioria dos dados experimentais de viscosidade e apresenta constantes para vários termoplásticos comuns [23].

2.2 Equações de conservação governantes

Para o estudo do processamento de polímeros é necessário considerar, inicialmente, as equações que governam o fluxo [20] [2]. Para pressões inferiores a 100 MPa, o polímero fundido pode ser considerado um fluido incompressível. As equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia que governam o escoamento, pode ser representada pela Equação (1):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0,$$

$$\rho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \boldsymbol{v} = \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau},$$

$$\rho C_p \boldsymbol{v} \cdot \nabla T = \boldsymbol{K} \nabla^2 T + \tau : \nabla \boldsymbol{v},$$

(1)

onde v é o vetor velocidade, p é o escalar da pressão, τ é o tensor tensão total, ρ é a densidade, C_p é o calor específico, K é a condutividade térmica e T é a temperatura.

Estas equações de conservação são comumente conhecidas da mecânica dos fluidos como equações de Navier-Stokes.

Os desdobramentos destas equações na tecnologia usada pelo software PolyFlow são apresentados mais adiante.

2.3 Equações constitutivas

A descrição do comportamento de fluxo de fluidos não newtonianos não é obtida somente com as equações de conservação (Equações de Navier-Stokes) devido a presença do tensor tensão total τ [4] [20]. Desta forma, é necessário estabelecer relações entre o tensor tensão e a parte cinemática (velocidades e gradiente de velocidades) que são obtidas de equações constitutivas reológicas.

Para fluidos puramente viscosos, a equação constitutiva que promove a relação do tensor tensão com o gradiente de velocidades é dada pelo Modelo Newtoniano Generalizado [23] e é escrito como:

$$\mathbf{\tau} = \eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma} \tag{2}$$

onde $\dot{\gamma} = \nabla v + \nabla v^T$ é o tensor taxa de deformação e $\eta(\dot{\gamma})$ é a viscosidade aparente que é dada, em sua forma mais simples, pela Lei das Potências (*Power Law*) da seguinte forma:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \mathbf{m}\dot{\gamma}^{n-1} \tag{3}$$

onde m é a consistência e n é o índice da lei das potências que representa o grau de pseudoplasticidade do fluido (usualmente 0 < n < 1). A lei de potências se limita a descrever bem o fluxo em altas taxas, mas em baixas não, prevê valores muito maiores do que os reais.

2.4 Modelagem e simulação do processamento de polímeros

A simulação computacional do processamento de polímeros foi abordada inicialmente na década de 1950 aplicando-se soluções analíticas para alguns problemas tratáveis com o modelo da lei das potências (*Power Law*), tais como o escoamento em um canal [23].

Com o avanço dos computadores e de suas capacidades de processamento, o método de elementos finitos (MEF) se demonstrou capaz de tratar de geometrias e condições de contorno mais complexas. Na década de 1980 [23], grande parte das pesquisas nesta área foram direcionadas ao problema da viscoelasticidade apresentada pelos polímeros, onde os modelos apresentavam números de Weissenberg elevados que impediam a solução dos problemas, sendo solucionado somente, próximo a 1990, quando foram mais apropriadamente selecionados os esquemas matemáticos para a solução das equações hiperbólicas.

Ainda na década de 1990, surgem os primeiros pacotes comerciais para simulação do processamento de polímeros através de modelos em 2D e 3D, onde destacam-se o PolyFlow e PolyCAD [23]. Mais recentemente, outros softwares como MoldFlow, Compuplast, XimeX, Ludovic e PolyXtrue estão disponíveis para simulação do processamento de polímeros. O método numérico MEF é o mais empregado nos pacotes comerciais disponíveis, mas alguns avanços vêm ocorrendo no emprego de métodos envolvendo volumes finitos (*FVM*) e elemento de contorno (*BEM*) [23].

2.4.1 Simulação do processo de extrusão dupla rosca

A modelagem de extrusoras de rosca dupla teve seu maior desenvolvimento na década de 1990, devido a crescente aplicação da técnica e a necessidade de maior controle do processo [24].

White e Chen (1994) [24] apresentam em seu artigo uma revisão dos autores, até o ano de 1991, que utilizaram modelos para simular elementos modulares de rosca em processos de extrusão rosca dupla obtendo como resultado a curva característica da rosca, conforme quadro apresentado no Anexo A. Neste quadro é evidenciado que as primeiras simulações computacionais, com vistas em processos de extrusão, já destacavam o recorrente emprego do MEF para descrição das componentes de cisalhamento transversais, as quais desempenham importante papel no comportamento do fluxo em extrusoras dupla rosca.

Conforme Rios, Gramann e Osswald (1998) [25], empregando o método dos elementos de contorno (BEM), o campo de fluxo, as pressões e as tensões podem ser computadas a cada passo do tempo. Com estas informações, a qualidade da mistura pode ser determinada quantitativamente e permitiu modificar a geometria das roscas para melhores condições de mistura. Neste estudo, o método computacional é usado para analisar e comparar a eficácia da mistura de várias geometrias de extrusora rosca dupla.

Avalosse e Rubin (2000) [26] descrevem que o uso de modelos 1D fornecem uma visão global dos valores médios ao longo da direção do fluxo, como pressão, temperatura, índice de mistura, entre outros. Porém, são limitados e não permitem a descrição detalhada dos padrões do fluxo, de suma importância nos processos de mistura. Os modelos 2D e 2(1/2)D são uma das simplificações mais conhecidas, por serem menos restritivos, e permitiram a obtenção de resultados locais do comportamento do fluxo com maior precisão quando comparados aos modelos 1D. Já os modelos 3D são os que mais se aproximam de simular o comportamento real do processo. Para a simulação de uma sequência de posições instantâneas que demandavam um esforço considerável para serem acopladas e por fim representarem o efeito geral do

movimento de rotação da rosca. Esta técnica é denominada de MST - *mesh* superposition technique.

Malik, Kalyon e Golba (2014) [19] mostraram que é possível a modelagem matemática da combinação de elementos de rosca com perda de pressão (rosca de transporte reverso e matriz) e ganho de pressão (transporte para frente). Isto é alcançado através da construção e utilização de malhas MEF que cobriram todo o comprimento das secções de mistura. O acoplamento entre a matriz e a extrusora de rosca dupla, também, foi abordado por Lawal, Railkar e Kalyon (1997) [27]; Zhu e Jaluria (2001) [28] e Kalyon e Malik (2007) [29].

Conforme Malik, Kalyon e Golba (2014) [19], uma extensa revisão sobre modelagem da extrusão com rosca simples foi apresentada por Ilinca e Hétu (2012) [30], bem como por Altınkaynak, *et al.* (2011) [31], e para a extrusão de rosca dupla por Malik, Kalyon e Golba (2014) [19].

Uma análise 3D foi proposta por Wilczyn e Lewandowski (2014) [32], com vistas no estudo das características de fluxo em uma extrusora rosca dupla contra-rotacional, onde são avaliados os fluxos em alguns elementos presentes na rosca (elemento plastificante, de transporte e pressão) para diferentes índices da lei das potencias (grau de pseudoplasticidade). O software empregado na simulação é o ANSYS®-Polyflow, os resultados obtidos pela técnica MEF permitiram obter as curvas de viscosidade, taxa de cisalhamento local e componentes de velocidade aplicando o modelo da lei das potências (desprezando efeitos de elasticidade, temperatura e pressão no fluxo). O autor descreve o potencial emprego da técnica para o estudo e projeto de outros elementos de rosca envolvendo processos de extrusão rosca dupla.

Outros estudos, como os propostos por Wilczyn e Lewandowski (2014) [32]; Carson e Covas (2015) [33]; Altınkaynak, *et al.* (2011) [31] e Kennedy, *et al.*, (2014) [34], se referem a investigação, através de simulação computacional, da capacidade de mistura e efeitos de escorregamento em parede para distintos elementos de rosca dupla em sistemas de escala convencional. Nenhum estudo direcionado a compreensão sobre a ocorrência de possíveis efeitos de miniaturização de tais sistemas foram encontrados na literatura, apontando uma carência no entendimento no que se refere a inovadora aplicação da extrusão com dupla rosca como elemento extrusor em sistemas de impressão 3D.

2.4.2 Modelo unidimensional (1D) – HME Model

Eitzlmayr *et al.* (2014) [35] apresentaram um modelo unidimensional com vistas nos processos de extrusão dupla rosca presentes na indústria farmacêutica, denominado no inglês de "*pharmaceutical hot melt extrusion* (HME)". Esse modelo é destinado a simulação do processo de extrusão de materiais poliméricos não newtonianos, com foco na previsão da capacidade de mistura do sistema, uma vez que é o principal objetivo da HME.

Oportunamente, o modelo é baseado em dois parâmetros empíricos que estão associados aos distintos tipos de elementos que constituem as roscas extrusoras e leva em conta a taxa de preenchimento, pressão, temperatura ao longo dos canais das roscas, potência de acionamento, torque e a distribuição do tempo de residência (RTD). Na sua formulação, em vez de parâmetros empíricos adicionais para determinar a dissipação viscosa e a potência motriz, essas são calculadas a partir de parâmetros geométricos e físicos.

Para a solução numérica, as geometrias dos elementos da dupla rosca são discretizadas ao longo dos seus eixos axiais em um determinado número de elementos N, numerados da entrada para a saída do fluxo (Figura 2.2). Cada elemento pode experimentar até dois tipos de fluxo, de transporte e ou de pressão. O balanço global dos fluxos trocados pelos distintos elementos, em todo o domínio, representa o balanço de massa do volume de controle (domínio).



Figura 2.2 – Representação da transcrição do modelo geométrico representando uma configuração de dupla rosca em termos de elementos discretos no modelo HME. Adaptado de [35].

Como os elementos numéricos devem representar diferentes tipos de elementos físicos das roscas (por exemplo, transporte para frente, transporte

para trás, sem transporte), um elemento genérico é empregado, capaz de representar todos os tipos de elementos de rosca (Figura 2.3).



Figura 2.3 – Balanço de massas em um elemento numérico do modelo HME. Adaptado de [35].

Três vazões mássicas distintas são atribuídas as taxas de fluxo de cada elemento numérico único (ver Figura 2.3). Duas delas são taxas de fluxo de massa acionadas por elementos de transporte, um para fluxo na direção para frente ($\dot{m}_{f,i}$) e um para transporte na direção reversa ($\dot{m}_{b,i}$). Pelo menos uma delas é zero para representar um elemento de rosca transportando para frente ou um elemento de rosca transportando para trás. Para elementos não transportadores, ambos são zero. A terceira taxa de fluxo de massa é responsável por representar o fluxo acionado por pressão ($\dot{m}_{p,i}$), cuja direção depende dos valores de pressão dos elementos adjacentes (numéricos).

O balanço de massa, em cada elemento, referente aos mecanismos de transporte, para frente ou para trás, é tomado como proporcional a velocidade de rotação das roscas, do nível de preenchimento volumétrico, da área livre da seção transversal e do diâmetro. Dessa forma:

$$\dot{m}_{fb,i} = \rho_i. k_{fb,i}. n. f_i. A_{cr}. D \tag{4}$$

Como a diferença na pressão axial depende da resolução axial, o modelo é normalizado com a distância axial ao elemento adjacente. Assim, o fluxo de massa, em cada elemento, associado aos fluxos de pressão é:

$$\dot{m}_{p,i} = -\frac{D^4}{k_{p,i}} \cdot \frac{\rho_i}{\eta_i} \cdot \frac{\Delta P_i}{\Delta x_i}$$
(5)

Para representar o balanço de massa em cada elemento numérico *i* (ver Fig. 2), são computadas as mássicas de entrada menos as mássicas de saída associada ao nível de preenchimento do elemento e é resolvida a derivada temporal do conteúdo de massa m_i dentro do elemento *i* ($m_i = \rho_i V_i f_i$):

$$\frac{dm_i}{dt} = \rho_i V_i \frac{df_i}{dt} \tag{6}$$

No caso dos elementos completamente preenchidos $f_i = 1$, a derivada temporal da taxa de preenchimento no elemento é igual 0 (constante), o que resulta em:

$$f = 1: \frac{dm_i}{dt} = 0 = \dot{m}_{f,i-1} + \dot{m}_{b,i+1} + \dot{m}_{p,i-1} - \dot{m}_{f,i} - \dot{m}_{b,i} - \dot{m}_{p,i}$$
(7)

Já, para elemento parcialmente preenchido, como não há geração de fluxos de pressão, somente de transporte, a pressão é igual a pressão ambiente. Assim os termos associados a estes fluxos são nulos, embora, nesse caso, a derivada temporal do nível de preenchimento não é mais nula. Dessa forma, o balanço de massa no elemento *i* resulta:

$$f < 1: \frac{dm_i}{dt} = \rho_i V_i \frac{df_i}{dt} = \dot{m}_{f,i-1} + \dot{m}_{b,i+1} - \dot{m}_{f,i} - \dot{m}_{b,i}$$
(8)

No caso dos elementos completamente preenchidos, as equações dos balanços das massas nos elementos podem ser resolvidas por um sistema linear de equações algébricas para as pressões p_i . Na outra ponta, a solução dos balanços nos elementos parcialmente preenchidos requer a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias (ODE) para a determinação das taxas de preenchimento f_i do elemento i.

É possível demonstrar a equivalência do modelo da pressão característica com as equações de balanço de massa do modelo HME, que é dado em termos de vazão volumétrica por:

$$\dot{V} = A_1 n D^3 - \frac{A_1}{A_2} \frac{D^4}{\eta_r} \frac{\Delta P}{\Delta x}$$
(9)

Assim, uma equação equivalente para a determinação do fluxo volumétrico em termos dos *i* elementos (discretizada) do modelo HME resulta em:

$$\dot{V} = \frac{\dot{m}_{fb,i}}{\rho_i} + \frac{\dot{m}_{p,i}}{\rho_i} = K_{fb,i}nA_{cr}D - \frac{D^4}{K_{p,i}\eta_i}\frac{\Delta p_i}{\Delta x_i}$$
(10)

Os coeficientes adimensionais $k_{f,i}$ e $k_{b,i}$ são parâmetros empíricos que descrevem o efeito de transporte nos elementos considerados. Já o coeficiente $k_{p,i}$ é o parâmetro adimensional que representa a resistência ao fluxo devido as pressões geradas. Para a determinação desses parâmetros é necessário determinar os coeficientes adimensionais dos modelos da vazão e pressão características (A_1 e A_2), já discutidos na Seção 2.2.2. As relações para determina-los são dadas nas Equações 11 e 12.

$$K_{fb,i} = A_1 \frac{D^2}{A_{cr}} \tag{11}$$

$$K_{p,i} = \frac{A_2}{A_1} \tag{12}$$

Kohlgrüber (2008) [36] demonstrou que é possível determinar A_1 e A_2 , para as geometrias dos elementos de rosca, de forma experimental ou através simulações em CFD.

Ainda, Kohlgrüber (2008) [36] apresentou uma formulação para a viscosidade representativa (η_r), capaz de incorporar o efeito da taxa de cisalhamento na viscosidade, resultando em uma representação na qual os pontos de dados experimentais ficam localizados ao longo da função linear resultante do modelo da pressão característica para um fluido newtoniano correspondente. Contudo, adotando o modelo Carreau-Yasuda para descrever a reologia do polímero fundido, a viscosidade representativa pode ser determinada (Eq. 13) para polímeros pseudoplásticos:

$$\eta_r = \frac{\eta_0}{\left[1 + \frac{\gamma_r}{\gamma_{crit}}\right]^m} \tag{13}$$

Para elementos de transporte ativos a taxa de cisalhamento representativa γ_r pode ser calculada pela Eq. 14.

$$\dot{\gamma}_r = A_3 n \left[1 - \frac{\dot{V}}{A_1 n D^3} \right] \tag{14}$$

O parâmetro adimensional A_3 , conforme Eitzlmayr *et al.* (2013) [37], pode ser aproximado a partir de A_2 usando a distância média entre a rosca e o barril, por:

$$A_3 = A_2 \frac{h}{2D} \tag{15}$$

Onde:

$$h = A_{cr}/l_{gap} \tag{16}$$

Sendo A_{cr} a área livre da seção transversal do elemento de rosca e l_{gap} a extensão do contorno do barril no plano da seção. Na Figura 2.4 está esquematizado graficamente essas quantidades.



Figura 2.4 – a) Área em preto representa a área livre (A_{cr}) da seção transversal do elemento de rosca. b) linhas que representam a extensão do perímetro do barril correspondente a l_{gap} .

2.5 Programa Ansys PolyFlow

O software ANSYS Polyflow® apresenta uma avançada tecnologia para o estudo da dinâmica de fluidos atendendo as indústrias de processamento de polímeros, vidro, metais e cimento. É empregado extensivamente para projetar e otimizar processos como extrusão, termoformagem, moldagem por sopro, formação de vidro e modelagem de concreto [38].

O Polyflow permite a análise de fluxos de fluidos com superfícies livres, reologia complexa (incluindo comportamento não-newtoniano com viscoelasticidade) transferência de calor e reações químicas. Também, apresenta recursos úteis como, por exemplo, o Polymat que pode ser usado para calcular as propriedades do material, incluindo parâmetros viscoelásticos baseados em dados experimentais [39].

As etapas para a análise de um determinado fluxo nesse programa, envolvem aplicar uma malha a uma geometria e em seguida, definir modelos matemáticos pertinentes (por exemplo, modelo para fluido Newtoniano Generalizado, Viscoelástico, entre outros), especificar os materiais e suas propriedades, definir as condições de contorno do problema e especificar os controles de convergência da solução que melhor representem o problema a ser resolvido. Então, o Polyflow resolve as equações matemáticas e os resultados da simulação podem ser exibidos no CFD-Post para análise posterior (por exemplo, os resultados podem ser apresentados como contornos, vetores, linhas de fluxo, etc.) [38].

2.5.1 Simulação do processo de extrusão – Técnica MST

O ANSYS Polyflow® incorpora a técnica conhecida como superposição de malha (MST - *mesh superposition technique*) para simular fluxos transitórios com partes internas móveis. As aplicações incluem processos industriais, como tanques de agitação e extrusoras de rosca dupla.

A técnica de superposição de malha se destaca por gerar malha de maneira mais simples, já que nenhuma região complexa de entrelaçamento deve ser gerada [40]. Como limitações da técnica, é restrito a modelos 3D e 2D planar, descreve somete fluxo newtoniano generalizado, os resultados das velocidades nas regiões próximas aos elementos móveis são limitados (não são bem resolvidos) e como os limites físicos em relação aos limites dos elementos finitos não são correspondentes, para alguns elementos a equação da conservação de massa pode não ser satisfeita (implicando numa perda limitada de massa no volume de controle) [40].

Conforme Barrera, Vega e Martinez-Salazar (2008) [41]; e Salahudeen, *et al.* (2011) [40], a modelagem de partes internas móveis requer a modificação das equações de Navier-Stokes, da equação de conservação de massa e, possivelmente, da equação de energia.

As equações de Navier-Stokes são modificadas para se tornarem [42]:

16

$$H(\mathbf{V} - \overline{\mathbf{V}}) + (1 - H)(-\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho g - \rho a) = 0$$
(17)

onde *H* é uma função de passo, *V* é a velocidade, \overline{V} é a velocidade local da parte móvel, *p* é a pressão, *T* é o tensor tensão total, ρg é a força volumétrica e ρa é o termo da aceleração.

Na solução MEF, a Equação 17 é discretizada para cada nó da malha de elementos finitos. Para um nó da malha do fluido que estiver fora da parte móvel, então *H* é igual a 0 e as equações de Navier-Stokes usuais são adotadas [42]. Caso contrário, *H* é igual a 1 e a Equação 17 assume a seguinte forma:

$$V = \overline{V} \tag{18}$$

implicando em impor a velocidade local da parte móvel ao fluido em sobreposto.

Mais especificamente, antes de resolver as equações de Navier-Stokes, o campo interno H é calculado para o domínio de fluxo. Esse campo varia entre 0 e 1. Um subelemento que é sobreposto pela parte móvel tem um valor de Higual a 1, e um subelemento fora da parte móvel tem um valor de H igual a 0 [42] [40] [39].

Um dado nó, em uma posição *X*, é considerado dentro da parte móvel (isto é, H = 1) se H(X) for maior que um valor limite. O valor limite é geralmente igual a 0,6, o que indica que mais da metade dos subelementos vizinhos ao nó são sobrepostos pela parte móvel [41] [39].

Como a parte móvel é representada por meio de um domínio que se sobrepõe à região do fluido, a região do fluido experimentará apenas uma aproximação do limite real da parte móvel sólida [42].

A Figura 2.6 apresenta um elemento 2D dividido em 4 subelementos. Os subelementos que são sobrepostos pela parte móvel são marcados com um 1, e aqueles que estão fora da parte móvel são marcados com um 0 (zero). Os nós para os quais são indicados por círculos preenchidos.



Figura 2.5 - Divisão de um elemento 2D em subelementos na técnica MST. A linha verde representa a periferia da região rotante (rosca) que está imersa na malha que representa o fluido. Adaptado de [39].

2.5.2 Equação de conservação de massa

Para o cálculo de uma pressão fisicamente significativa, mesmo nas zonas onde ocorre a penetração geométrica (ou seja, para evitar os modos de pressão associados ao bloqueio do elemento), a equação de conservação de massa é modificada para se tornar [40]:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{V} + \frac{\beta}{\eta} \Delta p = 0 \tag{19}$$

onde β é um fator de compressão relativo e é a viscosidade local η .

O fator de compressão relativa é um aspecto fundamental da técnica de superposição de malha. Se houver picos de pressão em regiões onde existe um grande número de restrições geométricas, o fluido não pode ser considerado incompressível. Para evitar esses picos de pressão, a equação de conservação de massa é modificada para que o fluido seja ligeiramente compressível [40] [42].

A perda ou ganho de volume de fluido por unidade de tempo está ligada ao Laplaciano da pressão através do fator de compressão relativo. Se esse fator for muito pequeno, os picos de pressão aparecerão em pequenas regiões de contato, especialmente quando a malha é tão grossa que existe apenas um elemento entre as regiões limite e de contato [41].

Quando o fator de compressão relativo é muito grande, o fluido é compressível (desviando do comportamento físico habitual) e todos os gradientes de pressão serão suavizados, levando a uma previsão mais adequada da pressão [42]. No ANSYS® Polydata, o valor padrão de 0,01 foi

mostrado como a melhor escolha para este fator quando as condições de não escorregamento do fluido são consideradas ao longo das partes móveis [38].

2.5.3 Equação do balanço de energia

Para problemas de fluxo não isotérmico, é possível especificar que o Polyflow solucione um problema de condução de calor para a parte móvel a fim de gerar as condições de contorno térmico (alternativamente, se pode impor uma distribuição de temperatura fixa) [42] [39]. Ao resolver o problema de condução de calor, a equação de energia é modificada para ser:

$$0 = (1 - H) \left(\rho_f C_{pf} \frac{DT}{Dt} - r_f - T : \nabla V - \nabla \cdot (k_f \nabla T) \right) + H \left(\rho_s C_{ps} \frac{DT}{Dt} - r_s - \nabla \cdot (k_s \nabla T) \right)$$
(20)

onde ρ_f é a densidade do fluido, C_{pf} é o calor específico a pressão constante do fluido, r_f é a fonte de calor do fluido, k_f é a condutividade térmica do fluido, ρ_s é a densidade da parte móvel, C_{ps} é o calor específico a pressão constante da parte móvel, r_s é a fonte de calor da parte móvel e k_s é a condutividade térmica da parte móvel.

Para cada nó, se estiver fora da parte móvel, a função de passo H é igual a 0, a equação de energia com os parâmetros de fluido é utilizada. Caso contrário, H é igual a 1 e a equação de energia com os parâmetros da parte móvel é usada [38].

2.5.4 Interpolação

As funções de interpolação empregadas no ANSYS® Polyflow, por padrão, para fluxos com partes móveis são: As velocidades são quadráticas em 2D e lineares em 3D. As velocidades lineares, também, podem ser usadas em 2D. A pressão é constante em cada elemento, 2D e 3D; e as temperaturas são quadráticas em modelos 2D e lineares em modelos 3D [38].

2.5.5 Malha de elementos finitos

As malhas para o domínio de fluxo e as partes móveis devem conter elementos com aproximadamente o mesmo tamanho. A conformidade do elemento e a correspondência de nós não são necessários, ou seja, poderão ser de distintos tipos e de certos tamanhos [43].

É importante que a malha seja suficientemente fina em regiões de detalhes geométricos pequenos, caso contrário, a malha grossa suavizará os detalhes. Na folga entre a rosca e o barril, pelo menos dois elementos são recomendados na direção da espessura da folga. Picos de pressão, também, podem ser gerados devido a uma malha grosseira na direção angular [43].

2.5.6 Dependência temporal

Os problemas de fluxo dependentes do tempo são caracterizados pela presença de uma (ou mais) derivada de tempo nas equações básicas e são distintos dos problemas de estado estacionário e de evolução. Os problemas de fluxo dependentes do tempo podem ter taxas de fluxo de entrada dependentes do tempo, condições de contorno, parâmetros de material e assim por diante [43].

Problemas de fluxo dependentes do tempo são governados por um conjunto de equações diferenciais ordinárias:

$$M(X)\dot{X} + K(X)X + F(X) = 0$$
 (21)

que estão sujeitas às condições iniciais do tipo:

$$\mathbf{X}(t_0) = \mathbf{X}_0 \mathbf{a} \tag{22}$$

X é o vetor de incógnitas nodais tais como velocidade, pressão, temperatura, tensões viscoelásticas e localização de superfície livre. O símbolo \dot{X} denota a derivada temporal de X. As matrizes M e K são as matrizes de massa e rigidez, respectivamente, que podem depender de um vetor desconhecido. O vetor F corresponde à função de força volumétrica e às condições naturais de contorno [43].

As equações são resolvidas no ANSYS® Polyflow por meio de um procedimento envolvendo uma função de passo temporal parabólica [43]. Em vez de tentar satisfazer a Equação 21 em um tempo arbitrário, o software

21

calculará uma solução da Equação 21 para um conjunto de tempos discretos t_n , definido por:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{n} &= \mathbf{X}(\mathbf{t}_{n}) \\ \mathbf{t}_{n} &= \mathbf{t}_{n-1} + \Delta \mathbf{t}_{n} \end{aligned} \tag{23}$$

onde o subscrito n se refere ao passo do tempo.

Da Equação 21, a derivada de tempo $\dot{\mathbf{X}}$ pode ser obtida. Considerando a função $f(\mathbf{X})$:

$$f(X) = -M^{-1}(KX + F) = \dot{X}$$
 (24)

Uma aproximação de X é possível utilizando a fórmula:

$$\dot{\mathbf{X}} \approx \theta f(\mathbf{X}_{n+1}) + (1-\theta)f(\mathbf{X}_n), (0 \le \theta \le 1)$$
(25)

Ainda, empregando a discretização de primeira ordem na primeira derivada, temse que:

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}_{n+1}}{\Delta \mathbf{t}_n} \tag{26}$$

resultando em:

$$\mathbf{X}_{\mathbf{n}} = \mathbf{X}(\mathbf{t}_{\mathbf{n}}) \tag{27}$$

Diferentes valores de θ resultam em diferentes métodos de integração com diferentes atributos de precisão e estabilidade.

Fluxos dependentes do tempo podem ou não atingir uma solução de estado estacionário, dependendo dos parâmetros de fluxo e condições de contorno. Por causa da não-linearidade intrínseca da maioria dos problemas de fluxo, não é possível, em geral, prever se um fluxo transitório levará ou não a um regime de fluxo em estado estacionário [44].

No ANSYS® Polyflow, a dependência temporal de dados de materiais e condições de contorno é definida em termos de um parâmetro de tempo t. Os parâmetros numéricos para controlar o passo temporal são controlados pela convergência e precisão da técnica de integração no tempo [43].

2.5.7 Estratégia de solução

A seguir, é apresentada uma descrição da estratégia da solução implementada no ANSYS® Polyflow [43].

1- Calcula-se o valor previsto para X_{n+1} usando um esquema explícito:

$$\mathbf{X}_{n+1}^{p} = \mathbf{X}_{n} + \Delta \mathbf{t}_{n} \mathbf{X}_{n}$$
(28)

- 2 Então, calcula-se o valor correto de X_{n+1} empregando um esquema implícito:
 - a) Inicializando com:

$$\mathbf{X}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{X}_{n+1}^p \tag{29}$$

b) Resolvendo através de iteração o valor de X_{n+1} , com:

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\theta \,\Delta \mathbf{t}_{n}} + \mathbf{K}\right) \mathbf{X}_{n+1}^{s+1} = \mathbf{M} \left(\frac{\mathbf{X}_{n}}{\theta \Delta \mathbf{t}_{n}} + \frac{1-\theta}{\theta} \mathbf{X}_{n}\right) - \mathbf{F}_{n+1}^{s}$$
(30)

c) Se convergir, avança para a etapa 3. Caso contrário, divide Δt_n por 2 e retorna à etapa 1, a menos que seja menor que o tamanho mínimo definido para a etapa; nesse caso, o cálculo é encerrado.

 3 - Aceita ou rejeita o valor corrigido com base na precisão definida pelo usuário, da seguinte forma:

$$MAX_{i} = \left| \mathbf{X}_{i(n+1)} - \mathbf{X}_{i(n+1)}^{p} \right| < \frac{\varepsilon}{10}$$
(31)

Caso contrário, rejeita X_{n+1} e retorna ao passo 1.

4 - Estima o próximo passo de tempo usando a Equação 23. Compara o novo valor t_{n+2} com 1,5 Δt_{n+1} e mantém o menor valor.

5 - Volta ao passo 1 para a solução no instante $t = t_{n+2}$.

Estes passos são repetidos até que o limite de tempo superior Δt_n seja atingido, Δt_n esteja abaixo do tamanho mínimo previsto para o passo, ou o número máximo de passos bem sucedidos seja alcançado [43].

O método Galerkin é um método numérico mais preciso do que o método implícito de Euler. No entanto, ele pode gerar erros oscilatórios se o intervalo de tempo for grande, embora estes não sejam tão problemáticos quanto com o método de Crank-Nicolson [44].

2.6 Fundamentos da extrusão com dupla rosca

O processo de extrusão com rosca dupla (*twin screw extrusion* - TSE) é amplamente aplicado quando deseja-se processar materiais termoplástico de difícil manuseio como formulações poliméricas alimentadas na forma de pó de baixa densidade volumétrica e fácil degradação (ex.: PVC) ou na preparação de compostos (*compounding* – composição ou compostagem) de termoplástico com diferentes teores de reforços fibrosos (ex.: fibra de vidro, fibras naturais) ou cargas minerais (ex.: talco e CaCO₃), ou concentrados (*masterbach*) [45] [20].

Conforme Rauwendaal (2014) [2] a técnica que emprega a rosca dupla apresenta várias vantagens sobre as extrusoras de rosca única. Características de maior capacidade de transporte e uma melhor capacidade de mistura permitem o processamento de materiais diversos (pós, materiais com baixo coeficiente de atrito, entre outros) e produzem tempos de residência curtos além de uma distribuição estreita dos tempos de residência (*Residence Time Distribution - RTD*). Melhor mistura e maior área de troca térmica permitem bom controle da temperatura no processo, sendo estes elementos chave na extrusão de materiais termicamente sensíveis.

Segundo Tadmor e Gogos (2006) [20], maioria dos equipamentos baseados em rosca dupla na verdade executam as mesmas etapas elementares de processamento de polímeros que as extrusoras de rosca única (*single screw extruders*- SSE). No entanto, devido às interações únicas da rosca dupla, as quais estão ausentes em máquinas baseadas em rosca única, surgem mecanismos físicos adicionais que afetam primariamente e particularmente os passos elementares de fusão e mistura.

O processo pode ser classificado conforme os sentidos de rotação das roscas, onde é denominado co-rotacional quando ambas as roscas giram no mesmo sentido e contra-rotacional quando giram em sentidos opostos. Ainda, para a configuração contra-rotacional, são subclassificados, conforme as roscas se interceptem ou fiquem separadas de uma certa distância, como interpenetrantes (*intermeshing*) e não interpenetrantes (*non-intermeshing*), respectivamente [2]. Se a distância entre os eixos é menor que o diâmetro da rosca, as roscas são chamadas de interpenetrantes, enquanto roscas com uma distância entre os eixos iguais ao diâmetro da rosca são nomeados de não interpenetrantes [46].

Na Figura 2.6 apresenta-se um esquema das configurações de rosca dupla co-rotacional e contra-rotacional, além das configurações interpenetrantes e não interpenetrantes para a rosca dupla contra-rotacional.



Figura 2.6 - a) Rosca dupla co-rotacional interpenetrante; b) Rosca dupla contrarotacional interpenetrante; c) Rosca dupla contra-rotacional não interpenetrante. Adaptado de [47].

As extrusoras de rosca dupla co-rotacional, quando comparadas as extrudoras rosca única, apresentam maior ação de mistura devido as características do fluxo, e assim maior quantidade de material é exposta as paredes aquecidas do barril em função do polímero fundido tender a contornar todo o canal conferindo um maior controle e uniformidade da temperatura no processo [2]. Devido à presença de uma área aberta grande em relação à área obstruída no deslocamento do fundido, há relativamente pouca tendência para grandes picos de pressão se formarem na região intermediária entre roscas, permitindo, assim, o projeto de folgas relativamente pequenas entre as roscas conferindo a característica auto-limpante [46] [2]. Apresentam elevada produtividade, devido as pressões envolvidas serem mais moderadas, podendo, em determinadas situações, operar a 1400 rpm [2].

Quanto maior a relação entre os diâmetros interno e externo das roscas maior o volume livre e maior a profundidade de canal. Roscas com canais profundos tendem a reduzir a taxa de cisalhamento bem como diminuem as tensões desenvolvidas nos materiais [46].

O grau de deslocamento positivo do fluxo (em sentido a matriz), em rosca dupla, depende de quão bem o perfil de uma das roscas encaixa-se (fecha) ao perfil da outra rosca oposta [46] [2]. A eficiência desse fluxo positivo é diretamente afetada pelas folgas nas intercalações entre os perfis das roscas, inerentes às imperfeições geométricas das roscas e ou desalinhamentos na montagem do conjunto, e pelos consequentes vazamentos apresentados nessa região [2].

Segundo Rauwendaal (2014) [2], os perfis de velocidade nas extrusoras de rosca dupla são complexos e mais difíceis de descrever e inúmeros

pesquisadores estudaram o fluxo negligenciando a região interpenetrante (*intermeshing*). No entanto, as características de mistura e o comportamento geral do processo são determinados principalmente pelos fluxos de vazamento que ocorrem na região interpenetrante. Assim, resultados de análises que não consideram o fluxo na região interpenetrante têm limitada aplicabilidade prática. Por outro lado, análises que tentam descrever com precisão o fluxo na região intermediária podem facilmente se tornar muito complexas.

Giles, Wagnes e Mount-III (2004) [46], explicam que as extrusoras de rosca dupla co-rotatacional de alta rotação são usadas para a composição de resina com aditivos (corantes, enxertos, retardadores de chamas, reforços e estabilizadores), desvolatilização para remoção de solventes e extrusão reativa. Já as extrusoras de baixa velocidade co-rotacional e contra-rotacional são usadas para produzir perfis e tubos. Roscas dupla contra-rotacional são usadas para composição de PVC e outras resinas.

2.6.1 Elementos de rosca

Os elementos de rosca são caracterizados por apresentarem duas funções particulares, transporte e mistura [36]. São classificados em simétricos ou congruentes conforme a necessidade ou não de uma montagem com restrições de posicionamento em relação ao eixo de rotação. Os elementos simétricos podem ser montados em qualquer posição angular, já os elementos congruentes necessitam um posicionamento angular específico em relação ao eixo das roscas [36]

Em sistemas de extrusão rosca dupla ocorre um preenchimento parcial do barril durante a operação (*starved fed*), existindo regiões ao longo das roscas plenamente preenchidas e regiões parcialmente preenchidas. As regiões plenamente preenchidas são caracterizadas pela presença de elementos restritivos (ex. blocos de malaxagem e elementos com passo esquerdo), já as regiões parcialmente preenchidas são caracterizadas por fornecerem uma contribuição menor no aumento da temperatura, pressão, mistura e fusão em relação as regiões plenamente preenchidas.

2.6.1.1 Elementos de transporte

Os elementos de transporte têm como finalidade promover o deslocamento do material, nas mais diferentes formas (pallets, pós, fundido, entre outros), ao longo do tambor e em direção a matriz. A nomenclatura usual é passo/comprimento, de modo que um elemento 60/60 apresente 60 mm de passo e 60 mm de comprimento [46] [36].

Nestes elementos existem dois mecanismos de transporte para o fluxo, um caracterizando as regiões distantes da região de interpenetração e outro caracterizando as regiões de interpenetração. Nas regiões de não interpenetração o fluxo é consequência do atrito do material com as superfícies das roscas e do atrito do material com as paredes no barril. Já para as regiões de interpenetração os mecanismos são análogos aos presentes nas bombas de deslocamento positivo [36].

O número de filetes destes elementos de transporte interfere na capacidade de mistura e consequentemente na taxa de cisalhamento gerada. As roscas auto-limpates são caracterizadas por apresentarem geralmente um filete, enquanto para outras situações podem ser encontradas roscas com dois ou três filetes. Quanto maior o número de filetes maior a taxa de cisalhamento e menor a capacidade de transporte. Porém, a medida que se aumenta o número de filetes menores eficiências de alimentação e bombeamento são obtidas. Neste caso, por apresentarem uma maior percentagem de preenchimento diminuem as flutuações no fluxo [36].

A Figura 2.7 ilustra o efeito do número de filetes na composição dos fluxos parciais presentes no processo de extrusão rosca dupla co-rotacional interpenetrante, bem como ilustra a proporção de volume preenchido característico de cada uma das configurações.



Figura 2.7 - Efeito do número de filetes no desenvolvimento de fluxos secundários parciais. Adaptado de [36].

2.6.1.2 Elementos de mistura

Conforme Giles, Wagnes e Mount-III (2004) [46], a transição entre os elementos de rosca que apresentam passos variados promove contínuas expansões e compressões no fluxo do material, induzindo um efeito moderado de mistura do tipo distributiva. Neste contexto, existem acessórios ou elementos de rosca que promovem uma intensificação dos fluxos elongacionais e de cisalhamento melhorando a capacidade de mistura desses sistemas.

Os elementos mais comuns empregados no processo de extrusão com rosca dupla são os blocos de malaxagem, por apresentar elevada capacidade de mistura distributiva ou dispersiva. Contudo, outros elementos de mistura como misturadores segmentados, misturadores dentados, entre outros, são empregados neste intuito [46].

As variáveis que caracterizam os blocos de malaxagem estão relacionadas ao comprimento, ângulo de defasagem, número e largura dos discos, número de filetes e direção de transporte. São definidos pela seguinte especificação: ângulo de defasagem/número de discos/comprimento do elemento. Exemplo, um bloco especificado como 45/3/40 possui 40 mm de comprimento total, composto de 3 discos que estão defasados de 45° entre si [48] [46].

Os blocos de malaxagem compostos por discos mais estreitos são melhores para mistura distributiva, pois mais material escoa ao redor dos discos ao invés de fluir entre os discos e o barril. Já elementos com discos mais largos são melhores para mistura dispersiva, pois os elementos de malaxagem criam zonas de fluxo de alto cisalhamento nas arestas dos filetes e outras zonas predominantemente elongacionais antes das arestas dos filetes, implicando em mecanismos efetivos para quebrar aglomerados ou dispersar gotículas líquidas [49] [36].

Os mecanismos de mistura dispersiva e distributiva são apresentados por Kohlgrüber (2008) [36]. O mecanismo dispersivo consiste na separação do fluxo primário pela interrupção no escoamento na região do filete, induzindo fluxos secundários que promovem elevada capacidade de mistura. Já os mecanismos de mistura dispersiva se baseiam em altas taxas de cisalhamento nas arestas dos filetes e fluxos elongacionais nas vizinhanças das arestas dos filetes.

2.6.2 Teoria da similaridade para extrusão com dupla rosca

O melhor entendimento das funções físicas e dos métodos operacionais das extrusoras de dupla rosca co-rotantes é alcançado pela teoria da similaridade e sua aplicação a esses equipamentos. Tendo sua origem nos esforços de Pawlowski [50], que estabeleceu a base do conhecimento demostrando teoricamente e experimentalmente sua aplicação em extrusoras de rosca única plenamente preenchidas com fluido Newtoniano. Onde mais tarde, Kohlgräber e Wiedmann [36] estenderam e aplicaram esse conceito a extrusoras dupla rosca co-rotativas e fluidos pseudoplásticos.

Essa teoria estabelece um modelo empírico de valores característicos adimensionais dependentes que desempenham um papel importante no processo para ampliação ou redução de escala dessas extrusoras. Contudo, ainda, auxilia de modo assertivo na previsão e no controle do processo, mesmo que restrito a certas limitações inerentes ao modelo matemático e a complexidade dos fenômenos representados.

Neste modelo três importantes parâmetros adimensionais, associados a pressão, a eficiência de transporte e a potência demandada nas roscas extrusoras, são derivados do agrupamento de sete grandezas geométricas dimensionais conhecidas por descreverem a geração de pressão e o comportamento energético das extrusoras. As grandezas dimensionais

relacionadas neste modelo são (ver Tabela 1): Comprimento da rosca, diâmetro interno do barril, potência motriz, viscosidade do fluido, gradiente de pressão axial, velocidade angular da rosca e vazão volumétrica de fluido.

Tabela 1 – Parâmetros dimensionais do modelo de similaridade para extrusão com dupla rosca.

Símbolo	Descrição
L	Comprimento do elemento
D	Diâmetro interno do barril
Р	Potência motriz
η	Viscosidade
ΔP	Diferença de pressão axial
n	Velocidade angular
<i>V</i>	Vazão volumétrica

Já os três parâmetros adimensionais, derivados do agrupamento das grandezas dimensionais, estão representados nas Equações 32, 33 e 34.

$$\frac{V}{nD^3}$$
(32)

$$\frac{\Delta P.D}{\eta.n.L} \tag{33}$$

$$\frac{P}{\eta.\,n^2.\,D^2.\,L}\tag{34}$$

Estes grupos adimensionais são valores característicos do processo e se relacionam de forma linear para fluidos newtonianos, conforme demonstrado por Pawlowski [50]. Neste caso, o gradiente de pressão axial é linearmente correlacionado com a vazão, sendo descrito por um modelo empírico denominado "pressão característica". Da mesma forma, a potência motriz, requerida no acionamento das roscas, se relaciona linearmente com a vazão, agora sendo denominado de "potência característica". Essas relações estão representadas pelas Equações 35 e 36.

$$\frac{1}{A_1} \cdot \frac{\dot{V}}{n.\,D^3} + \frac{1}{A_2} \cdot \frac{\Delta P.\,D}{\eta.\,n.\,L} = 1$$
(35)

$$\frac{1}{B_1} \cdot \frac{\dot{V}}{n \cdot D^3} + \frac{1}{B_2} \cdot \frac{P}{\eta \cdot n^2 \cdot D^2 \cdot L} = 1$$
(36)

Onde A_1 e A_2 são constantes da pressão característica e nomeadas de "parâmetros de rosca", e B_1 e B_2 são constantes da potência característica nomeados de "parâmetros de máquina". A Figura 2.8 ilustra a relação linear apresentada nas curvas características de pressão e potência para fluidos newtonianos.





Os parâmetros de rosca ($A_1 e A_2$) representam os pontos de intersecção da reta correspondente a pressão característica com os eixos coordenados. A interceptação A_1 identifica a taxa de transporte inerente ao elemento da rosca extrusora, ou seja, a taxa de transporte de material por rotação que o elemento pode alcançar se estiver completamente cheio e for operado sem contrapressão. A interceptação A2 identifica a capacidade de geração de pressão para a vazão zero, ou seja, quando o fluxo é totalmente restrito. Da mesma forma, os parâmetros de máquina ($B_1 \ e B_2$) representam os pontos de intersecção da reta correspondente a potência característica com os eixos coordenados.

Kohlgräber [36] apresentou uma interpretação para a melhor compreensão dos grupos adimensionais. Conforme o autor, o valor da característica da taxa de fluxo representa a capacidade de transporte de material por revolução da rosca e está relacionado ao volume da extrusora que é representado pelo cubo do diâmetro interno do barril. Assim, este valor estabelece um status do fluxo que é independente do tamanho da máquina. Como a pressão em um elemento de rosca pode ser aumentada quanto maior a viscosidade do polímero, maior a velocidade angular e mais longa a seção da rosca, é natural que o valor da pressão característica esteja relacionado a essas variáveis. O parâmetro se torna adimensional, multiplicando-o pelo diâmetro. A potência caraterística, que é adimensional, é formada usando as mesmas variáveis de referência da pressão característica. Pode-se, então, deduzir que a entrada de potência é proporcional à viscosidade do material e à seção da rosca em consideração, bem como ao quadrado da velocidade de rotação e ao quadrado do diâmetro. Para isso, a potência é determinada a partir do torque, resultante das tensões de cisalhamento na parede, requerido nos eixos das roscas.

2.7 Conceitos sobre Manufatura Aditiva (MA) por extrusão

A Manufatura Aditiva, popularmente conhecida como Impressão 3D, consiste em um conjunto de tecnologias capazes de produzirem objetos físicos a partir de modelos 3D virtuais, utilizando como princípio de construção a deposição seletiva de material camada a camada. Existem diferentes tipos de técnicas MA, as quais são classificadas, principalmente, em função dos mecanismos responsáveis pelo processo de formação das camadas das peças

impressas [52] [53]. De acordo com a norma ASTM F2792-12a (2012) [54], essa categorização pode ser feita em sete famílias, conforme mostrado na Figura 2.9.

Além da diferença em relação aos sistemas de formação de camadas, as técnicas de MA se diferenciam também no estado inicial e tipos de materiais, volume de construção, velocidade de processamento, qualidade final das peças, entre outros. Entretanto, apresentam semelhanças quanto ao planejamento do processo de construção [55] [56], cujo escoamento de etapas é apresentado na Figura 2.10.

Conforme mostrado na Figura 2.10, os processos MA têm início com um modelo 3D, o qual pode ser obtido a partir da modelação clássica em *softwares* CAD, por técnicas de levantamento de formas (engenharia reversa), ou mesmo pelo *download* em repositórios online. Em seguida, o modelo 3D deve ser convertido para um formato capaz de ser lido pelos sistemas CAM dos equipamentos MA. O tipo de arquivo mais utilizado é o ".STL", contudo, outras opções como o ".OBJ", ".AFM "e ".3MF" também podem ser utilizadas. Dispondo do arquivo convertido, a próxima etapa é a programação da construção das peças, que se dá no *software* de fatiamento (CAM). Esta ferramenta dividirá a estrutura em uma série de camadas, com base no ajuste de parâmetros de processamento, específicos de cada tecnologia MA, definidos pelo usuário. Um conjunto de dados será produzido e enviado para o equipamento de impressão, que realizará a fabricação dos objetos [51] [52].



Figura 2.9 - Categorias e variações de técnicas aditivas. Adaptado de [57].



Figura 2.10 – Etapas dos processos MA. Adaptado de [58].

Os equipamentos de fabricação aditiva por extrusão constituem o grupo mais popular de tecnologias de Manufatura Aditiva. A técnica mais conhecida neste cenário é a Modelagem por Fusão e Deposição (FDM), desenvolvida pela empresa Stratasys[®] (Figura 2.11). Com a expiração das patentes do processo FDM (*Fused Deposition Modeling*), juntamente com os avanços dos movimentos de código aberto, as impressoras 3D baseadas neste princípio passaram a se

tornar mais acessíveis (máquinas e materiais de baixo custo) a um vasto grupo de usuários, técnicos ou não, dentro de um conceito que que passou a ser denominado Fabricação por Filamentos Fundidos (FFF) [59].



Figura 2.11 - Esquemático do processo FDM/FFF. Adaptado de [59].

No modelo clássico do processo FDM/FFF, Figura 2.11, um material na forma de filamento, geralmente um termoplástico, é utilizado para construir as peças. A primeira parte do cabeçote de extrusão dispõe de um par de polias, responsável por tracionar o filamento, que se encontra enrolado em uma bobina, e empurrá-lo ao longo de um canal de alimentação até a zona de aquecimento. Nesta região, o material sofre uma transformação do seu estado sólido para um semi-líquido ou pastoso. O próprio filamento, ao ser tracionado, atua como um êmbolo na entrada do cabeçote, gerando a pressão necessária para expulsar a massa de material aquecida através de um bico calibrado. Enquanto deposita o material sobre a plataforma de construção, ou uma camada já fabricada, o cabeçote extrusor percorre trajetórias ao longo dos eixos X e Y, de acordo com o desenho do objeto e os parâmetros de preenchimento. Após a construção de uma fatia, a plataforma de construção move-se para baixo em Z, com incrementos equivalentes à espessura de uma camada [60] [61] [50] [62]. Uma síntese dos principais materiais aplicados nesta tecnologia é apresentada na Figura 2.12.





A qualidade final das peças produzidas por FDM/FFF é determinada por uma série de fatores de influência que compreendem: qualidade do modelo 3D, material, equipamento (temperatura do bico, diâmetro do bico, calibração do processo), fatores ambientais, orientações de construção e parâmetros de processo [64]. Os sistemas de extrusão não se restringem ao mecanismo FDM, mas com uso de outros mecanismos de extrusão entre eles os mecanismos por êmbolo ou rosca — Figura 2.13 (b) e (c) respectivamente.



Figura 2.13 – Mecanismos de extrusão por filamento (a), êmbolo (b) e rosca (c). Adaptado de [66].

Estes últimos, permitem o beneficiamento de matérias-primas como pastas cerâmicas, alimentícias, hidrogéis, polímeros na forma de pós ou *pellets*, termoplásticos difíceis de serem transformados em filamentos, entre outros [67] [52] [66] [68] [69].

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Esta seção descreve os materiais utilizados para a modelagem numérica: a) envelope geométrico do para barril-roscas e suas restrições de montagem e operação, bem como o equipamento customizado [10] [69] do qual faz parte; b) matéria-prima sob a forma de pó (PP-Polipropileno).

Os métodos compreendem: a) a caracterização das propriedades físicas do PP RP141, b) análises computacionais do perfil térmico do barril e c) do fluxo no cabeçote de impressão.

3.1 MATERIAIS

3.1.1 Equipamento customizado de uma mini extrusora rosca dupla

A Figura 3.1 apresenta o equipamento modularizado Co-TSE [10] [70], composto de três subsistemas: i) unidade de extrusão; ii) unidade de acionamento e iii) unidade estrutural e posicionamento cartesiano e a Figura 3.2, o protótipo funcional [10] [47].



Figura 3.1 - a) Sistema Co-TSE para manufatura aditiva (MA). b) Subsistemas principais. Adaptado de [10].



Figura 3.2 - Equipamento modularizado Co-TSE. a) posição de operação; b) posição de manutenção. Fonte: Adaptado de [10].
A unidade de extrusão compreende rosca dupla (co-rotativos), cilindro, aquecedores resistivos, bocal e alimentador volumétrico. Os parafusos tem relação comprimento/diâmetro (L/D) de 11, diâmetro externo de 12 mm e profundidade máxima de canal de 1,8 mm. São montados a partir de elementos individuais modulares posicionados axialmente ao longo de um eixo hexagonal. Estes incluem elementos de transporte com várias combinações passos/comprimentos (20/40, 20/20, 15/40, 15/20, 10/35, 10/30 e 10/20) e discos de malaxagem com 3 mm de espessura que podem ser montados para formar blocos de malaxagem. Os primeiros transportam o material a jusante a taxas diferentes, afetando assim os tempos de residência locais, o grau de enchimento do canal e a transferência de calor. Os discos amassadores podem ser escalonados em ângulo positivo ou negativo, induzindo assim diferentes níveis de mistura distributiva/dispersiva, bem como tempos de residência e dissipação viscosa.

Conforme ilustrado na Figura 3.3, a configuração da rosca adotada no sistema compreende dois blocos de cisalhamento (malaxagem) separados por elementos transportadores, o que é típico deste tipo de extrusora.



Figura 3.3 – Esquema ilustrando a geometria do barril do cabeçote de extrusão dupla rosca e a localização e os limites das zonas de processamento do sistema para uma dada composição das roscas. Fonte: Elaborado pelo autor.

O barril é segmentado para facilitar a fabricação e montagem. O segmento do barril mais próximo a unidade de alimentação contém uma rampa de que direciona o material do alimentador para as roscas. A parte inferior é separada do segmento de barril adjacente por uma barreira isolante de politetrafluoretileno (PTFE), a fim de evitar a fusão prematura do polímero, enquanto a parte superior permite a fixação do conjunto de barril à estrutura.

A capacidade volumétrica máxima do barril é de 31 cm³. O bico de extrusão intercambiável é rosqueado no segmento do barril a jusante. O alimentador volumétrico inclui uma rosca de 45 mm de comprimento e com diâmetro de 12 mm, um barril tubular, uma tremonha com capacidade de armazenamento de 75 cm³ e um motor de passo Nema 17 (modelo US17H4401, fabricado pela Usongshine Inc., China).

Na unidade motora, o redutor é acionado por um motor de passo NEMA 23 (modelo KTC-HT23–401, Kalatec Automation, Brasil) acoplado a um redutor de velocidade planetário (PEII 050–010, da Apex Dynamics Inc., EUA), com velocidade Nin 10:1. A relação de transmissão suportando um torque máximo de 18 N·m. O torque estimado disponível para cada rosca para diferentes velocidades, desprezadas as perdas na transmissão, é apresentado na Tabela 2.

Tabela 2 – Torque estimado a diferentes velocidades angulares das roscas. Adaptado de [10].

Velocidade angular das roscas (rpm)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Torque por rosca (N.m)	9,0	7,5	6,5	4,5	4,0	3,5	3,5	2,5	1,5	1,0

É importante destacar que devido a restrições de projeto e considerações de saída, o Co-TSE miniaturizado tem uma relação comprimentodiâmetro (L/D), uma faixa de velocidade de rotação da rosca, taxa de alimentação e torque disponível que são bastante diferentes das máquinas maiores típicas empregadas para operações de composição de polímeros. Portanto, no projeto de tal sistema é prudente verificar através de simulações se o cenário termomecânico proporcionado é compatível ao requerido no processamento do polímero. Para tanto, foi utilizado o programa global de modelagem de plastificação para Co-TSE desenvolvido e validado por Teixeira et al. [4] baseado em modelo 1D.

Dessa forma, estudar o fluxo nestas condições, onde as dimensões são significantemente inferiores às comumente adotadas na extrusão rosca dupla, permitirá avaliar a carga térmica (calor fornecido pelas resistências térmicas e calor gerado devido ao fluxo cisalhante) e compará-lo ao previsto no projeto através de soluções analíticas e dados experimentais, auxiliará na orientação de possíveis ajustes de parâmetros de operação ou alterações na geometria do barril/rosca, que são de importância para o controle do processo.

No projeto do cabeçote [12], as técnicas adotas para a definição da geometria do bico de impressão (matriz) não consideraram as variáveis térmicas envolvidas (aquecimento viscoso e a transferência de calor com a parede da matriz e o meio externo) o que poderá conduzir temperaturas de deposição inapropriadas para o processo. Nesse sentido, talvez seja necessário prever a carga térmica de sistemas de ajuste de temperatura (resfriamento/aquecimento) para corrigir estes desvios da temperatura na região próxima a cabeça de deposição.

Enfim, o estudo aqui proposto visa ampliar a compreensão do fluxo PP virgem no sistema miniaturizado rosca dupla pelo emprego de simulações computacionais, baseadas no Método dos Elementos Finitos (MEF), com vistas na avaliação dos perfis térmicos ao longo do sistema, da temperatura e efeito inchamento do extrudado, do tempo médio de residência do polímero no sistema. Propor condições de operação que atendam às especificidades do processo FFF, além de permitir avaliar a necessidade do uso de sistemas de aquecimento/resfriamento (para um fino controle da temperatura do extrudado), conforme requerido na impressão 3D.

3.2 Fluxograma de eventos

O estudo proposto é dividido em três etapas fundamentais: caracterização do PP, simulações computacionais e validações teóricas/experimentais. Cada uma das etapas é coerentemente dividida em sub etapas que estão inter-relacionadas, organizadas na forma de um fluxograma e apresentadas na Figura 3.4.



Figura 3.4 - Fluxograma das etapas para a solução do problema proposto. Fonte: Elaborado pelo autor.

3.3 Simulação computacional – análise térmica

3.3.1 Delimitações

O estudo inicia-se na preparação dos modelos geométricos 3D do cabeçote apresentado por (NETTO, 2019), utilizando o programa Solidworks 2020. Aqui, são modeladas duas configurações geométricas de barril, uma representando a geometria em uma primeira interação projetiva, para fins de validação das hipóteses empregadas nas simulações e a geometria correspondente a concepção final do sistema.

Na sequência são especificadas as condições físicas para representação apropriada do problema, tal como a natureza dos fenômenos térmicos envolvidas no processo, estabelecendo as hipóteses das análises, as quais serão apresentadas posteriormente. Com o modelo computacional adequado e as condições de contorno definidas, pode-se prosseguir para as simulações.

A análise da independência do tamanho de malha adotada na simulação CFD, quanto as grandezas de interesse, ocorre juntamente com as primeiras simulações, de forma que malhas iniciais são estipuladas e refinadas até que não se verifiquem mais alterações significativas nas grandezas estudadas, para assim, seguir com as demais simulações.

Uma vez que as condições de contorno adotadas no modelo podem ou não estar representando apropriadamente o fenômeno estudado, uma comparação dos resultados do modelo com uma condição experimental conhecida é proposta. Com esta verificação será possível ajustar as condições de contorno adotadas no modelo, quando constadas disparidades com os dados experimentais.

Para a validação das análises a partir dos dados experimentais, realizase a simulação representando o barril aberto de uma configuração primária, já que se dispõe dados de imagem de câmera termográfica desta condição. Uma vez que os resultados não correspondam aos dados experimentais, as condições de contorno são alteradas, de forma que estas, quando comparadas a situação instrumentada, sejam satisfatórias. Tendo em vista que as diferentes zonas de extrusão devem possuir temperaturas distintas, é necessário estudar alternativas para controle da temperatura na zona de alimentação, onde deve-se evitar a fusão prematura do polímero. Para isso, é analisado a geometria de cabeçote em sua configuração final com a adição de um material isolante separando a zona de alimentação das demais zonas, de forma que as mesmas possam manter suas temperaturas adequadas conforme as características do processo de extrusão requerem.

Ao final, são propostas alterações deste modelo de MA, visando a melhoria do mesmo e respeitando as condições geométricas pré-estabelecidas nos estudos anteriores, de forma que não interfira na funcionalidade dos demais componentes. são analisadas as temperaturas desenvolvidas no entorno das paredes que formam os canais de extrusão, certificando-se que cada região apresentará as temperaturas apropriadas ao processo.

3.3.2 Geometria do barril

A geometria do cabeçote de extrusão alvo das análises térmicas, denominada aqui de Configuração I, é formada por um par de blocos modulares simétricos, onde suas dimensões fundamentais correspondem a 70 x 34 x 162 mm. O modelo 3D que representa o conjunto de elementos que formam o cabeçote extrusor está representado na Figura 3.5. Esse cabeçote é composto basicamente por bocal (matriz), luva do bocal, corpo do barril (em módulos) e bloco de isolamento térmico.



Figura 3.5 – Vista explodida dos componentes que constituem os módulos que formam o cabeçote extrusor na configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor.

Uma outra versão do cabeçote também é estudada, denominada de Configuração II, trata-se de uma versão para testes que foi fabricada durante o processo de desenvolvimento do sistema proposto por Justino Netto (2022) [10] e instrumentada as temperaturas. Essa versão serve para uma validação prévia das hipóteses adotadas nas simulações computacionais. As dimensões fundamentais bem com o modelo 3D que representa essa configuração de cabeçote está representado na Figura 3.6.



Figura 3.6 - Vista explodida dos componentes que constituem os módulos que formam o cabeçote extrusor na configuração II. Fonte: Elaborado pelo autor.

Em ambos, conjuntos (configurações I e II), o barril de extrusão é fabricado em aço inox AISI 302. Para a configuração I, além dos blocos que formam o barril em aço inox, o bocal e a bucha são de cobre e o bloco de isolamento térmico é de teflon. As propriedades térmicas destes materiais serão apresentadas no decorrer da descrição das análises CFD.

As resistências térmicas empregadas no aquecimento do sistema são de mica, do tipo "coleira", posicionadas em torno do cabeçote, de forma que envolvem a maior parte de sua superfície. As características destas resistências, tais como geometria e posicionamento, são apresentadas no decorrer do presente capítulo.

3.3.3 Sistema de aquecimento do barril

Nas simulações térmicas computacionais, para representar os sistemas de aquecimento do cabeçote, são consideras as dimensões e potências das resistências adotadas no cabeçote extrusor proposto por Justino Netto (2022) [10]. Esses aquecedores possuem larguras de 40 e 25 milímetros em formato

"U", sendo que 2 pares de 40mm são posicionados sequencialmente da extremidade do barril, correspondente a zona de descarga, em direção à zona de alimentação, seguido de um par de 25mm. Os posicionamentos das resistências em relação ao barril podem ser observados na Figura 3.7 para ambas as configurações.



Figura 3.7 – Nomenclatura adotada e disposição dos pares de aquecedores resistivos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para melhor apresentação das informações, os aquecedores serão abreviados, no texto em diante, por "AC" seguido de "*under line*" e sua correspondente numeração, em algarismos romanos. Por exemplo, o conjunto de aquecedores I será tratado pela abreviação correspondente a AC_I.

As potências nominais dos conjuntos de aquecedores são informadas na Tabela 3, para ambas as configurações abordadas nos estudos.

Tabela 3 – Potências nominais dos conjuntos de aquecedores resistivos. Fonte: Adaptado de [10].

MODELO	AC_I (W)	AC_II (W)	AC_III (W)
Configuração I	25	25	15
Configuração II	12,5	12,5	7,5

3.3.4 Propriedades térmicas dos materiais do barril

As propriedades físicas de interesse nesta etapa são as propriedades térmicas dos materiais utilizados na construção dos cabeçotes nas configurações I e II (ver Seção 3.3.2), que são o calor específico (C_p) e a condutividade térmica (k). Essas propriedades, obtidos de Bergman e Lavine (2019) [71], estão apresentados na Tabela 4.

Tabela 4 – Propriedades térmicas dos materiais que constituem o barril. Fonte: Adaptado de [71].

Material	$C_p(\frac{J}{kg.K})$	$k\left(\frac{W}{m.K}\right)$
Aço Inox AISI 302	480	401
Cobre	385	15,1
PTFE (Teflon)	1050	1,4

3.3.5 Configuração da dupla rosca

Conforme já discutido, em um processo de extrusão pode-se utilizar diversos tipos de rosca. Para o presente estudo será considerado um modelo de dupla rosca modular constituída de blocos de elementos de diferentes funções, conforme proposto por Justino Netto (2018) [70], que apesar de não serem representadas no estudo térmico, delimitam o material, as zonas e as temperaturas de processo.

Estes elementos são escolhidos de acordo com a zona em que o fuso opera, sendo que estas modificam o fluxo, taxa de compressão, taxa de cisalhamento e mistura do material extrudado. Assim, em cada zona de extrusão as temperaturas de processo são distintas para corroborar com as características desejadas do material final. Na Figura 3.8 é apresentado uma vista longitudinal do perfil de rosca utilizada no cabeçote estudado. Os módulos de elementos que compõe a rosca, na Figura 3.8 da esquerda para direita, são: 20/40, -60/15/5, 15/40, -60/15/5 e 10/20.



Figura 3.8 – Esquema ilustrando as zonas de processamento para a configuração da dupla rosca adotado no conceito inovador de cabeçote extrusor para sistemas de impressão 3D. Adaptado de [10].

Nota-se que elementos intensificadores de mistura estão dispostos nas zonas de plastificação e mistura (elementos de malaxagem), e nas demais zonas apenas elementos de transporte positivo com passos distintos.

3.3.6 Perfil de temperaturas no barril

Um perfil de temperaturas desejadas para o processo deve ser levado em consideração para configurar as resistências de aquecimento. Aqui, tais temperaturas correspondem as temperaturas recomendadas para o processamento a uma classe de PP genérico. Este perfil pode ser resumido em 3 principais temperaturas distribuídas entre as zonas de processamento, já apresentadas anteriormente.

Na zona de plastificação, o material deve entrar a uma temperatura de no máximo 50°C, a qual deve se elevar até 180°C até a entrada da zona de descarga. Uma vez na zona de descarga, o material deve ser aquecido até 220°C, e assim prosseguir para o bico de extrusão e consequente deposição [70].

Porém, devido a esbelteza do cabeçote aborda-se no estudo a possibilidade de se manter a temperatura de 220°C ao longo das distintas zonas da rosca e controlar apenas a temperatura na zona de alimentação para não exceder os 50°C. Tal hipótese, refere-se a curta distância que o material percorrerá da zona de alimentação até o bocal de deposição e assim resultando em um menor tempo para trocar calor com o barril.

3.3.7 Hipóteses de estudo

Nesta etapa é fundamental estabelecer as condições físicas que representem apropriadamente os fenômenos térmicos envolvidos no aquecimento e operação do cabeçote extrusor. O primeiro passo trata da definição do regime do processo, bem como estabelecer os mecanismos de transferência de calor pertinentes ao problema a ser resolvido.

Para descrever o processo de aquecimento e operação do cabeçote, duas etapas podem ser delineadas. Num primeiro momento inicia-se o processo de aquecimento do barril com o acionamento das resistências (aquecedores), o que caracteriza um evento transiente de transferência de calor. As temperaturas aumentam progressivamente e são monitoradas ao longo das zonas de processamento. Quando se estabelecem as temperaturas de operação, o sistema de controle inicia um processo intermitente de acionamento e desligamento dos aquecedores, flutuando as temperaturas em uma margem estreita e controlada para que as mesmas correspondam as requeridas ao processo. Assim, quando os sistemas eletrônicos começam a atuar o processo passa de transferência de calor passa a se comportar como um regime transiente periódico.

Para melhor compreensão das hipóteses adotadas nos estudos, é estabelecido um modelo para representar os mecanismos de transferência de calor assumidos nas simulações. Na Figura 3.9 está representado o esquema com as parcelas de calor que são consideradas nas simulações numéricas.



Figura 3.9 – Modelo representativo das parcelas de calor trocadas no processo de aquecimento e operação do cabeçote extrusor. Vermelho representa parcelas transferidas por condução e azul representam parcelas transferidas por convecção. Fonte: Elaborado pelo autor.

Nesse modelo, calor é transferido dos aquecedores ao barril. O barril transfere parcela do calor recebido, por condução, ao bocal e ao polímero. Uma outra parte do calor recebido pelo barril é transferido por convecção natural ao ar circundante a temperatura ambiente. O polímero apesar que receber parcela de calor do barril, também gera calor devido aos efeitos do aquecimento viscoso. Esse calor, conforme a literatura, está na ordem de aproximadamente 80 % do calor que o próprio polímero necessita para aquecer e fundir, implicando que a parcela de calor referente ao barril pode ser aproximada como 20% do calor necessário para aquecer e fundir o polímero. As roscas devem receber alguma parcela de calor tanto do polímero como do barril, porém após atingir as temperaturas de processo a parcela de calor para manter sua temperatura poderá ser desprezada em comparação as demais. Como o bocal está em contato com ar circundante e haverá uma diferença de temperaturas, uma parcela de calor do bocal, também, será transferido por convecção ao ar circundante, porém deverá ser pequena em comparação a convecção que ocorre no barril, uma vez que a área superficial é muitas vezes menor.

Disto, para as simulações computacionais, são formadas algumas hipóteses, as quais são:

condução térmica nos sólidos que constituem o cabeçote (irradiação desprezada);

 convecção natural do material do barril com o ar externo (paredes internas e externas), determinação dos coeficientes convectivos por correlações já conhecidas da literatura;

 imposição de um fluxo de calor, das paredes internas dos canais de extrusão, representando 20% da energia necessária para aquecer e fundir o polímero, uma vez, considerando-se que 80% do calor necessário para aquecer e fundir o material é resultante dos efeitos do aquecimento viscoso;

• são desprezadas as transferências de calor nas roscas;

 aquecimento das resistências é representada por uma relação condicional a fim de representar a operação intermitente das mesmas que ocorre devido ao controle de temperaturas do processo;

• rugosidade superficial dos materiais desprezada;

• são desprezados os efeitos da ação da gravidade.

3.3.8 Estimativa do calor para fusão do PP

O calor para aquecer e fundir o PP, no cilindro de extrusão, até a temperatura de processamento, pode ser dividido em três parcelas distintas:

- 1° parcela: Calor necessário para aquecer o PP sólido da temperatura ambiente (20°C) até a temperatura de fusão (170°C);
- 2° parcela: Calor de fusão requerido para mudança da fase sólida para a líquida;
- 3° parcela: Calor necessário para aquecer o PP fundido (170°C) até a temperatura de processamento (220°C).

Assim, o calor transferido ao PP resulta da adição de duas parcelas de calor sensível e uma parcela de calor latente, que podem ser descritas, em termos de taxas, da seguinte forma:

 $\dot{Q} = \dot{m}C_{s \circ lido} \Delta T$ (Calor sensível solido) $\dot{Q} = \dot{m}C_{Fundido} \Delta T$ (Calor sensível fundido) $\dot{Q} = \dot{m} \Delta H_{fusão}$ (Calor latente de fusão) Onde: \dot{m} é a vazão mássica de polímero em kg/s; $C_{sólido}$ é o calor específico da fase sólida em J/kg.K; $C_{Fundido}$ é o calor específico da fase fundida em J/kg.K; ΔT é a variação de temperatura em K e $\Delta H_{fusão}$ é a entalpia específica de fusão do polímero em J/kg.

Considerando que propriedades térmicas do PP RP141 assumem os valores descritos na Tabela 5.

Proprieda	des		PP	Unidades
Calor	Sólido	C _{sólido}	2480	l/ka k
Específico	Fundido	$C_{Fundido}$	2950	Ј/КВ.К
Calor Latente	e de Fusão	ΔH _{fusão}	60000	J/kg
Temperatura	ı de Fusão	T _m	170	°C

É possível estimar o calor que deverá ser fornecido ao polímero pelas resistências térmicas, para uma hipótese onde desconsidera-se o efeito de aquecimento viscoso e assume-se que os calores específicos são independentes da temperatura. Assim, o fluxo de calor demandado no processo, para uma vazão $\dot{m} = 0.04 \ kg/hr$ de PP, pode ser avaliado:

$$\dot{Q} = \dot{m}C_{solido}\Delta T + \dot{m}\Delta H_{fusão} + \dot{m}C_{Fundido}\Delta T$$
$$\dot{Q} = \left[\frac{0.04 \frac{kg}{hr}}{3600 \frac{s}{hr}} x \ 2480 \frac{J}{kg.k} x \ 150 \ K\right] + \left[\frac{0.04 \frac{kg}{hr}}{3600 \frac{s}{hr}} x \ 60000 \frac{J}{kg}\right]$$
$$+ \left[\frac{0.04 \frac{kg}{hr}}{3600 \frac{s}{hr}} x \ 2950 \frac{J}{kg.k} x \ 50 \ K\right]$$
$$\dot{Q} = 6.4283 \ W$$

Como o material acumula-se no interior do barril, a hipótese de considerar o fluxo ao longo do barril constante e igual ao fluxo correspondente ao da alimentação pode ser grosseira e não representar apropriadamente o fluxo de calor demandado no processo. Porém, é esperado que o fluxo no bocal seja maior que o fluxo acumulativo que ocorre no interior do barril, assim as taxas de transferência de calor avaliadas, nesta situação, tendem a ser mais elevadas do

Se considerar um cenário hipotético onde o bocal é obstruído, impedindo o fluxo de saída, o polímero começaria a acumular no barril até que o volume livre fosse preenchido em sua totalidade. Esse volume de polímero ficaria retido no barril trocando calor. O fluxo de calor cessaria quando as temperaturas da parede do barril se equilibrassem com as temperaturas do polímero. Assim, surge outro cenário, onde o barril, completamente preenchido, e busca-se responder qual é calor necessário para aquecer essa massa de PP acumulada, de 20°C até 220°C.

O volume de material V_{PP} no interior do barril, neste caso, é correspondente ao volume livre V_{livre} das roscas. Sabendo que a área livre A_{Livre} é de 68,46 mm² e o comprimento das roscas é de L = 130mm, assim:

$$V_{PP} = V_{livre} = A_{Livre}L$$
$$V_{PP} = 68,46 \ x \ 130 = 8899,8 \ mm^3 = 8,89 x 10^{-6} m^3$$

Considerando a densidade do PP igual a 740 kg/m^3, a massa de PP a ser aquecida é de 6,5786 g. Assim, pode-se estimar o calor necessário para aquecer essa massa, da seguinte forma:

$$Q = mC_{s\delta lido}\Delta T + m\Delta H_{fusão} + mC_{Fundido}\Delta T$$

$$Q = \left[6,5786x10^{-3}kg \ x \ 2480 \ \frac{J}{kg.k} \ x \ 150 \ K\right] + \left[6,5786x10^{-3}kg \ x \ 60000 \ \frac{J}{kg}\right]$$

$$+ \left[6,5786x10^{-3}kg \ x \ 2950 \ \frac{J}{kg.k} \ x \ 50 \ K\right]$$

$$Q = 3812,29 \ J$$

Como as análises envolvem escoamentos de massa, é conveniente tratar este total de calor na forma de uma taxa de transferência de calor. Dessa forma é possível estimar o tempo médio de residência do polímero, numa condição de canal plenamente preenchido para um fluxo mássico pelo bocal equivalente a 0,04 kg/h (que para a densidade de 740 kg/m³, representa uma vazão volumétrica de 1,5013e-8 m³/s), pela seguinte relação:

$$t_{médio} = \frac{V_{livre}}{\dot{V}}$$
$$t_{médio} = \frac{8,89x10^{-6}m^3}{1,5013x10^{-8}\frac{m^3}{s}}$$

$$t_{médio} = 592,15 s$$

Conhecendo o tempo médio de permanência do polímero no barril, a taxa de transferência de calor correspondente a este tempo de residência é dada por:

$$Q = Q/t_{médio}$$

$$\dot{Q} = \frac{3812,29 J}{592,15 s}$$

$$\dot{Q} = 6,4380 W$$

Este valor está muito próximo ao da primeira hipótese e pode ser explicada ao fato de o polímero, quando o cilindro está completamente preenchido, acarretar em aquecer uma quantidade consideravelmente maior de material, o tempo que este reside no interior do barril é muito maior do que se considerássemos que o material fluísse a mesma taxa de fluxo do bocal.

Cabe destacar que uma parcela de aproximadamente 20% do calor necessário para aquecer e fundir o material será provido pelos aquecedores, o restante é resultado dos efeitos de aquecimento viscoso inerentes as condições do escoamento do material através do barril e roscas [35]. Assim, considera-se para fins de cálculos, uma boa aproximação, adotar nas simulações computacionais um fluxo de calor correspondente a 1,29 W para representar o calor fornecido do barril ao polímero processado.

3.3.9 Estimativa do tempo de aquecimento do barril (Regime transiente)

Uma simples estimativa do tempo de aquecimento do cabeçote, em função da potência de aquecimento, tanto para estabelecer valores de referência para o projeto bem como para as análises CFD transientes, pode ser estabelecido a partir dos fundamentos da termodinâmica e algumas hipóteses simplificadoras.

Se considerar que todo o calor proveniente das resistências (aquecedores) é transferido, em sua totalidade, para e somente ao barril, podese pela primeira lei da termodinâmica estabelecer uma previsão do tempo para aquecer o barril da temperatura ambiente (20°C) até a temperatura de processo do PP (220°C). Ainda, considerando, por simplicidade, que toda massa do barril alcançará a temperatura de processo pode-se estimar o calor necessário para que o barril alcance a temperatura de processo.

$$Q_{barril} = m_{barril}C_p(T_{proc} - T_{amb})$$

onde Q_{barril} representa o calor necessário para aquecer o barril, m_{barril} é a massa do barril, C_p é o calor específico do material do barril, T_{proc} é temperatura de processo e T_{amb} é a temperatura ambiente.

Dessa hipótese, ao definir uma potência de aquecimento, o material e a massa do barril, é possível avaliar o tempo para que o sistema alcance a temperatura de processo uma vez que o calor transferido ao barril é o mesmo fornecido pelos aquecedores.

$$t = \frac{Q_{barril}}{\dot{Q}_{aquecedor}}$$

Para a melhor interpretação da influência da massa do barril e da potência emitida pelos aquecedores, nesta estimativa do tempo de aquecimento do barril até a temperatura de processo, essas quantidades são representadas graficamente, conforme Figura 3.10.



Figura 3.10 - Diagrama para estimativa do tempo de aquecimento do barril, da temperatura de 20°C até 220°C, em função das potências de aquecimento e da massa, para o aço inox AISI 304 ($C_p = 480 J/kg.K$). Fonte: Elaborado pelo autor.

É notável que a potência necessária para que o sistema (barril) atinja a temperatura de 220 °C em um tempo não superior a 10 minutos, para as massas avaliadas, deve ser superior a 80W. Já, potências de aquecimento entre 40W e 100 W resultam em um intervalo de aquecimento entre 8 e 100 minutos, onde esses limites são definidos para a menor e a maior massa, respectivamente.

Já é esperado que os tempos reais sejam superiores aos estimados uma vez que as simplificações adotadas no modelo desconsideram as parcelas de calor que seriam transferidas ao ar circundante (convecção), ao polímero, as roscas e demais componentes do cabeçote em contato com o barril, como exemplo o bocal. Isso implica que uma parcela do calor das resistências não estará disponível para aquecer o barril, resultando em um tempo real superior ao estimado aqui.

Embora seja uma estimativa, fornece informação de referência para as análises CFD, como o intervalo de tempo a ser adotado nas análises térmicas transientes, bem como pode orientar nas decisões na fase projetiva destes cabeçotes extrusores. Assim, estabelecendo referências para a escolha das potências de aquecimento do barril, especificação dos materiais de fabricação e auxiliar no controle das massas na concepção do barril, bem como de atender o tempo requerido para que o sistema atinja as temperaturas para início do processo.

3.3.10 Determinação dos coeficientes convectivos naturais

A convecção natural é um fenômeno de transferência de calor no qual o fluido é movimentado por forças de empuxo no seu interior. Essa força é resultado da dos gradientes de densidade (devido aos gradientes de temperatura) do fluido e de uma força de corpo que é proporcional a densidade [71]. Como não há forças centrífugas relacionadas no estudo proposto, essa força de campo é definida pela força da gravidade.

A literatura fornece um conjunto de correlações para a convecção natural em superfícies planas que são dadas em função da posição das superfícies expostas ao fluido e se a mesmas são aquecidas ou resfriadas em relação a temperatura do fluido, parâmetros geométricos das superfícies, temperatura e propriedades do fluido, bem como a temperatura média das superfícies. Assim, as correlações, já bastante conhecidas, de Churcil e Chu [71] para superfícies planas serão adotadas aqui na determinação dos coeficientes convectivos médios que alimentarão as análises computacionais e estão representadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Correlações empíricas da literatura para o número de Nusselt de placas planas, submetidos a convecção natural, em diferentes orientações. Fonte: Adaptado de [71].

N	Condição	Correlação	Restrições				
I	Superfície vertical	$\overline{Nu_L} = \left\{ 0,825 + \frac{0,387Ra^{1/6}}{\left[1 + (0,492/Pr)^{8/27}\right]} \right\}^2$	para todo valor de Ra				
II	Superfície horizontal ou inclinada – Face aquecida voltada para baixo ou resfriada voltada para cima.	$\overline{Nu_L} = 0,27Ra^{0,25}$	$10^5 \le Ra \le 10^{10}$				
III	Superfície horizontal ou inclinada – Face aquecida voltada para cima ou resfriada voltada para baixo.	$\frac{\overline{Nu_L}}{\overline{Nu_L}} = 0,54Ra^{0,25}$ $\frac{1}{Nu_L} = 0,15Ra^{1/3}$	$\begin{array}{l} 10^4 \leq Ra \; \leq 10^7 \\ 10^7 < Ra \; \leq 10^{11} \end{array}$				
Onde	Onde L é substituído por L_c que é o comprimento característico ($L_c = área superficial/perímetro$) Onde \overline{Nu} é o prímero de Nueselt médio e R_c é o prímero de Rayleigh						

Para a obtenção dos coeficientes convectivos é necessário determinar primeiro o número de Rayleigh, através da Equação 37.

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TL_c^3}{\nu\alpha}$$
(37)

Onde *g* é aceleração da gravidade, β é o inverso da temperatura de filme T_f em Kelvin ($T_f = (T_{superficie} + T_{fluido})/2$), ΔT é a diferença de temperatura entre o fluido na corrente livre e a temperatura média da superfície, L_c é o comprimento característico, ν é a viscosidade cinemática do fluido na temperatura de filme e α é o coeficiente de difusibilidade do fluido, também, na temperatura de filme.

Calculados os números de Ra e aplicando as correlações adequadas, o número de Nusselt médio pode ser determinado individualmente para cada uma das faces que estará trocando calor com o fluido, que no caso é o ar. Contudo, para a determinação dos coeficientes convectivos das faces que compõe o barril é necessário ainda determinar a condutividade do fluido k_{fluido} na temperatura de filme. Assim, finalmente os coeficientes convectivos médios podem ser determinados pela Equação 38.

$$\bar{h}_{superficie} = \frac{\overline{Nu}_L \ k_{fluido}}{L_c}$$
(38)

Como as correlações disponíveis para a determinação dos coeficientes convectivos naturais médios, presentes nos modelos estudados, depende da orientação barril e consequentemente de suas faces em relação a direção de atuação da força da gravidade, um modelo esquematizado das faces externas do barril e sua disposição é elaborado, conforme ilustrado na Figura 3.11.



Figura 3.11 – Esquema ilustrando a simplificação adotada na representação das faces (superfícies) para a determinação dos coeficientes convectivos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor.

Por simplicidade, as dimensões fundamentais das faces externas que compõe o barril, para ambas as configurações estudadas, são representadas por um prisma retangular composto por 6 faces (Figura 3.11). Sendo 2 faces horizontais (faces A e B) e 4 faces verticais (faces C, D, E e F). As faces do bocal em contato com o ar, por serem muitas vezes menores em comparação as faces do barril, assume-se possuírem o mesmo coeficiente convectivo obtido para as faces verticais.

Estabelecidas as geometrias representativas das faces do barril em contato com o ar, é interessante organizar as informações geométricas das mesmas, bem como suas orientações em relação a posição de operação do cabeçote e a correlação apropriada para determinação do coeficiente convectivo médio. Essas informações estão sumarizadas na Tabela 7.

Face	Largura (mm)	Comprimento (mm)	Área (mm ²)	Perímetro (mm)	Lc (mm)	Condição	Correlação	
CONFIGURAÇÃO I								
А	34	70	2380	208	11,44	Horizontal/ Aquecida voltada para cima		
В	34	70	2380	208	11,44	Horizontal/ Aquecida voltada para baixo	П	
С	34	162	5508	392	162	Vertical	I	
D	70	162	11340	464	162	Vertical	I	
Е	34	162	5508	392	162	Vertical	I	
F	70	162	11340	464	162	Vertical	I	
				CONFIGU	RAÇÂO II			
А	34	70	2380	208	11,44	Horizontal/ Aquecida voltada para cima	III	
В	34	70	2380	208	11,44	Horizontal/ Aquecida voltada para baixo	П	
С	34	143	4862	354	143	Vertical	I	
D	70	143	10010	426	143	Vertical	I	
Е	34	143	4862	354	143	Vertical	I	
F	70	143	10010	426	143	Vertical	I	

Tabela 7 – Parâmetros geométricos das faces representativas adotadas para a determinação dos coeficientes convectivos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor.

Agora, considerando que a temperatura das faces do barril sejam uniformes e correspondentes a temperatura de deposição do PP de 220°C (que será a maior temperatura desenvolvida no processo) e ainda assumindo a temperatura do ar ambiente de 20°C, é possível determinar a temperatura de filme, que nesse cenário corresponde a 120°C. Dessa temperatura, são determinadas as propriedades do ar necessárias para solução das correlações. Os valores das propriedades do ar a pressão atmosférica (101,3 kPa), para a temperatura de 120°C, obtidos de Bergman e Lavine (2019) [71], são apresentadas na Tabela 8.

Tabela 8 – Propriedades do ar a pressão ambiente e a temperatura de filme de 120°C. Fonte: Adaptado de [71].

Ar (P = 101,3 kPa e T = 120°C)						
Pr	$\alpha \left(\frac{m^2}{s}\right)$	$\nu\left(\frac{m^2}{s}\right)$	β	$k\left(\frac{W}{m.K}\right)$	$\rho\left(\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m}^3}\right)$	
0,6962	35,6e-6	25,22e-6	2,75e-3	0,03299	0,8976	

Determinada a temperatura de filme e estabelecidos as propriedades do ar para essa temperatura, através das correlações apresentadas na Tabela 6, das informações geométricas da Tabela 7 e das propriedades do ar da Tabela 8, por fim, são determinados os coeficientes convectivos médios das faces para representar a condição de contorno das paredes externas que formam o barril nas simulações computacionais. A Tabela 9 apresenta os resultados obtidos.

Tabela 9 – Número de Rayleigh, número de Nusselt e coeficientes convectivos médios obtidos para as configurações I e II. Fonte: Elaborado pelo autor.

Face	Ra	\overline{Nu}_L	$\overline{h}(W/m^2.K)$				
CONFIGURAÇÂO I							
Α	7882	4,72	13,42				
В	7882	3,51	10,0				
С	2,24e7	39,91	7,89				
D	2,24e7	39,91	7,89				
Е	2,24e7	39,91	7,89				
F	2,24e7	39,91	7,89				
	CC	NFIGURAÇÂ	0				
Α	7882	4,72	13,42				
В	7882	3,51	10,0				
С	1,54e7	35,29	8,03				
D	1,54e7	35,29	8,03				
Е	1,54e7	35,29	8,03				
F	1,54e7	35,29	8,03				

3.3.11 Análise de independência do tamanho de malha CFD

Nas análises CFD o tamanho de elemento de malha utilizada para realizar o estudo deve ser verificado. Para isso, a simulação é realizada com diferentes tamanhos de malha e posteriormente são comparados os resultados de algumas grandezas de interesse e suas correspondentes variações. Uma vez que os valores monitorados, de uma malha mais grosseira progressivamente para uma mais refinada, tendam a um único valor, pode-se considerar que os resultados da simulação não está mais sendo influenciado para o correspondente refinamento da malha.

Como valor de referência adotado para os testes de independência da malha, é monitorada a temperatura no vértice que forma o canal do barril que estará conectado ao bocal de deposição. A localização do ponto tomado para monitoramento da temperatura no barril, na configuração I, pode ser observado na Figura 3.12.



Figura 3.12 – Posição no modelo adotado para monitoramento da temperatura para avaliar a influência de distintos níveis de refinamento da malha CFD. Fonte: Elaborado pelo autor.

Inicialmente, a simulação é realizada com uma malha com pouco refinamento (grosseira) e progressivamente, de forma a, no mínimo, dobrar o número total de elementos, as malhas são refinadas. Esse processo de refinamento progressivo ocorre em um total de oito iterações. Na Tabela 10 estão especificados o número total de elementos da malha e o correspondente número

de elementos associados as direções X, Y, e Z do modelo (Figura 3.13), para todas as iterações de refinamento de malha adotados nesse estudo.

Tabela 10 – Níveis de refinamento da malha CFD adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento empregado. Fonte: Elaborado pelo autor.

lteração	X (Elementos)	Y (Elementos)	Z (Elementos)	Total (Elementos)
1	16	8	34	3.946
2	22	9	46	8.692
3	32	11	68	22.916
4	46	15	92	61.704
5	66	19	134	164.438
6	60	34	150	300.332
7	80	44	200	694.728
8	105	100	250	2,626,620
		_		
	a)			
	b)			
	c)			
	d)			

Figura 3.13 – Níveis de refinamento: a) malha com 3.946 elementos, b) malha com 22.916 elementos, c) malha com 300.332 elementos e d) malha com 694.278 elementos. Fonte: Elaborado pelo autor.

3.3.12 Análise do passo temporal das análises transientes

Nas análises, um dos fatores que deve ser levado em consideração é o incremento de tempo, ou seja, o intervalo de tempo entre as iterações realizadas na simulação (passo temporal), uma vez que se trata de uma análise em regime transiente. Desta forma, precisa-se avaliar o efeito que tais intervalos provocam nos resultados das análises, e assim definir um incremento tempo apropriado para ser utilizado nas demais simulações.

Para essa etapa é realizada a simulação com 3 diferentes incrementos temporais, os quais são de 0,5s, 1s e 2s. Assim, pode-se comparar os resultados das grandezas de interesse dos estudos e verificar a influência do passo temporal adotado nos mesmos, da mesma forma que ocorre com o tamanho dos elementos da malha.

3.3.13 Validação do modelo

É importante nas análises CFD estabelecer maneiras de verificar se os resultados das simulações, que dependem de vários fatores, estão representando apropriadamente o fenômeno estudado e assim validar a hipóteses e modelos adotados ou ajustá-los caso necessário.

Para tal, é simulada a geometria da configuração II, considerando somente meio barril (barril aberto) conforme apresentado na Figura 3.6, repetindo as mesmas condições de um teste experimental a partir das hipóteses estabelecidas, e assim, comparado os resultados do experimento com as informações presentes neste estudo.

No experimento, o barril aberto (configuração II) é aquecido da temperatura ambiente (20°C) até alcançar a temperatura de 220°C na região correspondente ao bocal, o que demorou aproximadamente 45 minutos. O barril é aquecido com uma potência total de 32,5 W (ver Figura 3.3 e Tabela 3), mantida constante na duração do experimento. Aproximadamente, aos 18 min. após o início do aquecimento, imagens de uma câmera termográfica, marca FLIR modelo TG267 com 19200 pixels e escala de temperaturas de -25 °C a 380 °C, são armazenadas. Essas imagens indicam as temperaturas em um ponto localizado na zona de alimentação e outro ponto próximo a metade da distância longitudinal do barril (zona de transporte do fundido). Os resultados dessas

medições de temperatura e as correspondentes localizações podem ser observados na Figura 3.14.



Figura 3.14 – Medidas de temperatura do barril (na configuração II) em um tempo de, aproximadamente, 18 min. após o início do aquecimento, obtidos a partir de uma câmara termográfica marca FLIR modelo TG267, em dois pontos distintos. Fonte: Elaborado pelo autor.

Com base nos resultados experimentais preliminares, podem ser estabelecidas as seguintes métricas para avaliação da correspondência entre valores experimentais e numéricos:

 Após um intervalo equivalente a 45 min. a temperatura do bocal nas simulações deve ser próxima a 220°C;

- Após um intervalo de simulação de 18 min. as temperaturas da zona de alimentação e da zona de transporte do fundido, correspondentes aos mesmos locais instrumentados, devem ser próximas a 71,5°C e 104,2°C, respectivamente.

Havendo boa correspondência entre os resultados numéricos e os experimentais, é possível considerar a validação parcial dos métodos adotados nas análises, uma vez que essa configuração simulada apesar de não representar a condição real de operação ainda é bem próxima. Contudo, se ocorrer boa correspondência nesse cenário, espera-se que as simulações

apresentem boas aproximações para a situação que representará a configuração funcional do cabeçote (configuração I).

3.3.14 Análise CFD – Transiente (Configuração II)

Da configuração II, por simplicidade, valendo-se apenas da metade do barril (barril aberto) sem representar as roscas, bucha e bocal, é possível estabelecer valores de referência a partir da instrumentação das temperaturas e tempo de aquecimento. Esses valores servem para uma validação das condições de contorno e hipóteses adotadas na simulação para descrever o perfil térmico na condição do estudo proposto.

Dessa configuração de barril, é avaliada, inicialmente, a independência dos resultados em relação ao tamanho de malha adotado na discretização do domínio computacional, bem como o passo temporal adotado nas análises em regime transiente. Quando estabelecidos o passo temporal e o refinamento de malha adequados aos estudos, esses são adotados em todas as análises a partir dessa etapa. Com isso, é possível avançar para as simulações da configuração final do barril (Configuração II).

Os parâmetros adotados para essa etapa de simulação são:

- volume da análise: geometria Configuração I (barril aberto);
- material do cilindro: aço inox A302;
- passo temporal: 0,5s;
- tempo físico da análise: 2700s (45 min.);
- temperatura inicial do conjunto: 20°C (t = 0 s);
- regime: transiente;
- potência das resistências: CA_I = 12,5W; CA_II = 12,5W e CA_III = 12,5W (Tabela 3);

 fluxo de calor convectivo: As paredes em contato com ar assumem os valores dos coeficientes convectivos determinados analiticamente, estabelecidos conforme suas orientações espaciais. Os valores dos coeficientes adotados para as simulações podem ser consultados na Tabela 9.

3.3.15 Análise CFD – Transiente Periódico (Configuração I)

Para esta etapa das simulações, a geometria que representa o domínio computacional é a Configuração I e o objetivo está em simular, em um primeiro momento, a fase de aquecimento do cabeçote até que atinja as temperaturas especificadas para o processamento do PP, e numa segunda etapa, agora considerando as resistências intermitentes, descrever a condição térmica de referente ao regime de operação do cabeçote.

Neste contexto, as simulações dessa etapa visam estimar o tempo de aquecimento até a temperatura de processo, a distribuição das temperaturas no entorno do cilindro de extrusão (canais de escoamento) e a temperatura desenvolvida na zona de alimentação, que não deve superar os 60°C, uma vez que promoverá o amolecimento precoce do polímero ainda na zona de alimentação das roscas. Essas informações servem de subsídio para orientar alterações da configuração do barril com vistas em adequar o cabeçote as condições estabelecidas em projeto, no que se referem ao controle de temperaturas requeridas no processo.

Esta análise nunca atingirá o regime permanente propriamente dito, porém pode-se considerar que quando o processo tender a se manter numa mesma faixa de variação (devido ao ligamento e desligamento das resistências) o sistema atingiu seu ponto de operação. Com isso consegue-se avaliar o tempo de aquecimento, e ainda, tem-se as temperaturas resultantes no barril e bocal, as quais dependem dos fluxos de calores trocados no modelo e do controle dos aquecedores, durante a condição intermitente de operação.

Para representar os pontos correspondentes aos termistores (sensores de temperatura) que são responsáveis por enviar informações de temperatura para que os sistemas eletrônicos controlem o ligamento e desligamento dos aquecedores, conforme temperaturas especificadas para cada zona, são empregados no domínio computacional pontos correspondentes aos locais dos sensores. Para, assim, representar uma condição intermitente de fluxo de calor que são controladas pelas respostas dessas temperaturas, e que são monitoradas a cada incremento da evolução temporal das simulações. As posições destes sensores, para geometria da Configuração I, estão esquematizadas na Figura 3.15.



Figura 3.15 – Disposição dos sensores de temperatura que representam na simulação os termopares responsáveis pelo controle da temperatura e consequente resposta dos aquecedores resistivos. Fonte: Elaborado pelo autor.

Os parâmetros das análises adotados para essa etapa são:

- material do cilindro: aço inox A302;
- material da luva do bocal: Cobre;
- material do bocal de deposição: Latão;
- temperatura inicial do conjunto (t = 0 s): 20°C;
- simulação transiente, até se estabelecer o regime térmico transiente oscilatório;
- potência das resistências com acionamento intermitente:

o conjunto AC _I:

se T do P1 = 220°C ◊ Desligar Resistência;

se T do P1 <= 219°C ◊ Ligar Resistência

o conjunto AC_II:

se T do P2 = 220°C ◊ Desligar Resistência;

se T do P2 <= 219°C ◊ Ligar Resistência

o conjunto AC_III:

se T do P3 = 220°C ◊ Desligar Resistência;

se T do P3 <= 219°C \ligar Resistência

Potência das resistências: CA_I = 25W; CA_II = 25W e CA_III = 15W (Tabela 3);

 faces externas: Fluxo de calor convectivo - As paredes em contato com ar assumem os valores dos coeficientes convectivos determinados analiticamente, estabelecidos conforme suas orientações espaciais. Os valores dos coeficientes adotados para as simulações podem ser consultados na Tabela
 9.

 faces que formam os canais de escoamento: Fluxo de calor constante representando a parcela de calor fornecida ao polímero no processo de extrusão correspondente 1,29W (ver Seção 3.3.8).

3.3.16 Temperaturas na zona de alimentação

As temperaturas da zona de alimentação influenciam diretamente na qualidade do material extrudado, uma vez que temperaturas muito elevadas fazem com que ocorra uma fusão precoce e consequentemente impedindo o fluxo do material. Assim, esta etapa do estudo visa verificar se há o controle de tais temperaturas, as quais devem se aproximar de 50°C, conforme apresentado anteriormente na Seção 3.3.1 deste capítulo.

O controle térmico dessa zona pode ser feito de diversas formas, por exemplo, por controle ativo, tais como: convecção forçada através de ventoinhas, dissipação de calor com placas de Peltier, entre outros. Entretanto, essas formas de controle térmico aumentariam a massa do cabeçote de forma significativa, e uma vez que o conjunto é movido através de servo motores, esse aumento implicaria em movimentos inerciais indesejados, ou seja, ocasionará em perdas de precisão no acabamento superficial do produto extrudado.

Como a maior parte de calor recebido na zona de alimentação é através de condução, a forma mais adequada para realizar o controle térmico nessa região é o isolamento da mesma. Assim, investiga-se a repartição do cabeçote, através de uma camada de material isolante, adotado como solução para o controle da temperatura, realmente cumpre sua função.

3.4 Simulação computacional – fluxo de material no interior do barril

3.4.1 Delimitações

Como ferramenta para as simulações computacionais, que atendam as características do estudo proposto, opta-se pelo emprego do pacote comercial ANSYS® Polyflow dado sua robustez e confiabilidade, além de dispor de uma vasta diversidade de modelos para estudo CFD de diferentes fenômenos (mecânicos, físicos, químicos, cinéticos, térmicos, etc.) envolvendo polímeros. Também, justifica-se o emprego desse software pelos bons resultados já obtidos pelos autores Carson e Covas (2015) [32]; Kalyon e Malik (2007) [28]; Malik, Kalyon e Golba (2014) [18] e Xu *et al.* (2017) [72], onde simularam com sucesso o fluxo do fundido em extrusoras rosca dupla co-rotativas e contra-rotativas.

As simulações propostas neste estudo devem representar determinados pontos de operação do sistema, permitindo assim coletar informações referentes ao fluxo como velocidades, pressões, taxas de cisalhamento, temperaturas, aquecimento viscoso, entre outras grandezas de interesse.

Para tal, aqui serão tratados através de dois modelos distintos, um representando o fluxo no interior do barril (empregando a técnica MST) e outro representando o fluxo no bico de impressão (regime permanente), uma vez que a simulação do bico dependerá de uma superfície livre, para assim representar o inchamento do extrudado, e não requer imersão de malhas (apenas domínio estático).

Como a vazão de alimentação e a rotação são conhecidas, já que representam uma dada condição de operação imposta ao cabeçote de impressão, a análise do fluxo no sistema parte da determinação da pressão consumida no bocal de impressão. Cabe destacar que esta pressão representará uma condição de contorno fundamental para a etapa de análise do fluxo no barril.

Para a análise do fluxo com o PolyFlow, uma vez que a ferramenta limitase a representação de canais totalmente preenchidos, é necessário prever o nível de preenchimento das roscas. Para atender a essa proposta, emprega-se uma versão modificada do modelo de três parâmetros baseado em uma formulação adimensional apresentado e validado por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34] denominado *HME 1D model* (Seção 2.4.2). Como resultado, é possível estabelecer o nível de preenchimento ao longo dos canais de escoamento e prever a pressão global desenvolvida nas zonas totalmente preenchidas com um modelo que considera os efeitos da temperatura e da taxa de cisalhamento na viscosidade do polímero. Porém, esse modelo adotado requer a determinação dos parâmetros empíricos adimensionais (Seção 3.4.3) de cada tipo de elemento que constitui as roscas, que podem ser obtidos experimentalmente ou através de simulação 3D conforme já demonstrado por Kohlgrüber (2008) [35].

Então, a partir da simulação individual dos elementos que constituem as roscas, para determinadas condições de contorno, é possível determinar os parâmetros empíricos desses elementos que são obtidos da hipótese de um fluido newtoniano. Desses estudos são obtidas as curvas características dos elementos que compõe as roscas e consequentemente os parâmetros do modelo analítico 1D proposto por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34] e modificado para esse estudo. Ainda, com vistas em validar as alterações propostas ao modelo replica-se as condições do experimento proposto por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34] para comprovar a correspondência.

Com as regiões das roscas totalmente preenchidas identificas e localizadas, uma análise destes segmentos de roscas é realizado, obtendo assim os dados necessários para a descrição do fluxo no interior do barril uma vez que somente estes geram ou consomem pressão, bem como promovem os efeitos de mistura e dispersão presentes no fluxo em dupla rosca. Cabe destacar que as condições de contorno, nos trechos preenchidos, são obtidas do modelo analítico 1D modificado.

Essa técnica, de analisar os trechos preenchidos, com o POLYFLOW® já foi empregada por Schuschnigg *et. al.* (2016) [73] que obteve boa correspondência com os dados experimentais, porém para identificar as pressões e as regiões preenchias o autor se vale de dados experimentais para alimentar as condições de contorno de suas análises. Aqui, a proposta segue a mesma linha, porém, distintamente de Schuschnigg *et. al.* (2016) [73], empregase o modelo 1D de Eitzlmayr *et al.* (2014) [34] modificado para a determinação das condições de contorno das simulações.

3.4.2 Análise do fluxo no bico de impressão

O bocal de impressão 3D é o acessório conectado ao final do cilindro de extrusão que proporciona a forma da seção transversal com que o polímero saí da extrusora antes de ser depositado, formando, assim, a composição das camadas de impressão. Por ser um elemento que consome pressão, este restringe as características de projeto do sistema de bombeamento (roscas e cilindro de extrusão) uma vez que as resistências ao fluxo de saída do extrudado deverão ser supridas.

Modelos analíticos estão disponíveis para a avaliação da pressão requerida em matrizes de extrusão, porém são muitas vezes limitados a assumirem valores constantes de viscosidade e a representarem canais com geometrias de pouca complexidade, em problemas isotérmicos. Assim, com o uso de modelos numéricos computacionais, os resultados podem melhor representar o comportamento do fluxo termo-mecânico de materiais complexos, como polímeros fundidos.

As soluções numéricas, apesar de limitadas a complexidade dos fenômenos relacionados, são ferramentas úteis para análise do fluxo de polímeros fundidos através de matrizes de extrusão. Previsões tais como pressão consumida, campos de velocidades, taxas de cisalhamento desenvolvidas, viscosidade dinâmica, aquecimento viscoso, bem como a predição da forma e o grau de inchamento do extrudo podem ser obtidos com boa aproximação.

Aqui, com o emprego do módulo Polyflow®, disponível no software Ansys®, é investigado o fluxo de PP através do bocal de impressão 3D, conforme a faixa de vazões estabelecidas no projeto e as temperaturas de processamento do material. Os resultados desta análise representam informações valiosas para a especificação adequada do sistema de bombeamento e pontos de operação do sistema.

3.4.2.1 Delimitação das Análises

O bico de impressão 3D, objeto do estudo, é restrito a operar numa faixa de fluxo mássico de PP que varia de 0,02 a 0,04 kg/h, a uma temperatura de

220°C. É considerada como componente do bocal todos os canais de fluxo situados a partir da transição do cilindro de extrusão até a extremidade de saída do extrudado. A disposição no barril e a geometria dos canais que compõe a bocal (matriz) está ilustrado na Figura 3.16.



Figura 3.16 – Volume extraído correspondente aos canais que compõe o bico de impressão 3D. Fonte: Elaborado pelo autor. Fonte: Elaborado pelo autor.

O foco principal desta etapa é determinar as pressões desenvolvidas no bocal para que os fluxos de projeto sejam estabelecidos, pois estes estarão diretamente relacionados as características de bombeamento dos elementos que constituem as roscas extrusoras.

Contudo, ainda, as temperaturas desenvolvidas devido ao efeito de aquecimento viscoso (devido ao atrito entre moléculas do material), inerentes a natureza do fluxo, deverão ser comparadas as temperaturas de degradação do PP. Com isso, busca-se garantir que o material impresso não sofrerá nenhuma degradação térmica referente a esta etapa do processamento.

Outra característica importante, a ser controlada, para garantir a qualidade do processado, está relacionada a deformação da seção transversal do material polimérico quando este deixa o bocal de impressão. Estabelecer o grau de inchamento que o polímero experimentará no processo pode revelar problemas relacionados a estabilidade dimensional das camadas impressas.

3.4.2.2 Procedimentos das análises

Para a análise do fluxo do Polipropileno (PP) no bocal de impressão, adota-se o modelo Curreau-Yasuda. Este modelo é capaz de representar com boa precisão condições de fluxo envolvendo baixas (comportamento Newtoniano) e medias taxas de cisalhamento (comportamento não-Newtoniano), como as que estão presentes nos processos de extrusão. Ainda mais, é um modelo que incorpora um parâmetro adimensional que descreve a transição entre o regime newtoniano e a região da Lei das Potências, assim, aproximando-se melhor ao comportamento real do material (PP).

Contudo, como é de conhecimento, polímeros como o PP, além de suas viscosidades dependerem das taxas de cisalhamento desenvolvidas, incluem uma forte dependência com a temperatura. Com isso, assume-se descrever a dependência da viscosidade com a temperatura através do acoplamento da Lei de Arrhenius ao modelo de Carreau-Yasuda, uma vez que é empregado a polímeros semicristalinos, como o PP. Dessa forma, para que o modelo Carreau-Yasuda seja capaz de representar essa dependência térmica, é adicionada um parâmetro, obtido da Lei de Arrhenius, que corrige a curva de viscosidade conforme a temperatura imposta.

O fluxo no bocal é estudado a partir de um modelo 3D não-isotérmico, onde assume-se um regime permanente de fluxo. Também, são desconsiderados os efeitos de escorregamento do fluido nas paredes. Na Figura 3.17 pode ser observado o domínio, que compõe o modelo 3D, empregado na representação do fluxo no bico.



Figura 3.17 – Domínio da análise: volume que representa o fluido no interior dos canais que formam o bico de impressão 3D. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para a discretização do modelo geométrico são empregados elementos de malha hexaédricos (método *multizone*) pois tem sido aplicado com bons resultados para representar condições de fluxo envolvendo materiais
pseudoplásticos [43]. O tamanho de malha inicial, que pode ser observada na Figura 3.18, é definido para que as dimensões de cada elemento que compõe a malha não sejam superiores a 2 mm, resultando em um domínio computacional com um total de 12.827 elementos e 14.820 nós.





Como recomenda a boa prática e para maior confiabilidade dos resultados obtidos nas simulações, a sensibilidade do tamanho da malha no resultado das análises é testada, onde valores de controle, tal como o consumo de pressão no bico de impressão, são comparados à medida que o tamanho de malha é reduzido. Para tal processo dobra-se o número de elementos sucessivamente entre as análises e verifica-se o desvio percentual da grandeza de controle até que se considere que não há variação significativa da grandeza em relação a malha anterior.

As condições de contorno impostas ao modelo, para fins de representação, são nomeadas de entrada, saída e paredes, e estão esquematizadas na Figura 3.19.



Figura 3.19 – Representação dos locais onde as condições de contorno são impostas nas análises CFD do escoamento no bico. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para a maior abrangência das análises, conforme a faixa de operação a qual a dupla rosca deve operar, o estudo é repetido para as vazões de alimentação de 0,2 e 0,4kg/h e são consideradas as temperaturas de entrada do fluxo de 200°C, 210°C e 220°C. Assim, as condições de contorno impostas ao estudo do fluxo no bocal de impressão 3D, são:

CC1 – Entrada do Fluído – Vazão mássica inicial de 0,2 kg/h (Perfil de velocidades para um fluxo plenamente desenvolvido / Temperatura de entrada do fundido igual a obtida na saída do tambor);

CC2 – Saída do Fluído – Força normal e tangencial nulas;

CC3 – Parede do Bocal de Impressão 3D – Velocidade normal e tangencial nula (sem escorregamento na parede / paredes consideradas adiabáticas e com temperatura inicial de 200 °C).

3.4.3 Parâmetros adimensionais dos elementos de rosca

Conforme já discutido, para implantação do modelo 1D modificado é necessário determinar os parâmetros, de cada tipo de elemento que constitui a rosca dupla, A1 e A2, e assim obter a vazão e pressão características, que também são adimensionais. Autores como Kohlgrüber (2008) [35] e Rauwendaal (2014) [2] já demonstram que é possível obter os valores desses parâmetros pela imposição de condições de contorno, distinta para cada parâmetro, com o emprego de análises CFD. Essas análises são isotérmicas e consideram o comportamento de fluido newtoniano para representar o polímero. Os efeitos inerentes a pseudoplasticidade do polímero são incorporados posteriormente no

modelo 1D através da viscosidade representativa, que é responsável por descrever os efeitos de temperatura e taxa de cisalhamento na viscosidade, e que depende desses parâmetros.

A máxima capacidade de transporte de um elemento de rosca, completamente preenchido, é obtido quando na saída desse elemento não há nenhum obstáculo, ou seja, a pressão corresponde a pressão atmosférica (não há geração). Do outro lado, correspondente a entrada do fluxo no elemento, a pressão também deve ser igual a atmosférica uma vez que se considera nessa análise o elemento individualmente. Isso resulta em um cenário onde a pressão axial resultante é igual a zero. Da imposição dessa condição, para cada tipo de elemento, a partir das vazões obtidas das simulações são determinados os parâmetros A1 dos elementos (Eq. 32).

Já a máxima capacidade de gerar pressão, considerando-se individualmente cada tipo de elemento, ocorre em um cenário onde há uma restrição na saída do elemento, impedindo completamente o fluxo a jusante do mesmo. Ao mesmo tempo que na entrada do elemento a pressão é a atmosférica. Da simulação dessa condição e a partir da Eq. 33 é possível determinar o parâmetro A2 do modelo.

Um ponto importante é destacar que independente dos valores de viscosidade, temperatura e velocidade de rotação empregados para representar o fluido newtoniano, os parâmetros adimensionais dos elementos de rosca, aqui determinados, dependem única e exclusivamente das características geométricas do elemento. Assim, é facilmente demonstrado que um elemento de rosca simulado para diferentes valores de viscosidade constante (fluido newtoniano), temperatura e rotação vão resultar nos mesmos valores para A1 e A2.

A configuração da rosca dupla abordada nesse estudo (Seção 3.1) é constituído 3 tipos de elementos de transporte positivo e 2 blocos de malaxagem (esmagamento) idênticos. Na Figura 3.20 está representada a configuração das roscas, bem como são especificados os tipos elementos e suas respectivas posições na composição da rosca dupla co-rotante.



Figura 3.20 – Composição da dupla rosca adotada nas simulações CFD. (A) elemento de transporte 20/40 com rosca direita, (B) e (D) elementos de malaxagem -60/15/3, (C) elemento de transporte 15/40 com rosca direita e (E) elemento de transporte 10/20 com rosca direita. Fonte: Elaborado pelo autor.

Todos os parâmetros geométricos da rosca dupla e do barril necessários para a representação (modelagem) dos domínios computacionais empregados na determinação, via CFD, dos parâmetros adimensionais A1 e A2, de cada elemento de rosca, estão sumarizados na Tabela 11, a seguir.

Parâmetro	Valor
Distância entre centros	10,2 mm
Folga entre barril e roscas	0,2 mm
Diâmetro interno do barril	12,0 mm
Diâmetro externo das roscas	11,8 mm
Diâmetro interno das roscas	11,4 mm
Folga entre roscas	0,2 mm

Tabela 11 – Parâmetros geométricos do cabeçote extrusor.

3.4.3.1 Procedimentos das Simulações

Nas análises CFD para determinação dos parâmetros adimensionais A1 e A2, de cada tipo de elemento, o polímero é descrito como um fluido newtoniano, assumindo, assim, um valor constante para a viscosidade. Tratamse de análises que representam um fluxo em regime permanente e isotérmico, onde busca-se determinar a vazão e a pressão desenvolvida, em cada tipo de elemento, para duas condições de contorno específicas. Essas condições permitem caracterizar a capacidade de transporte, através da vazão característica, e a capacidade de gerar pressão, através da pressão característica, de cada elemento.

A técnica de superposição de malha (MST) é usada para simplificar a geração de malha do domínio computacional (ver Fig. 3.20). O domínio computacional é divido em dois subdomínios, um para representar as partes móveis (roscas) e outro para representar a parte estática, que é limitado pela parede interna do barril, referente ao canal onde o polímero flui. Elementos hexaédricos, em uma configuração estruturada, são adotados para discretização do subdomínio estático (canais de fluxo) e para melhor representação da complexa geometria do subdomínio dinâmico (roscas) emprega-se elementos tetraédricos não estruturados.



Figura 3.21 – Representação do domínio computacional constituído de dois subdomínios, um para representar o fluido e o outro para representar as roscas, segundo a técnica de superposição de malhas (MST). Fonte: Elaborado pelo autor.

As condições de contorno impostas ao modelo, para fins de representação, são nomeadas de entrada, saída, paredes externas, paredes internas e roscas e estão esquematizadas na Figura 3.22.



Figura 3.22 – Representação dos locais onde as condições de contorno são impostas nas análises CFD para obtenção dos parâmetros A1 e A2 dos distintos tipos físicos de elementos que compões as roscas. Fonte: Elaborado pelo autor.

Os procedimentos das simulações são os mesmos para todos os tipos de elementos que compõe a rosca dupla, apenas são modificadas as geometrias para que correspondam a cada tipo de elemento. Como essas simulações tratam de representar dois cenários distintos para cada tipo de elemento, um para determinar o valor de A1 e outra para determinar A2, as condições de contorno são apresentadas separadamente. São elas:

1 - Condições de Contorno – Determinação de A1

CC1 – Entrada do Fluído – Força normal e tangencial nulas (não há esforços externos atuantes no extrudado – pressão ambiente);
 CC2 – Saída do Fluído – Força normal e tangencial nulas (não há esforços externos atuantes no extrudado – pressão ambiente);

CC3 – Parede Externas – Velocidade normal e tangencial nula (sem escorregamento na parede / paredes consideradas adiabáticas e com temperatura constante de 220 °C).

CC4 – Parede Internas – Velocidade angular correspondente a velocidade imposta nas roscas / 100 rpm (10,471 rad/s) no sentido horário).

CC5 – Roscas - Velocidade angular correspondente a 100 rpm (10,471 rad/s) no sentido horário.

2 - Condições de Contorno – Determinação de A2

CC1 – Entrada do Fluído – Força normal e tangencial nulas (não há esforços externos atuantes no extrudado – pressão ambiente);

CC2 – Saída do Fluído – Velocidade normal e tangencial nulas (não há escoamento de fluido – Representa a obstrução do fluxo na saída do elemento);

CC3 – Parede Externas – Velocidade normal e tangencial nula (sem escorregamento na parede / paredes consideradas adiabáticas e com temperatura constante de 220 °C).

CC4 – Parede Internas – Velocidade angular correspondente a velocidade imposta nas roscas / 100 rpm (10,471 rad/s) no sentido horário).

CC5 – Roscas - Velocidade angular correspondente a 100 rpm (10,471 rad/s) no sentido horário.

3.4.4 Modelo HME 1D modificado

Para avançar para as simulações do fluxo 3D nos canais preenchidos da rosca dupla miniaturizada, por meio do programa PolyFlow, é necessário prever as seções da rosca que estarão aumentando e ou reduzindo a pressão, bem como quantificar esses valores. Por meio dessas informações as seções preenchidas da rosca são isoladas e simuladas separadamente, permitindo assim avaliar, em detalhes, o complexo fluxo que se desenvolve no interior dos canais de extrusão.

Como alternativa, adota-se o modelo unidimensional (1D) proposto e validado por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34] (ver Seção 2.4.2), que permite prever a

taxa de enchimento, pressão, temperatura de fusão nos canais e lacunas da rosca, potência de acionamento, torque e distribuição do tempo de residência (RTD). Esse modelo requer dois parâmetros empíricos para cada elemento de rosca (A1 e A2) a serem determinados experimentalmente ou numericamente usando a dinâmica de fluidos computacional (CFD).

Esse modelo 1D consiste em equações transientes (dependentes do tempo) para as taxas de enchimento, temperaturas e fração de massa das espécies dos elementos numéricos ao longo da rosca dupla. Dessa forma, para determinação de uma solução que corresponda a um estado de regime permanente, condições iniciais são impostas e as soluções do modelo evoluem até que o regime permanente se estabeleça.

Como, aqui, busca-se apenas determinar as regiões preenchidas da rosca dupla e prever a pressão nessas regiões, simplificações são incorporadas ao modelo proposto por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34] . Essas simplificações podem ser sumarizadas nos seguintes itens:

 Apenas as equações de conservação de massa e taxa de preenchimento são adotadas, desconsiderando-se as equações de energia. Não são considerados efeitos de transferência de calor e aquecimento viscoso. Adota-se um cenário isotérmico, porém os efeitos da temperatura e taxa de cisalhamento na viscosidade ainda são considerados;

- A solução dos sistemas de equações lineares algébricas resultantes do modelo simplificado representa uma condição de regime permanente plenamente estabelecido. Isso é alcançada quando há correspondência dos valores, dentro de uma determinada faixa de erros (resíduo), da taxa de alimentação e pressão consumida no bocal, calculados a partir do modelo, e os valores que são impostos para essas duas grandezas na forma de condições de contorno.

 A pressão consumida no bocal, ao invés de ser avaliada por equações analíticas incorporadas ao modelo, é determinada separadamente, para as distintas taxas de alimentação, via simulação CFD 3D (ver Seção 3.4.2). Também, os parâmetros A1 e A2 do modelo são obtidos através de simulações, ao invés de serem obtidos experimentalmente, seguindo o procedimento já descrito na Seção 2.6.2. Uma vez que o modelo 1D HME é modificado, torna-se prudente verificar o impacto das simplificações propostas na capacidade de descrever o perfil de preenchimento e pressões desenvolvidas ao longo das roscas. Como proposta para atender essa etapa, replica-se as mesmas condições adotadas por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34], onde o mesmo compara os dados experimentais da literatura, de um determinado estudo de caso, com os resultados das suas simulações. Havendo boa concordância entre os resultados, determinam-se as pressões e nível de enchimento dos canais que formam a geometria das roscas, agora, para a configuração do cabeçote extrusor miniaturizado em estudo.

Para desenvolvimento/implantação do código computacional do modelo 1D simplificado emprega-se o programa de computação numérica de análise e visualização de dados denominado MATLAB (do inglês *Matrix Laboratory*), pois seu ambiente de trabalho é fácil de ser utilizado, é uma ferramenta e uma linguagem de programação de alto nível, e tem como principais funções: construção de gráficos e compilação de funções, manipulação de funções específicas de cálculo e variáveis simbólicas.

3.4.4.1 Discretização do domínio computacional

Repetindo os mesmos procedimentos adotados por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34], mas agora para representação discreta do domínio computacional correspondente a rosca dupla miniaturizada, a geometria é dividida axialmente em um determinado número N de elementos finitos. A Figura 3.23 representa um exemplo da configuração discretizada do domínio computacional para uma determinada composição de rosca dupla.



🔿 Fluxo de alimentação 🔿 Fluxo de arraste \leftrightarrow Fluxo de pressão ⇔ Pressão no bico

Figura 3.23 – Esquema ilustrando a discretização 1D do domínio computacional empregado no modelo HME-modificado e as componentes de fluxo para a geometria do barril e roscas na configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor.

Nesse modelo, um elemento unitário 'i' pode experimentar três distintas componentes de vazão mássica, duas associados ao arraste do material através das roscas e o barril, que pode positivo e negativo, e uma associada ao fluxo resultante devido a pressão. Assim, para um elemento localizado entre outros elementos do domínio, o balanço de massa poderá resultar em até seis componentes de vazão mássica trocadas entre o elemento e seus adjacentes. É notável que os fluxos mássicos devido aos fluxos de arraste positivo são orientados na direção da matriz (bico de impressão) e de forma oposta, os fluxos mássicos de arraste negativos estão orientados na direção oposta da matriz. Já, os fluxos resultantes da pressurização, desenvolvidos, somente, nos canais completamente preenchidos da rosca dupla, podem ser positivos ou negativos, dependendo do sinal do gradiente de pressões resultante no elemento. Na Figura 3.24 está esquematizado as componentes de vazão mássica adotados no balanço de massa de cada elemento unitário que compõe o domínio e a respectiva simbologia adotada na representação dessas componentes.



Figura 3.24 – Elemento unitário da malha 1D representando todas as componentes de fluxo associadas ao modelo HME 1D. Componentes de fluxo associadas ao transporte de arraste e componentes de fluxo associadas aos efeitos de pressurização dos canais. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como cada tipo físico de elemento de rosca incorre no desenvolvimento ou não de determinados tipos de componentes de vazão mássica, é necessário identificar de alguma forma os distintos tipos de elementos que compõe a rosca dupla e identificar as componentes nulas para o balanço de massa em cada elemento. Conforme abordado na Seção 2.4.2 e da mesma forma proposta por Eitzlmayr *et al.* (2014) [34], os tipos físicos de elementos passíveis de representação no modelo são identificados, em ordem alfabética, de A a F e estão esquematizados na Figura 3.25.





Elementos do tipo 'A' representam elementos de rosca de transporte positivo. Do tipo 'B' representam elementos de rosca de transporte negativo (contrafluxo). Já os elementos 'D' e 'E' descrevem os chamados elementos de transição, sendo adotado o elemento 'D' para representar a transição entre elementos de transporte positivo e negativo, e para a transição entre elementos de transporte negativo e positivo emprega-se o tipo 'E'. Por fim, os elementos do tipo 'F' representam a matriz (bico de impressão).

O primeiro e o último elemento da malha, que representam, respectivamente, a região de entrada e a de saída do material na dupla rosca, recebem condições de contorno do modelo. Essas condições representam a taxa de alimentação do material e a pressão consumida na matriz (bico de impressão), respectivamente. Assim, uma parcela adicional referente a vazão mássica é adicionada ao primeiro elemento e ao último elemento é imposta uma componente de pressão que equivale a pressão consumida nos canais de descarga da extrusora.

O balanço de massa nos elementos da malha desse modelo, incorre na solução, simultânea, de sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDO) para os elementos parcialmente cheios (f<1), onde as taxas de enchimento são desconhecidas, e na solução de sistemas lineares de equações algébricas para os elementos parcialmente preenchidos (f=1), onde as pressões são desconhecidas.

3.4.4.2 Equações Governantes

O modelo HME 1D já foi apresentado na Seção 2.4.2 e as considerações sobre as simplificações propostas já foram discutidas na Seção 3.4.4. Contudo, para melhor organizar os procedimentos numéricos para implantação do algoritmo via MATLAB, as equações necessárias são reapresentadas aqui de forma a sistematizar e organizar a sequência de eventos para a solução do modelo.

As equações conservativas para o modelo simplificado são resumidas a uma única equação, a de conservação de massa (Eq. 39), descrita na forma discreta por:

$$\frac{dm_i}{dt} = \rho_i \dot{V}_i \frac{df_i}{dt} = \dot{m}_{f,i-1} + \dot{m}_{b,i+1} + \dot{m}_{p,i-1} - \dot{m}_{f,i} - \dot{m}_{b,i} - \dot{m}_{p,i}$$
(39)

As componentes de vazão mássica, \dot{m}_f , $\dot{m}_b e \dot{m}_p$, associados aos diferentes tipos físicos de elementos de rosca, são determinadas através das Eqs. 40 e 41.

$$\dot{m}_{fb,i} = \rho_i. k_{fb,i}. n. f_i. A_{cr}. D$$
 (40)

$$\dot{m}_{p,i} = -\frac{D^4}{k_{p,i}} \cdot \frac{\rho_i}{\eta_i} \cdot \frac{\Delta P_i}{\Delta x_i}$$
(41)

Já, as constantes adimensionais K_f , K_b e K_p dependentes dos parâmetros adimensionais de vazão e pressão características (A1 e A2), dos distintos tipos físicos de elementos, são determinadas pelas seguintes expressões (Eqs. 42 e 43)

$$K_{fb,i} = A_1 \frac{D^2}{A_{cr}} \tag{42}$$

$$K_{p,i} = \frac{A_2}{A_1} \tag{43}$$

Nos elementos onde f = 1 (elementos com canais preenchidos) as pressões desenvolvidas/consumidas estão relacionadas a viscosidade do material no local. Para determinar a viscosidade, o modelo reológico de Carreau é empregado para descrever os efeitos da taxa de cisalhamento e para os efeitos da temperatura, na viscosidade, é incorporado o modelo Williams–Landel–Ferry (WLF), que, geralmente, é adotado para matérias amorfos. Esses modelos combinados e descritos em termos de viscosidade representativa resultam na Eq. 44.

$$\eta_r = \frac{\eta_0. a_T}{\left[1 + \frac{\gamma_r.a_T}{\gamma_{crit}}\right]^m}$$
(44)

O parâmetro a_T do modelo Williams–Landel–Ferry (WLF) pode ser determinado pela Eq. 45.

$$a_T = \exp\left[\frac{-C1.\left(T - Tr\right)}{C2 + T - Tr}\right]$$
(45)

Com vistas em estender as capacidades do modelo 1D HME para, assim, atender a proposta deste trabalho, uma vez que se busca descrever o comportamento do PP que é um material semicristalino, opta-se por incorporar o modelo Carreau-Yasuda, acoplado a Lei de Arhenius, para a avaliação da viscosidade representativa. Com isso, para materiais semicristalinos, a viscosidade representativa é determinada pela Eq. 46.

$$\eta_r = \eta_0 a_T (1 + (a_T \lambda, \gamma_r)^a)^{\frac{n-1}{a}}$$
(46)

O parâmetro a_T referente a Lei de Arhenius, nesse caso, é determinado através da Eq. 47.

$$a_T = \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \tag{47}$$

Para determinar a taxa representativa, que possibilita a solução das equações de viscosidade representativa de ambos os modelos reológicos, a Equação 48 deve ser resolvida.

$$\dot{\gamma}_r = A_3 n \left[1 - \frac{\dot{V}}{A_1 n D^3} \right] \tag{48}$$

O parâmetro adimensional A_3 , pode ser aproximado a partir de A_2 pela Eq 49.

$$A_3 = A_2 \frac{h}{2D} \tag{49}$$

Onde h é determinado pela Eq. 50.

$$h = A_{cr}/l_{gap} \tag{50}$$

3.4.4.3 Algoritmo Numérico

Para a melhor apresentação da rotina de cálculos implementada através do programa Matlab, a partir da proposta do modelo HME 1D modificado, um fluxograma com a sequência de eventos foi elaborado e está representado na Fig. 3.25. No fluxograma, as linhas verdes indicam dados de entrada, linhas pretas indicam a sequência das rotinas executadas no algoritmo e linhas azuis representam as variáveis de saída ou resultados das rotinas.



Figura 3.26 – Fluxograma descrevendo as rotinas de cálculos do algoritmo proposto para a solução numérica do modelo HME 1D – Modificado. Fonte: Elaborado pelo autor.

O algoritmo proposto consiste basicamente em dados de entrada que relacionam informações referentes a geometria do barril e roscas, parâmetros dos modelos reológicos, condições de operação na extrusão e propriedades do material, bem como parâmetros para geração da malha e consequente discretização do modelo. Dessas informações, inicialmente, são identificados, através de índices, os elementos da malha e alocadas as informações provenientes dos dados de entrada conforme a natureza física do elemento de rosca representado por cada respectivo elemento finito da malha. Na sequência, os parâmetros do modelo HME (K_f , K_b e K_p) são calculados, porém conforme o tipo físico de elemento de rosca representando, é necessário ajustar as componentes que são nulas, atribuindo valor zero a elas. Uma vez determinados os parâmetros do modelo, e devidamente ajustados, é estruturado um sistema

de equações lineares que representam o balanço de massa para cada elemento da malha, cujas variáveis desconhecidas são as pressões relativas resultantes em cada elemento da malha. Da solução desse sistema de equações, as pressões são determinadas em cada elemento E retornando com esses valores. as equações de balanço de massa, é possível determinar a vazão mássica e conseguentemente a vazão volumétrica resultante em cada elemento da malha. Cabe destacar que a solução obtida até aqui se refere a um fluido newtoniano representativo e se considera, nessa primeira iteração, que toda a extensão das roscas está completamente cheia (f=1). Como as características geométricas dos tipos de físicos dos elementos que compõe as roscas determinam a capacidade de transporte de material, a partir da conversão das vazões mássicas em vazões volumétricas, a taxa de cisalhamento representativa, que servirá para determinar as pressões no caso dos materiais pseudoplásticos, é determinada para todos os elementos da malha. Adiante, dos modelos reológicos Carreau-WLF е Carreau-Yasuda Arhenius das taxas е representativas, as viscosidades representativas, em cada elemento, são calculadas. Novamente, sistemas de equações lineares, resultante do balanço de massa em cada elemento da malha, são solucionados considerando-se, agora, as viscosidades representativas correspondentes aos respectivos modelos viscoplásticos. Da solução destes sistemas, as pressões relativas (manométrica) em cada elemento de malha, para cada um dos modelos, são determinadas. Por fim, é necessário ajustar as pressões nas regiões parcialmente cheias (f<1) uma vez que a solução inicial considera o preenchimento pleno em toda extensão da rosca. Detalhes do procedimento adotado nesta etapa final serão melhor apresentados no decorrer dessa secão.

Um tratamento especial, para solução dos sistemas de equações do balanço de massa, é necessário no primeiro e último elemento da malha, que representam o local de alimentação do material e ponto de interseção com o início dos canais que formam o bico de extrusão, respectivamente. Nesses elementos são impostas condições de contorno que representam a vazão mássica de alimentação e a pressão consumida no bico (matriz) respectivamente. A componente da mássica $\dot{m}_{f,i-1}$ do primeiro elemento (i =1) é substituída pelo valor correspondente a vazão mássica de alimentação e as

componente de mássica $\dot{m}_{b,i} \in \dot{m}_{p,i-1}$, nesse elemento, são anuladas, uma vez que o primeiro elemento sempre representará uma condição de transporte positivo (elemento do tipo A), e não há pressurização a montante desse local, uma vez que a alimentação ocorre a pressão ambiente. Já, para o último elemento da malha (i = número de elementos da malha), somente é adequada a componente $\dot{m}_{p,i}$, que depende da diferença de pressões dada por $\Delta P_{(i)} =$ $P_{(i+1)} - P_{(i)}$, onde, para esse elemento, o termo $P_{(i+1)}$ é substituído pelo valor correspondente a pressão consumida para que o fluido escoe através do bico.

Como nas modificações do modelo HME 1D, propostas neste trabalho, há a imposição da condição de preenchimento pleno em toda a extensão das roscas (f(i) = 1) para a solução dos sistemas de equação da conservação de massa em cada elemento, regiões com pressões abaixo da pressão ambiente surgem na solução e evidentemente não representam corretamente o que está ocorrendo nessas regiões das roscas. Regiões com pressões abaixo da pressão ambiente podem caracterizar zonas que na realidade são parcialmente cheias (f < 1). Porém se precedidas de perfis de pressão decrescentes, ainda que abaixo da pressão ambiente, caracterizam regiões de elementos consumidores de pressão e que para serem transpassados devem estar totalmente cheios em uma certa extensão. Dessa forma, é possível ajustar a pressão, para que na posição de saída do fluxo em relação ao elemento de rosca consumidor de pressão, a mesma corresponda a pressão atmosférica. As demais pressões, de todos os pontos a montante dessa posição, são transladadas do valor correspondente ao módulo da pressão desse ponto de inflexão. Isso é possível pois a amplitude do consumo ou geração de pressão e a extensão do enchimento dependem apenas dos parâmetros geométricos das roscas e barril, bem como da viscosidade do material. Um esquema do procedimento adotado para a correção das pressões resultantes do modelo está ilustrado na Figura 3.26.



Figura 3. 27 - Esquema ilustrando o procedimento adotado para as correções das pressões no modelo HME 1D – Modificado. Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Tabela 12 estão relacionadas as equações e restrições adotadas no código numérico de forma a generalizar a sequência de eventos para que a rotina possibilite a previsão dos perfis de pressão bem como a extensão das zonas completamente preenchidas.

O código desenvolvido no programa MATLAB pode ser consultado, em sua integra, no Apêndice A. Para maior praticidade no uso do modelo 1D modificado, o código foi construindo com uma interface gráfica valendo-se do módulo *appDesigner*. Assim, foi possível compilar o código e usá-lo como um programa de computador sem a necessidade do programa MATLAB.

	Equações	Condições / Restrições
	$V = A D^2$	Se $Tipo_{(i)} == A \implies K_{b(i)} = 0$
	$K_{f(i)} = A_{1(i)} \frac{1}{A_{cr}}$	Se $Tipo_{(i)} == B \implies K_{f(i)} = 0$
1	$K_{b(i)} = A_{1(i)} \frac{D^2}{A_{cr}}$	Se $Tipo_{(i)} == C \implies \begin{cases} K_{b(i)} = 0 \\ K_{f(i)} = 0 \end{cases}$
	$K_{p(i)} = \frac{A_{2(i)}}{A_{1(i)}}$	$Se Tipo_{(i)} == D \implies \begin{cases} K_{b(i)} = 0 \\ K_{f(i)} = 0 \end{cases}$
	$\dot{m}_{f(i)} = \rho_{(i)} \cdot k_{f(i)} \cdot n \cdot f_{(i)} \cdot A_{cr} \cdot D$	$f_{(i)} = 1$
	$\dot{m}_{b(i)} = \rho_{(i)} \cdot k_{b(i)} \cdot n \cdot f_{(i)} \cdot A_{cr} \cdot D$	$f_{(i)} = 1$
2	$\dot{m}_{i} = -\frac{D^4}{2} \frac{\rho_{(i)}}{\rho_{(i)}} \frac{\Delta P_{(i)}}{\Delta P_{(i)}}$	$Se(i) < N \implies \begin{cases} \Delta P_{(i)} = P_{(i+1)} - P_{(i)} \\ \Delta X_{(i)} = X_{(i+1)} - X_{(i)} \end{cases}$
	$k_{p(i)} \eta_{(i)} \Delta x_{(i)}$	$Se(i) = N \implies \begin{cases} \Delta P_{(i)} = P_{bico} - P_{(i)} \\ \Delta X_{(i)} = X_{(i+1)} - X_{(i)} \end{cases}$
		$f_{(i)} = 1$
3	$ \dot{m}_{elem(i)} = m_{f(i-1)} + \dot{m}_{b(i+1)} + \dot{m}_{p(i-1)} - \dot{m}_{f(i)} - \dot{m}_{b(i)} - \dot{m}_{p(i)} = 0 $	$Se~(i) = ~1 ~ \Longrightarrow \begin{cases} \dot{m}_{f(i-1)} = ~\dot{m}_{alimentação} \\ \dot{m}_{p(i-1)} = ~0 \end{cases}$
		Se (i) = $N \implies \dot{m}_{b(i+1)} = 0$
4	$\dot{V}_{(i)} = \frac{\dot{m}_{f(i)} + \dot{m}_{b(i)} + \dot{m}_{p(i)}}{\rho_{(i)}}$	$ \rho_{(i)} = cte $
5	$\dot{\gamma}_{r(i)} = A_{3(i)} n \left[1 - \frac{\dot{V}_{(i)}}{A_{1(i)} n D^3} \right]$	Carreau — WLF Carreau Yasuda — Arhenius
6	$\eta_{r(i)} = \frac{\eta_0. a_{T(i)}}{\left[1 + \frac{\gamma_{r(i)}. a_{T(i)}}{\gamma_{crit}}\right]^m}$	Carreau — WLF
	$a_{T(i)} = \exp\left[\frac{-C1.(T_{(i)} - Tr)}{C2 + T_{(i)} - Tr}\right]$	
	$\eta_{r(i)} = \eta_0. a_{T(i)} (1 + (a_{T(i)}. \lambda. \gamma_{r(i)})^a)^{\frac{n-1}{a}}$	
7	$a_{T(i)} = \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_{(i)}} - \frac{1}{T_0}\right)\right]$	Carreau Yasuda — Arhenius
		Se $P_{(i)} \ge 0 \implies F_{corr} = 0$
		Se P _(i) < 0
8	$P_{corrigida(i)} = P_{(i)} + F_{corr}$	$ \begin{split} & Se \; \frac{dP_{(i+1)}}{dX_{(i+1)}} > 0 \; e \; \frac{dP_{(i)}}{dX_{(i)}} < 0 \Longrightarrow \\ & F_{corr} = P_{(i)} \end{split} $
		Se não \implies $F_{corr} = 0$

Tabela 12 - Sequência de equações a serem solucionadas no algoritmo proposto para solução do modelo HME 1D modificado. Fonte: Elaborado pelo autor.

3.4.4.4 Validação do Modelo HME 1D Modificado

Com vistas em testar a consistência da versão modificada do modelo 1D HME, proposta neste trabalho, são replicadas as mesmas condições dos testes desenvolvidos e documentado por Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34] com vistas no perfil de pressões ao longo das roscas extrusoras e as localizações e extensões das regiões completamente cheias.

3.4.4.4.1 Cenário A

Os testes propostos pelos autores Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34] empregaram uma extrusora rosca dupla ZSK 18 da Coperion (Alemanha) com diâmetro nominal das roscas de 18mm. O polímero Solupus (amorfo), que é um copolímero de enxerto de polivinil caprolactama-acetato de polivinila-polietilenoglicol projetado especificamente para indústria farmacêutica, foi empregado nos experimentos. A temperatura do barril, em toda sua extensão, foi mantida em 180 °C. A extrusora foi alimentada a uma taxa constante e igual a 1kg/s e a velocidade das roscas foi mantida em 60 rpm. As roscas extrusoras tem 360 mm de extensão e são compostas de um único tipo físico de elemento de transporte positivo, com passo e extensão de 24 mm (24/24). Dois sensores de pressão e um de temperatura são posicionados no barril, próximos as adjacências da matriz conformo ilustrado na Fig. 3.27.



Figura 3.28 – Esquema ilustrando a composição das roscas extrusoras e a localização dos sensores de pressão (PI) e temperatura (TI) conforme proposto no experimento de Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34] para a validação do se modelo HME 1D original. Adaptado de [34].

Eitzlmayr *et. al.* (2014) além de instrumentarem a extrusora, simularam o fluxo com o modelo 1D HME original proposto por eles mesmos. Resultados dessa simulação e experimentos demonstraram uma seção completamente

preenchida a cerca de 100 mm da matriz, onde a pressão se desenvolveu com um gradiente quase constante em direção à extremidade do parafuso, enquanto valores de pressão ambiente foram obtidos na seção parcialmente preenchida. A pressão consumida na matriz, nas condições descritas, é de aproximadamente 1,8 MPa. Os resultados desse estudo estão representados na Figura 3.29.



Figura 3.29 – Perfis de pressões, temperaturas e níveis de preenchimento, ao longo da dupla rosca para a velocidade de 60 rpm, obtidos para o polímero Solupus e apresentados por Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34]. Adaptado de [34].

Nas simulações do fluxo do Solupus foram os empregados os modelos Carreau-WLF, cujas constantes estão apresentadas na Tabela 13. A densidade desse material foi considerada constante e equivalente a 1000 kg/m^3.

Tabela 13 – Parâmetros dos modelos Carreau -WLF para o Solupus. Adaptado de [34].

Parâmetro	Valor
η_0	2999,9 Pa. s
Ýcrit	$5,7852 s^{-1}$
m	0,39489
T_r	170° <i>C</i>
<i>C</i> ₁	10,7203
C_2	135,4020° <i>C</i>

Já, as constantes adimensionais A1, A2 e A3 do modelo 1D HME, referentes ao elemento de rosca 24/24, assume os valores 0,3953, 766,5 e 39,33, respectivamente. Os valores A1 e A2 foram determinados experimentalmente e o valor de A3 foi aproximado pela Eq. 49.

Os parâmetros geométricos da extrusora ZSK 18, mesma dos testes e simulações, estão na Tabela 14.

Tabela 14 – Parâmetros geométricos da extrusora dupla rosca ZSK 18 da Coperion. Adaptado de [34].

Parâmetro	Valor
Diâmetro externo da rosca	17,8 mm
Diâmetro interno da rosca	11,6 mm
Diâmetro interno do barril	18,3 mm
Distância entre centros	15 mm

Para fins de comparação, uma vez que na proposta do modelo HME 1D modificado o sistema é tratado como isotérmico e limita-se a previsão da pressão e do nível de preenchimento das roscas (f), adota-se na simulação uma temperatura média, entre a temperatura do barril (180°C) e a temperatura medida no sensor TI (aproximadamente 188°C), equivalente a 184°C. Também, como no modelo modificado não pretende-se estimar a pressão consumida na matriz, como ocorre no modelo original, o valor corresponde a 1,8 MPa (Figura 3.29) é imposto como condição de contorno do modelo.

Como critérios para validação do modelo modificado aqui proposto, são consideradas a previsão da extensão e localização das zonas de enchimento pleno e de enchimento parcial, que serão comparadas aos resultados experimentais e numéricos apresentados por Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34]. Havendo boa correspondência entre esses parâmetros, considera-se que o modelo 1D modificado, apesar das alterações, muitas delas simplificações, ainda consegue descrever, ao menos, com boa correspondência o nível de preenchimento ao longo das roscas e as pressões geradas e consumidas nas regiões totalmente preenchidas.

3.4.4.4.2 Cenário B

Da mesma forma que Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34], simulam-se as condições dos experimentos apresentados no trabalho de Puaux et al. (2000). Embora esses estudos tenham sido mais voltados a determinação da distribuição dos tempos de residência do material na extrusora, aqui, apenas,

busca-se comparar as pressões e a extensão das zonas completamente cheias das roscas para assim validar o modelo HME 1D modificado proposto, uma vez que ele se limita a essa proposta.

Os dados dos experimentos de Puaux et al. (2000) foram obtidos em uma extrusora rosca dupla co-rotativa modelo Clextral BC 21, cujas roscas possuem uma extensão total de 900 mm e são compostas somente de elementos de transporte, combinando elementos de roscas direita e esquerda. Os parâmetros geométricos da extrusora Clextral BC 21 e os parâmetros do modelo HME 1D (A1 e A2), esses obtidos por Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34], estão descritos na Tabela 15 e Tabela 16, respectivamente.

Tabela 15 – Parâmetros geométricos da extrusora dupla rosca Clextral BC. Adaptado de [34].

Parâmetro	Valor
Diâmetro externo da rosca	25 mm
Diâmetro interno da rosca	16 mm
Diâmetro interno do barril	25,5 mm
Distância entre centros	21 mm

Tabela 16 – Parâmetros geométricos e adimensionais dos distintos tipos de elemento que compões a dupla rosca Clextral BC conforme apresentados por Eitzlmayr *et. al.* (2014). Adaptado de [34].

Тіро	Comprimento (mm)	Passo (mm)	A1	A2
Rosca direita	50	16	0,197	832
Rosca direita	50	25	0,308	798
Rosca direita	100	33	0,406	768
Rosca esquerda	50	25	0,308	798
Rosca direita	150	16	0,197	832
Rosca direita	200	25	0,398	798
Rosca direita	300	33	0,406	768

O material extrudado nesses testes foi o polietileno de baixa densidade (PEBD) com uma densidade de 920 kg/m^3 e conforme relatado, por ausência de mais informações, foi tratado por EitzImayr *et. al.* (2014) [34] como um fluido newtoniano com viscosidade constante de 500 Pa.s.

Na Figura 3.30 estão apresentados os resultados obtidos por Eitzlmayr *et. al.* (2014) [34] para três condições de processo distintas. No primeiro e segundo cenário a vazão mássica de alimentação corresponde a 6,5 kg/h para as velocidades de 500 e 300 rpm, respectivamente. Já, para o terceiro cenário a vazão de alimentação é 10,8 kg/h a uma velocidade de 300 rpm.



Figura 3.30 – Perfil de pressões e nível de preenchimento obtidos por Eitzlmayr para as condições: (a) 500 rpm, e 6,5 kg/h, (b) 300 rpm e 6,5 kg/h e (c) 300 rpm e 10.8 kg/h. Adaptado de [34].

3.4.5 Análise do fluxo – Regiões plenamente cheias (f = 1)

3.4.5.1 Delimitações

Essa etapa consiste em a partir dos resultados do perfil de temperaturas do barril (configuração I) já na condição de regime transiente periódico estabelecido, da previsão das pressões consumidas no bocal e a localização e extensão das regiões completamente cheias da rosca dupla pelo modelo HME – modificado, simular o fluxo pseudoplástico não isotérmico dessas regiões com vistas na investigação do comportamento do polímero PP RP141 em detalhes que somente as análises tridimensionais alcançam.

São consideradas oito cenários para representar as condições de operação da rosca dupla nas análises dessa etapa, que correspondem as taxas de alimentação de 40 g/hr e 20 g/hr para as velocidades de 80 e 100 rpm, pois correspondem as condições de operação previstas para a operação com PP. As temperaturas ao longo do barril são impostas de acordo com as médias das temperaturas obtidas das simulações térmicas do barril (Seção 3.3.6) e podem ser consultadas na Apêndice B.

3.4.5.2 Procedimentos da simulação

Nas análises CFD dessa etapa o fluido é tratado como pseudoplástico e representado pelo modelo Carreau-Yasuda acoplado a Lei de Arrhenius para capturar os efeitos da taxa de cisalhamento e temperatura na viscosidade dinâmica do PP RP141, respectivamente.

Da mesma forma e pelos mesmos motivos, como ocorreu nas análises para determinação dos parâmetros adimensionais dos elementos de rosca (Seção 2.5.1), emprega-se a técnica MST para as simulações dessa etapa.

Os domínios computacionais que representam os trechos cheios das roscas, dois oito cenários avaliados, variam de extensão e composição conforme são previstas através do modelo HME-modificado para as dadas condições de operação, bem como as temperaturas ao longo do barril previstas pelas simulações 3D. Um exemplo da composição desses domínios e a sua relação com os resultados das etapas anteriores está ilustrado na Figura 3.31.



Figura 3.31 – Esquema ilustrando a interrelação dos resultados das etapas dos estudos e a representação dos domínios para as análises CFD das regiões completamente cheias das roscas. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para composição da malha adota-se, novamente, elementos hexaédricos, em uma configuração estruturada, para discretização do subdomínio estático (que representa o fluido) e para melhor representação da complexa geometria do subdomínio dinâmico (roscas) emprega-se elementos tetraédricos não estruturados. Ainda, adota-se técnicas de refinamento local das malhas, buscando representar com maior precisão as regiões onde ocorrem os maiores gradientes de velocidade. Na zona de interpenetração das roscas é aplicado um nível de refinamento maior por meio da divisão das arestas do modelo pelo método "*element size*" e da mesma forma nas paredes é empregada a técnica de insuflamento (*insuflation*) buscando garantir ao menos dois elementos na direção radial das folgas entre roscas e barril. Já para malha das roscas, um refinamento localizado na região dos filetes é aplicado pela técnica "*surface refinement*". O resultado das malhas com as técnicas de refinamento está representando na Figura 3.32.



Figura 3.32 – Esquema ilustrando a geração das malhas do domínio computacional das regiões completamente cheias das roscas, evidenciando os locais e os resultados dos métodos de refinamento empregados. Fonte: Elaborado pelo autor.

Testes prévios da independência do tamanho de malha foram realizados, e para os estudos conclui-se que há estabilização dos resultados com as malhas composta por um total de 621.540 elementos. Assim, adota-se para as simulações dessa etapa esse nível de refinamento.

As condições de contorno impostas ao modelo, para fins de representação, são nomeadas de entrada, saída, paredes externas, paredes internas e roscas e estão esquematizadas na Figura 3.33.



Figura 3.33 – Representação dos locais onde as condições de contorno são impostas nas análises CFD e suas respectivas nomenclaturas. Fonte: Elaborado pelo autor. Nessa etapa, as condições de contorno são divididas para duas situações. Uma representa o trecho de preenchimento pleno conectado ao bico de extrusão, onde na saída do fluido é imposta a pressão determinada na etapa da simulação do fluxo no bico. A outra, representa as demais regiões preenchidas e denotam situações onde as pressões devem corresponder a pressão atmosférica (101,3 kPa) tanto na entrada quanto na saída do fluido. Assim, as condições de contorno são dadas por:

1 - Condições de Contorno - Seção adjacente ao bico

CC1 – Entrada do Fluído – Força normal e tangencial nulas (não há esforços externos atuantes no extrudado – pressão ambiente);

CC2 – Saída do Fluído – Força normal equivalente a pressão determinada no bico para temperatura de processo);

CC3 – Parede Externas – Velocidade normal e tangencial nula (sem escorregamento na parede / paredes com temperatura imposta correspondente as determinadas nas simulações do perfil térmico).

CC4 – Parede Internas – Velocidade angular correspondente a velocidade imposta nas roscas / 100 e 80 rpm (no sentido horário).

CC5 – Roscas - Velocidade angular correspondente a 100 e 80 rpm no sentido horário.

2 - Condições de Contorno – Demais seções

CC1 – Entrada do Fluído – Força normal e tangencial nulas (não há esforços externos atuantes no extrudado – pressão ambiente);

CC2 – Saída do Fluído – Força normal e tangencial nulas (não há esforços externos atuantes no extrudado – pressão ambiente);

CC3 – Parede Externas – Velocidade normal e tangencial nula (sem escorregamento na parede / paredes com temperatura imposta correspondente as determinadas nas simulações do perfil térmico).

CC4 – Parede Internas – Velocidade angular correspondente a velocidade imposta nas roscas / 100 e 80 rpm (no sentido horário).

CC5 – Roscas - Velocidade angular correspondente a 100 e 80 rpm no sentido horário.

3.4.6 Ensaios Reológicos – PP RP141

O material empregado nos ensaios de reologia é o polímero PP RP141, que é um copolímero aleatório semicristalino de alta taxa de fluidez projetado com vistas na moldagem por injeção.

Para a composição das curvas de viscosidade desse material, necessárias para a aproximação dos parâmetros dos modelos Carreau-Yasuda e Lei de Arhenius empregados nas simulações, avalia-se através de técnicas de reômetria capilar e de placas paralelas a viscosidade do material em um espectro de taxas de cisalhamento varrendo de 1 s⁻¹ a 2000 s⁻¹ para três isotermas (180°C, 200°C e 220°C). Os ensaios são divididos em dois equipamentos, para faixa de baixas taxas de cisalhamento (1 s⁻¹ a 100 s⁻¹) emprega-se o reômetro de placas paralelas e para a faixa de altas taxas (200 s⁻¹ a 2000 s⁻¹) de cisalhamento o reômetro capilar.

Os ensaios para a baixas taxas de cisalhamento (1 s⁻¹ a 100 s⁻¹) foram realizados no reômetro de placas paralelas ARG2-TA com disco de diâmetro de 20 mm. A folga entre as placas foi ajustada em 1 mm com amplitude de deformação de 10% e frequência entre 0,1 a 400 rad/s. As viscosidades foram medidas para nove velocidades distintas para as temperaturas de 180°C, 200°C e 220°C. As amostras foram ensaiadas após secagem em estufa a vácuo a 80°C por 2 horas.

Para as taxas mais elevadas (200 s⁻¹ a 2000 s⁻¹), os ensaios foram realizados no reômetro capilar Göttfert, modelo RHEOGRAPH 25, com barril de 12 mm de diâmetro e um capilar com as seguintes dimensões: diâmetro do capilar de 0,75mm e comprimento do capilar de 30mm (L/d = 40). As viscosidades foram medidas empregando-se cinco velocidades diferentes, e os ensaios foram realizados a 180°C, 200°C e 220°C. As amostras foram ensaiadas após secagem em estufa a vácuo a 80°C por 2 horas. Por se tratar de um material não newtoniano, a correção de Rabinowitsch foi aplicada, ponto a ponto, aos dados experimentais.

Como os dados desses ensaios representam uma etapa intermediária e necessária para as simulações do fluxo no interior do cabeçote de extrusão aqui propostas, os resultados desses ensaios já são apresentados aqui. As curvas de viscosidade obtidas dos ensaios, para as três isotermas, estão representadas na Figura 3.34 e os dados podem ser consultados na Tabela 17.

Taxa de	180ºC	200°C	220ºC
Cisalhamento (1/s)	Viscosidade (Pa.s)		
1,0	1028,0	623,9	394,2
1,3	997,7	595,7	391,1
1,6	978,6	588,8	386,7
2,0	939,9	589,0	382,4
2,5	899,3	574,7	374,0
3,2	853,4	538,1	361,0
20	587,613	330,493	299,187
50	406,323	259,982	209,393
103	288,822	198,416	155,912
205	199,459	139,979	113,243
512	113,08	83,7678	70,528
721	89,5237	67,7173	57,6944
1054	70,2637	54,2448	45,9459
2014	43,0845	41,3465	29,2812

Tabela 17 – Viscosidades obtidas dos ensaios de reômetria para PP RP141 nas temperaturas de 180°C, 200°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.



Figura 3.34 – Viscosidade em função das taxas de cisalhamento do PP RP141 para as temperaturas de 180°C, 200°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

3.4.6.1 Parâmetros Carreau-Yasuda e Lei de Arrhenius – PP RP141

Para ajustar os parâmetros dos modelos Carreau-Yasuda e Lei de Arrhenius emprega-se o programa ANSYS POLYMAT®, por ser um programa gráfico interativo que permite ajustar parâmetros de modelos variados para fluidos newtonianos generalizados, a partir de curvas de viscosidade e taxa de cisalhamento obtidas dos dados experimentais, como as obtidas para o PP RP141 (Tabela 17).

As etapas para aproximação das constantes dos modelos Carreau-Yasuda e Lei de Arrhenius no POLYMAT, para o PP RP141, seguem a seguinte sequência:

a. Seleciona-se o modelo de fluido que corresponda ao modelo Carreau Yasuda e fixa-se a viscosidade a taxa infinita em zero.

b. Seleciona-se o modelo térmico que corresponda ao modelo da Lei de Arrhenius e fixa-se a temperatura de referência em 180°C (453,15K).

c. Especifica-se as curvas de dados experimentais, que nesse caso são:3 curvas de viscosidade vs. taxa de cisalhamento, as temperaturas que correspondem a cada uma das curvas e um nome para o arquivo.

d. Desenha-se as curvas experimentais na interface gráfica.

e. Especifica-se o nome do arquivo de dados do material no qual ANSYS POLYMAT® deve salvar os parâmetros do modelo quando o ajuste for concluído.

f. Define-se os parâmetros numéricos para o ajuste da curva, onde apenas se restringe a faixa de solução para representar a viscosidade em taxas de cisalhamento entre 1 e 100000 s^-1 e adota-se o método automático de aproximação.

g. Executa-se a rotina de cálculo, variando cada um dos parâmetros do material que não tem valor fixo até que a melhor combinação seja determinada. Por padrão, as curvas calculadas são exibidas no mesmo gráfico que as curvas de dados experimentais para permitir comparação.

Os resultados dessa etapa estão ilustrados na Figura 3.35 onde é possível observar a tela de resultados do POLYMAT para o ajuste dos parâmetros dos modelos Carreau-Yasuda e Lei de Arrhenius, considerando os dados experimentais do PP RP141(Tabela 17) obtidos para as temperaturas de 180°C, 200°C e 220°C.



Figura 3.35 – Ajuste de parâmetros dos modelos Carreau-Yasuda e Lei de Arrhenius, para os dados experimentais do PP RP141, obtidos com o programa POLYMAT. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como no POLYMAT os símbolos empregados nos modelos não são os mesmos adotados neste trabalho, representa-se na Tabela 18 os símbolos correspondentes e seus valores conforme resultados apresentados na Figura 3.35.

ηο	995,0283	Pa.s
E/R	3811,786	К
λ	0,02979269	S
а	0,6151207	-
n	0,3025284	-
To	180	°C

Tabela 18 – Parâmetros dos modelos Carreau-Yasuda e Lei Arrhenius obtidos de dados experimentais do PP RP141. Fonte: Elaborado pelo autor.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Análise Térmica do Barril

4.1.1 Refinamento de malha – Testes de independência

Como as respostas dos estudos pela técnica CFD podem ser influenciados pelo nível da discretização do domínio computacional, e não somente pela adoção de hipóteses e ou modelos inapropriados para a descrição do problema físico em questão, estudos da Configuração II permitiram estabelecer o nível de refinamento apropriado a ser adotado nas simulações térmicas do cabeçote de extrusão em estudo.

Considerando um progressivo refinamento da malha CFD, são realizadas 8 iterações, avaliando-se a evolução da temperatura de referência conforme já discutido na Seção 3.3.11. Os oito níveis de refinamento adotados estão sumarizados na Tabela 19.

Tabela 19 - Níveis de refinamento de malha adotados nos estudos da influência da qualidade da malha nos resultados das análises térmicas. Fonte: Elaborado pelo autor.

lteração	Número de Elementos da Malha CFD
1	3946
2	8692
3	22916
4	61704
5	164438
6	300332
7	694728
8	2626620

Os resultados desse processo de testes da independência das simulações em relação ao nível de refinamento da malha estão representados na Figura 4.1, onde estão graficamente relacionadas as temperaturas de referência locais em função do logaritmo do número de elementos da respectiva malha CFD.



Figura 4.1 – Resultados dos testes de independência das temperatura em função do número de elementos, caracterizando o nível de refinamento requerido nos estudos CFD. Fonte: Elaborado pelo autor.

De forma geral, é notável a pouca influência do nível de discretização da malha em relação as temperaturas de referência obtidas uma vez que as temperaturas se mantêm em uma estreita faixa de valores, variando entre, aproximadamente, 215,5 e 219,5°C. Isso pode ser explicado pela simplificação que ocorre nas equações constitutivas do modelo quando nas simulações assume-se representar os coeficientes convectivos por valores constantes, obtidos de correlações empíricas. Implicando, assim, unicamente no balanço de energia, sem que ocorra o balanço de massa uma vez que o domínio computacional adotado representa um sólido sem a necessidade de representar o ar (fluido) circundante com o qual troca calor por convecção.

Apesar da pouca influência do nível de refinamento nos resultados das simulações, constata-se que malhas constituídas de mais de 62000 elementos não apresentam mais alterações significativas nos resultados e que as mesmas tendem a um valor único de aproximadamente 219,1°C. Assim, é adotado no decorrer dos demais estudos malhas de níveis de refinamento correspondentes a esse número de elementos, uma vez que o aumento no custo computacional das simulações pelo aumento do nível de refinamento da malha a partir deste nível não é mais justificado.
4.1.2 Incremento temporal – Testes de independência

Da mesma forma que a malha pode influenciar as respostas obtidas nas análises CFD, as simulações que dependam do tempo (transientes) podem sofrer influência do valor do passo temporal adotado. Assim, é coerente nesse tipo de análise avaliar o passo temporal apropriado por técnicas semelhantes as adotadas nos testes de independência dos resultados em relação ao nível de refinamento da malha.

Para tal, simulações em regime transiente são realizadas, a partir da Configuração II, percorrendo valores de um intervalo de passos temporais, entre 0,01 e 10s. Dessas, são monitoradas as temperaturas de referência ao final de um intervalo de análise equivalente a um período de tempo de 45 min. (2700s). Na Tabela 20 estão resumidas as seis iterações de passo temporal adotadas nos testes de independência das simulações em relação ao passo temporal adotado.

Tabela 20 – Resultados dos testes de independência do passo temporal das análises transientes em função do número de elementos da malha CFD. Fonte: Elaborado pelo autor.

lteração	Passo Temporal (s)	Número de Incrementos Temporais	Temperatura de Referência (°C)
1	0,01	270000	218,62
2	0,05	54000	218,62
3	1	2700	218,62
4	2	1350	218,62
5	5	540	218,56
6	10	270	218,45

Para a melhor compreensão dos resultados obtidos nos testes é construída a curva que representa a evolução da temperatura de referência em relação ao número de iterações resultantes dos distintos passos temporais adotados nas seis iterações avaliadas. Essa curva está representada na Figura 4.2.



Figura 4.2 - Resultados dos testes de independência das temperaturas em função passo temporal das análises transientes, caracterizando o nível de refinamento requerido nos estudos CFD. Fonte: Elaborado pelo autor.

Dos resultados obtidos, percebe-se uma fraca dependência das temperaturas obtidas em relação aos valores de passo temporal avaliados, uma vez que a temperatura monitorada variou menos de 0,5°C para uma considerável faixa de valores de passo temporal. Contudo, nota-se que para passos temporais inferiores a 2s há uma tendência a convergência da temperatura para um único valor, demonstrando que a partir desse passo temporal os estudos passam a não sofrer influências em seus resultados.

Como conclusão dessa etapa e dos resultados já discutidos, convencionase o passo temporal correspondente a 1s para as análises transientes em CFD.

4.1.3 Validação do modelo computacional

Nas análises CFD os resultados muitas vezes são norteados de incertezas e uma forma comum de comprovar a coerência dos resultados provenientes dessa técnica ocorre pelo confrontamento dos dados simulados com dados de experimentos reais equivalentes.

Nesse intuito, uma forma de validar parcialmente as condições e hipóteses estabelecidas sobre o cenário estudado, foi replicar um teste experimental que ocorreu no processo de desenvolvimento do cabeçote extrusor por Justino Netto (2022) [10] e já discutido na Seção 3.3.13. Nesse teste, um protótipo do cabeçote extrusor, correspondente a geometria da Configuração II, foi aquecido durante um tempo aproximado de 50 minutos desde a temperatura ambiente de 20°C. Com uma câmara termográfica (ver Seção 3.3.13) foram coletadas as temperaturas em dois pontos no tempo correspondente a aproximadamente 18 min. do início do aquecimento.

Como desdobramento dessa etapa, através da Figura 4.3 foi possível comparar os resultados referentes as temperaturas obtidas na simulação e as obtidas nos testes experimentais realizados no protótipo, considerando que as mesmas correspondam a um tempo de 18 minutos (1080s) do início do aquecimento.



Temperature (Solid) [°C]

Figura 4.3 – Comparação entre as temperaturas obtidas da simulação e instrumentadas, em um protótipo correspondente a configuração II, correspondentes ao instante de 1080s desde a temperatura de 20°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

As temperaturas obtidas na simulação apresentam uma margem pequena de divergência quando comparadas as do experimento, sendo um pouco mais acentuada a diferença para a temperatura avaliada na região central do cabeçote (104,2°C). Os desvios são de 2,19 e 4,35 % para as temperaturas na zona de alimentação e no centro do barril, respectivamente.

Esses resultados demonstram a boa correspondência das técnicas adotadas na simulação do comportamento térmico do cabeçote extrusor e indicam a assertividade nas condições de contorno impostas nas análises. Assim, confirmam as hipóteses estabelecidas para o estudo proposto. Contudo, devido a similaridade dos fenômenos térmicos envolvidos e das geometrias, em ambas as configurações, I e II, é esperado também uma boa aproximação dos resultados das simulações em relação aos experimentais para essa outra configuração.

4.1.4 Perfil de temperaturas

A evolução das temperaturas ao longo dos canais que formam a região de fluxo do cabeçote para a Configuração I, obtidas das simulações em regime transiente periódico (Seção 3.3.15), está representada na Figura 4.4. Nesse gráfico é possível observar as temperaturas ao longo da extensão do cabeçote, desde a temperatura ambiente (20°C) até que o sistema atinja a condição de regime transiente periódico plenamente estabelecido. Para esta etapa, foram coletados 300 pontos equidistantes, ao longo da extensão dos canais que formam o barril, localizados sobre a silhueta equivalente aos segmentos de linhas na cor vermelha, conforme ilustrado na Figura 4.4.



Figura 4.4 – As linhas em vermelho identificam na imagem a localização onde são tomados os valores para a descrição do perfil de temperaturas desenvolvidas no barril da configuração I nas análises CFD. Fonte: Elaborado pelo autor.



Figura 4.5 – Evolução das temperaturas no tempo ao longo do cilindro de extrusão para a configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor.

Alguns pontos importantes podem ser concluídos a partir da Figura 4.1, são eles:

Para um tempo de aquecimento, de aproximadamente, 50 min.(3000s)
o barril alcança as temperaturas definidas para o processo e assim considera-se que o sistema esteja apto para começar a operação de impressão 3D. Nota-se que a zona de alimentação ainda apresenta um lento aumento na temperatura, porém para esta zona atender as condições para início do processo basta que a temperatura seja inferior a 60°C.

- O tempo necessário para que o sistema alcance o equilíbrio térmico transiente periódico é de aproximadamente 5 horas (18000s), ou seja, representa o tempo que o sistema leva para que as temperaturas se estabilizem na zona de alimentação. Porém, as temperaturas nas demais zonas ainda variam dentro de uma estreita faixa (regime transiente periódico) devido aos efeitos da intermitência na operação dos aquecedores adotados para o controle das temperaturas do processo.

- A disposição e a potências dos aquecedores adotados no cabeçote se demonstraram coerentes para a obtenção das temperaturas definidas para as distintas regiões do barril, onde a zona de alimentação mantém-se com temperaturas inferiores a 60°C, as zonas de plastificação e transporte na ordem de 180°C e as zonas de mistura e descarga em aproximadamente 220°C.

- É notável que devido as diferenças de temperatura no cabeçote extrusor, essas, por sua vez, induzem fluxos de calor que estão orientados na direção axial e com sentido do bocal em direção a zona de alimentação. Isso deve-se ao fato de que a zona de alimentação é a região onde se desenvolvem as menores temperaturas no modelo. Assim, confirma-se a importância de se adotar um material isolante, como PTFE, para criar uma barreira para o calor proveniente das zonas de temperaturas mais elevadas. Evitando, assim, com que essa zona alcance temperaturas incompatíveis para o processo de extrusão do PP.

A evolução da distribuição das temperaturas no barril e canais de extrusão, desde a temperatura ambiente até que se estabeleça o regime transiente periódico, pode ser observado na Figura 4.6.



Figura 4.6 – Evolução das temperaturas do barril, na configuração I, desde a temperatura ambiente (T = 20°C) até que o regime transiente período seja estabelecido (regime de operação). Fonte: Elaborado pelo autor.

É evidente que as maiores variações nas temperaturas ocorrem em relação a direção vertical (direção do fluxo de calor resultante). Já nas seções transversais do barril, que correspondem a direção horizontal, as temperaturas tendem a apresentar pouca variação. Em outras palavras, é notável uma variação considerável nas temperaturas das seções ao longo da direção vertical,

enquanto que nas seções transversais, que estão orientadas na direção horizontal, percebe-se uma pequena variação nas temperaturas ao longo da seção. Isso deve-se a orientação do fluxo de calor condutivo resultante da diferença de temperaturas entre a zona de alimentação (zona fria do sistema) e as demais zonas que ficam progressivamente mais quentes a medida que se aproximam da zona de descarga (zonas quentes do sistema).

Também, é interessante observar o comportamento dos aquecedores durante o processo de aquecimento do barril até o equilíbrio do sistema em relação ao ponto de operação estabelecido para o processo. Na Figura 4.7 estão apresentadas as curvas da evolução das temperaturas dos três sensores (P1, P2 e P3) responsáveis pelo controle do acionamento dos conjuntos de aquecimento AC_I, AC_II e AC_III (ver Figura 3.7). Para uma melhor compreensão dos resultados, algumas regiões (nomeadas de A, B, C e D) do gráfico são ampliadas e novamente reapresentadas para a melhor compreensão dos eventos envolvidos.



Figura 4.7 – Evolução das temperaturas nos locais correspondentes aos termistores demonstrando a resposta intermitente dos aquecedores no intuito de manterem as temperaturas definidas para as zonas de processamento da dupla rosca. Fonte: Elaborado pelo autor.

Dos resultados apresentados na Figura 4.7 é possível descrever a evolução, ao longo do tempo, no que se refere à operação dos conjuntos de aquecimento do sistema. Dessa forma, se estabelece a compreensão das suas

contribuições individuais no processo de aquecimento até que as condições de ponto de operação sejam estabelecidas. De forma cronológica, conclui-se:

1° Os três conjuntos de aquecedores estão ligados e as temperaturas nos sensores P1, P2 e P2 aumentam progressivamente a medida que se avança no tempo. Nota-se que a temperatura do sensor P1 aumenta a uma taxa levemente maior quando comparada as taxas nos demais sensores e que a temperatura no sensor P3 é a que menos se eleva em relação ao tempo. Isso é evidenciada pela inclinação das curvas do instante inicial até aproximadamente 28,5 min. (1714s).

2° Após 28,5 min. a temperatura do sensor P2 alcança o valor correspondente ao definido para o desligamento do conjunto AC_II estabelecida em 180 °C. Assim, a temperatura nesse sensor diminui em um curto avanço no intervalo de tempo (ver na Fig. 4.7 a região A) e retorna a subir com o avançar do tempo. Nesse momento, o calor proveniente do conjunto AC_I e AC_II que estão em operação conduzem calor suficiente para que a temperatura do sensor P2 volte a aumentar mesmo que o conjunto AC_II permaneça inativo.

3° Aos 34,1 min. (2046s) a temperatura do sensor P3 alcança os 180°C definidos para o conjunto AC_III ser desabilitado. O conjunto AC_III passa a operar intermitentemente a medida que a temperatura do sensor P3 fica ao menos um grau abaixo do valor definido. Esse processo de intermitência é se estende no intervalo entre 34,1 e 39,1 min (2350s) (ver na Fig. 4.7 a região D). A partir 39,1 min. o conjunto AC_III permanece desligado. Mas é notável que o a parir desse momento a temperatura do sensor P3 continua a aumentar. Isso se deve ao fluxo de calor conduzida das outras regiões mais aquecidas que se encontram a montante.

4° Já aos 40,6 min. (2437s) a temperatura no sensor P1 assume o valor de 220°C, definido para operação do conjunto AC_I. A partir desse instante o conjunto AC_I começa a operação intermitente (ver na Fig. 4.7 a região B) e nota-se que os demais conjuntos de aquecimento estão inativos uma vez que as temperaturas em seus respectivos sensores estão acima dos valores estabelecidos.

5° Por fim, as curvas de temperatura dos sensores tornam-se assintóticas (18000s) caracterizando que o regime transiente periódico está estabelecido, uma vez que há certa oscilação periódica das temperaturas devido ao efeito de intermitência dos aquecedores. Pode-se concluir que nessa condição somente

o conjunto AC_I opera de forma intermitente e os demais conjuntos permaneces desligados. Em outras palavras, o calor necessário para manter as temperaturas do sistema, a partir do equilíbrio, é proveniente única e exclusivamente do conjunto AC_I.

As temperaturas desenvolvidas nas paredes que formam os canais de extrusão são de grande interesse uma vez que devem ser controladas para corresponderem as requeridas ao processo. Para a condição de regime transiente periódico plenamente desenvolvido (t = 18000s), a distribuição das temperaturas nas superfícies que formam os canais de extrusão resultante das análises computacionais pode ser observada na Figura 4.8.



Figura 4.8 – Distribuição das temperaturas no entorno dos canais de extrusão ao longo das distintas zonas de processamento para a geometria correspondente a configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor.

Dos resultados ilustrados na Figura 4.8, por conveniência, são determinadas as temperaturas médias correspondentes as superfícies dos canais que compõe a extensão de cada zona de processamento. Assim, é possível representar com um único valor a temperatura de operação obtida para

cada uma das zonas de processamento na configuração estudada, da mesma forma como são comumente apresentadas nas literaturas afins. Os resultados dessa etapa estão representados na Figura 4.9.



Figura 4.9 – Representação das temperaturas médias obtidas dos dados das simulações para as distintas zonas de processamento da configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor.

As temperaturas médias das zonas de alimentação, plastificação, transporte, mistura e descarga são de 63,98 °C, 180,34 °C, 193,01 °C, 207,93 °C e 219,03 °C, respectivamente. Essas temperaturas são adotadas na parte de simulação do fluxo nas regiões plenamente preenchidas da rosca, onde representarão as temperaturas nas paredes do barril, impostas como uma condição de contorno (Seção 3.4.5).

Para a verificação do nível de homogeneidade das temperaturas resultantes, no entorno do cilindro de extrusão, são examinadas oito seções transversais dispostas ao longo do barril de forma a percorrerem as distintas zonas de processo presentes. Como resultado, estão ilustrados na Figura 4.10 as seções adotadas e as respectivas distribuições de temperaturas, bem como suas localizações em relação ao modelo.



Figura 4.10 – Perfil de temperaturas no entorno dos canais de extrusão, em distintas seções transversais do barril, para geometria correspondente a configuração I. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como já discutido, é esperado que haja pouca variação de temperatura ao longo das seções transversais do barril. Tal se evidência através das distribuições de temperaturas obtidos nas seções avaliadas (Figura 4.10), as quais apresentaram variação máxima da temperatura, no entorno dos canais, não superior a 2°C. A assimetria da geometria proposta ao barril e a disposição dos elementos de aquecimento pode explicar essa moderada variação de temperaturas no entorno dos canais de extrusão. Porém, questões de projeto, como a complexidade de fabricação, muitas vezes restringem ou limitam as possibilidades de fabricação. No contexto deste estudo, um dos motivos que conduziram a escolha de uma geometria prismática em detrimento de uma geometria cilíndrica para a formação do barril é justamente a maior simplicidade nos processos de fabricação envolvidos. Assim, já era esperada certa variação nas temperaturas, mas não se mesurava a ordem dessa variação.

Os fluxos de calor resultantes no Co-TSE miniaturizado, representados no plano médio, para os intervalos de tempo correspondentes a 600s (10 min.), 1200s (20 min.), 1800s (30 min.) e 18000s (5 horas) podem ser observados na Figura 4.11.

Consta-se que os fluxos de calor resultantes no modelo na condição de equilíbrio térmico do sistema (regime transiente periódico, t = 18000s) estão dominantemente orientados na direção axial (vertical), uma vez que nessa condição somente o conjunto de aquecimento AC_I opera e de forma intermitente, emanando calor da região próxima do bocal em sentido as demais regiões do sistema.

Para os tempos de 600s e 1200s o fluxo de calor resultante representa uma condição onde nenhum dos sensores de temperatura alcançou as temperaturas especificadas, assim implicando numa condição onde os 3 conjuntos de aquecedores estão ativos. É notável, que as linhas de fluxo de calor estão majoritariamente orientadas em uma direção obliqua que podem ser decompostas em 2 componentes, orientadas na direção axial e radial, e no sentido a zona de alimentação e no sentido as paredes dos canais de extrusão, respectivamente.

Já, para o cenário que corresponde ao tempo de 1800s somente o conjunto de aquecimento AC_II está inoperante, uma vez que a temperatura do sensor P2 está acima da especificada. Percebe-se que na região central do barril as linhas do fluxo de calor resultante estão orientadas na direção axial em sentido a zona de alimentação. Já nas demais regiões, as linhas de fluxo se mantêm obliquas devido a ação do fluxo de calor dos conjuntos de aquecedores AC_I e AC_III.



Figura 4.11 – Representação vetorial das componentes resultantes do fluxo de calor para a geometria da configuração I nos instantes 600, 1200, 1800 e 18000 s. Fonte: Elaborado pelo autor.

4.1.5 Propostas de melhorias

Dos dados obtidos nas análises térmicas desempenhadas em CFD e da versatilidade de se explorar cenários diversos através da simples alteração de parâmetros e ou geometria no estudo, é possível explorar alguns aspectos inerentes ao desenvolvimento do cabeçote extrusor miniaturizado.

Um ponto passível de melhoria trata-se do tempo de aquecimento do sistema, até que alcance o ponto de operação, que está demasiadamente longo, em torno de 50 minutos. Para uma aplicação comercial e comparando ao tempo de preparação de sistemas de impressão 3D convencionais, considera-se que o tempo de aquecimento não deva ser superior a 10 minutos para alcançar o ponto de operação.

É evidente que essa proposta requer a alteração das potências dos aquecedores uma vez que não se pretende alterar a geometria do barril. Empregar aquecedores com maior potência permite entregar mais calor por unidade de tempo, resultando em menor tempo de aquecimento. Contudo, a distribuição desse calor em relação aos conjuntos de aquecimento pode ser melhorada se observada a evolução dos fluxos de calor resultantes no processo de aquecimento do sistema até o seu ponto de operação.

Da observação do comportamento térmico na configuração I, após algumas iterações, nota-se que a proposta de aumentar a potência de aquecimento pode reduzir de forma significativa o tempo para que o sistema alcance as temperaturas de processo, mesmo que ainda não tenha alcançado o regime transiente periódico. Na Figura 4.12 é apresentada a solução para a configuração I, onde as potências dos conjuntos de aquecedores (AC) foram alteradas da seguinte forma: AC_I 150 W, AC_II 200 W e AC_III 75 W.



Figura 4.12 – Evolução das temperaturas no tempo, ao longo do cilindro de extrusão para a configuração I, considerando a nova configuração de potências de aquecimento. Fonte: Elaborado pelo autor.

A maior potência é adotada no AC_II por estar localizado entre os outros conjuntos de aquecimento, isso resulta na transferência do calor em excesso para as regiões a montante e jusante, com menores perdas desse calor para as vizinhanças durante o processo de aquecimento até as temperaturas de processo. Quando o sistema atinge as temperaturas, basicamente só há a atuação do conjunto AC_I que opera de forma intermitente para manter a temperatura na zona de descarga e consequentemente emana calor por condução para que as demais zonas se mantenham na temperatura especificada. Dessa proposta, o tempo para que as temperaturas se elevem até as condições especificadas para o processo resultam em um tempo estimado de aproximadamente 15 min. para que o processo possa ser iniciado, representando assim uma redução de 66,67 % (tempo anterior de 45 min.) em relação a configuração de aquecimento original. Quanto ao tempo para que o sistema possa estabelecer plenamente o regime transiente periódico praticamente não se percebe alteração, resultando em tempo. um

aproximadamente, de 5 horas. Porém, com a nova configuração de aquecimento, nota-se um pequeno aumento da temperatura média na extensão da zona de alimentação, que de 63°C, agora assume a temperatura média de 66°C.

Na Figura 4.13 estão representadas as temperaturas desenvolvidas no barril, ao longo do tempo de aquecimento, para a nova configuração de potências propostas para o sistema.



Figura 4.13 – Evolução das temperaturas ao longo do tempo para a nova configuração de potências de aquecimento. Fonte: Elaborado pelo autor.

128

É notável na Figura 4.13 que aquecer o conjunto com maior intensidade através do conjunto AC_II representa uma melhor distribuição do calor no modelo uma vez que boa parcela do calor que antes era emanado para a vizinhança e ou propagado indesejavelmente para a zona de alimentação agora é distribuído por condução em direção a zona de descarga e em direção a zona de plastificação.

4.2 Análise do fluxo no barril

4.2.1 Pressões no bico

A queda de pressão no bico foi determinada para duas taxas de alimentação, 20 g/h e 40 g/h, considerando as temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C do PP RP141. Na Figura 4.14 estão apresentados os resultados dessa etapa, demonstrando o perfil das pressões, ao longo da extensão, tomadas no centro dos canais que formam o bico de extrusão para as condições propostas.

Dos perfis de pressão obtidos para as condições simuladas, e como esperado, as pressões são mais elevadas à medida que a vazão de polímero é maior, quando comparadas a mesma temperatura. Nas seis transições de seção que ocorrem nos canais que formam o bico extrusor, nas três primeiras seções nota-se um consumo inexpressivo de pressão evidenciado pela pequena inclinação das curvas de pressão (Fig. 4.14). Nos últimos três canais que formam o bico, o consumo de pressão é próximo a pressão total requerida para a dada condição de fluxo, sendo mais acentuada na última sessão formada por um canal cilíndrico de 0,6 mm de diâmetro e que representa a seção mais estreita do bico. Em termos de porcentagem, aproximadamente, 75% da pressão é consumida nesse estreito canal. Dessas informações, compreende-se que havendo necessidade de se alterar a pressão consumida no bico, por exemplo, para impressões com materiais de maior viscosidade, quando comparados ao PP RP141, uma alternativa é aumentar o diâmetro desse canal para manter o sistema operando dentro das pressões prevista em projeto.



Figura 4.14 - Perfis de pressão no bico para as taxas de alimentação correspondentes a 20 g/h e 40 g/h nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

De forma a sintetizar os resultados dessa etapa, na Tabela 21 são apresentadas as pressões consumidas no bico para cada um dos cenários simulados.

Tabela 21 – Resultado das pressões consumidas no bico para as vazões de 20 g/h e 40 g/h nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

Tomporatura	Pressão (MPa)		
Temperatura	40 g/h	20 g/h	
200°C	0,797	0,559	
210°C	0,676	0,473	
220°C	0,576	0,404	

Na Figura 4.15 estão representadas, num diagrama de cores, a distribuição das pressões em uma representação 3D, permitindo a observação da pouca influência que as pressões tem em relação a direção radial das seções que formam os canais do bico e sua forte dependência em relação a direção axial, como já era de se esperar.





As taxas de cisalhamento mais elevadas, nas simulações, estão localizadas na extremidade de saída do polímero do bico junto as paredes, na seção mais estreita. Como esperado, à medida que a temperatura é menor, maiores são as taxas de cisalhamento, isso devido ao aumento na viscosidade do polímero à medida que a temperatura é menor. Ainda, as taxas de cisalhamento, também como esperado, são mais elevadas a vazão 40 g/h quando comparadas as obtidas a 20 g/h a mesma temperatura, isso deve-se ao aumento da velocidade, e consequentemente dos gradientes junto as paredes, do escoamento a medida que a vazão aumenta. Já no centro do canal, devido ao perfil de velocidades tender a uma distribuição uniforme, as taxas são



pequenas. Na Figura 4.16 estão apresentadas a distribuição das taxas de cisalhamento para as vazões correspondentes aos cenários estudados.

Figura 4.16 - Distribuição das taxas de cisalhamento na última seção do bico para as vazões de 0,2 kg/h e 0,4 kg/h nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

As taxas de cisalhamento médias obtidas das simulações, tomados a partir de 100 pontos distantes de 0,05mm da parede ao longo da extensão do canal mais estreito do bico (região de taxas mais elevadas), para as condições avaliadas estão resumidas na Tabela 22.

Tabela 22 – Taxas de cisalhamento médias nas paredes do canal do bico para as vazões de 0,2kg/h e 0,4 kg/h, nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

Tomporatura	Taxa de Cisalhamento (1/s)		
remperatura	40 g/h	20 g/h	
200°C	742,6857	363,5604	
210°C	742,2649	363,4635	
220°C	741,9010	363,3873	

Os vetores de velocidade resultante estão representados na Figura 4.17, onde pode-se verificar a correspondência com os resultados das taxas de

cisalhamento. Onde, é notável que os gradientes de maior intensidade ocorrem junto as paredes e as velocidades no centro dos canais são maiores, porém, com distribuição tendendo ao perfil uniforme (perfil achatado "plug flow"). caracterizando gradientes de velocidade nulos. Também. como é de conhecimento, as velocidades não são afetadas pela temperatura correspondendo aos resultados obtidos nas simulações.



Figura 4.17 – Perfil de velocidades na última seção do bico para as vazões de 0,2 kg/h e 0,4 kg/h, nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

As viscosidades do PP RP141, nas simulações (Figura 4.1), variaram de forma moderada para as temperaturas avaliadas, reduzindo progressivamente o seu valor a medida que a temperatura é aumentada para a dada vazão. Quando comparado o efeito da vazão imposta, percebe-se um comportamento análogo ao das taxas de cisalhamento. Onde, quando comparadas a mesma temperatura, as viscosidades são menores para as maiores taxas, como podem ser observadas na Figura 4.18. É importante destacar que as escalas da Figura 4.18 estão limitando os valores máximos e mínimos obtidos em toda a extensão do bico (valor global), porém as gravuras representam apenas a seção final do bocal uma vez que é o local onde as taxas são mais elevadas no modelo.



Figura 4.18 – Viscosidades obtidas na última seção do bico para as vazões de 0,2 kg/h e 0,4 kg/h, nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como nas análises emprega-se um modelo não isotérmico, os efeitos do aquecimento viscoso são considerados para as condições de interesse e os resultados das simulações estão ilustradas na Figura 4.19. É notável que os efeitos de aquecimento viscoso se pronunciam nas regiões onde ocorrem as maiores taxas de cisalhamento, como já bem evidenciado na literatura, assim os resultados dessa etapa são demonstrados para a região da extremidade do bico onde já foi provado ocorrem as maiores taxas. As temperaturas para todos os cenários, no máximo, elevaram a temperatura do polímero em menos de 1°C.

Tal resultado, indica que não devem ocorrer pontos quentes, ao menos no bocal, devido a efeitos de aquecimento viscoso. Isso pode ser explicado pela curta extensão do bico (22,91 mm), o que implica, para as vazões avaliadas, um curto tempo de residência. Por fim, na Figura 4.19, é observada a tendência dos efeitos de aquecimento viscoso se estenderem em direção ao interior dos canais que formam o bico, sendo mais pronunciados para a maior vazão, a medida que a temperatura é reduzida. Isso, deve-se ao aumento da taxa de cisalhamento (maior deformação, mais atrito molecular) que ocorre a medida que a viscosidade do polímero aumenta com a redução da temperatura.



Figura 4.19 – Aumento de temperatura no bico induzido pelos efeitos de aquecimento viscoso para as vazões de 0,2 kg/h e 0,4 kg/h, nas temperaturas de 200°C, 210°C e 220°C. Fonte: Elaborado pelo autor.

4.2.2 Parâmetros adimensionais – A₁ e A₂

Os parâmetros adimensionais característicos dos tipos de elementos (A1, A2 e A3) que compõe a configuração de rosca dupla desse estudo, obtidos dos resultados das análises CFD (Seção 3.4.3), para as duas condições de contorno impostas estão sumarizados na Tabela 23 e ilustrados na Figura 4.20. Já, as vazões e pressões, nas dadas condições, obtidos das simulações e empregados

nos cálculos A1 e A2 estão apresentados na Tabela 24. Os valores de A3 são aproximados, conforme já discutido, pela Equação 15.

Elemento	Comprimento (mm)	A1	A2	A3
20/40	40	0,3644	1710,63	77,5547
15/40	40	0,2920	2311,61	104,8014
10/20	20	0,2008	3380,49	153,2611
KB -60/5/15	15	0,1118	364,68	16,5348

Tabela 23 – Parâmetros A1 e A2 obtidos dos resultados das simulações CFD para a composição de elementos que constituem a configuração da rosca dupla.

Tabela 24 – Vazões e pressões, resultantes das simulações, empregados na determinação dos parâmetros A1 e A2 dos distintos tipos de elementos que compões a rosca dupla. Resultados, esses, obtidos para um comprimento equivalente ao passo de cada tipo de elemento de rosca. Fonte: Elaborado pelo autor.

Elemento	Vazão (m^3/s)	Pressão (MPa)
20/40	1,05e-6	4,73
15/40	8,41e-7	4,79
10/20	5,78e-7	4,67
KB -60/5/15	3,22e-7	0,80



Figura 4.20 – Curvas de pressão características obtidas para os tipos de elementos que compõe a rosca dupla. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como esperado e já documentado na literatura [36] [37] [2], nos elementos de transporte, a medida que o passo do elemento é maior, sua capacidade de transporte é maior. Isso é evidenciado pelo aumento do valor de A1 como podese notar que ocorre ao se comparar o valor desse parâmetro entre os elementos 10/20, 15/40 e 20/40, que são os elementos de transporte de menor, intermediário e maior passo, respectivamente. Já para o elemento de mistura - 60/5/15 nota-se que o mesmo apresenta uma capacidade de transporte bastante limitada, característico da defasagem entre os discos que formam esse bloco de malaxagem que agem como barreiras ao transporte do material e intensificam os efeitos de mistura. Assim, esse elemento é o que apresenta a menor capacidade de (menor A1) dos distintos tipos de elementos que constituem as roscas.

No que se refere a capacidade de gerar/consumir pressão, explicitado pelo parâmetro A2, é notável que a medida que o passo do elemento de

transporte das roscas diminui a capacidade de gerar/consumir pressão aumenta, corroborando com o que a literatura prevê [36] [37] [2]. Já o elemento de malaxagem, apresenta a menor capacidade de gerar/consumir pressão quando comparado aos elementos de transporte.

Autores como Kohlgrüber (2008) [36] e Rauwendaal (2014) [2] já demonstraram a possibilidade de se aproximar esses valores por meio de análises CFD 3D em substituição a técnicas experimentais. Conhecer esses parâmetros, além de necessários a proposta deste trabalho, subsidiam a possibilidade de se avaliar distintas combinações desses elementos (módulos) de roscas para obter características específicas de fusão, mistura e transporte conforme a natureza do material extrudado.

4.2.3 Modelo HME-Modificado

4.2.3.1 Validação

Os resultados da validação do modelo HME-modificado, proposto neste estudo, comprovam que as alterações aplicadas ao modelo original não alteram os resultados obtidos quando comparados aos mesmos testes propostos por Eitzlmayr *et. al.* (2014) [35] para validação do modelo seu mecanicista HME original.

Para o Caso A, que representa um cenário não isotérmico onde o polímero Solopus, que comporta-se como fluido pseudoplástico, é descrito pelos modelos Carreau e WLF. Nesse cenário, o polímero é extrudado em uma extrusora rosca dupla ZSK 18, e é notável a excelente correspondência entre as curvas de pressão, conforme pode ser observado na Figura 4.21.

138



Figura 4.21 – Comparação dos resultados do perfil de pressões entre os modelos HME original e HME-Modificado para o Caso A. Fonte: Elaborado pelo autor.

Da mesma forma, no Caso B as presões para as distintas taxas de alimentação e rotações avaliadas, também, apresentaram excelente correspondência, conforme evidenciado na Figura 4.22. Nesse caso, o fluido é tratado como newtoniano e representa três condições de processo em uma extrusora Clextral BC 21.





Em suma, prova-se que a proposta de se desacoplar a parte térmica do modelo HME original e calcular as pressões impondo uma condição inicial de pleno enchimento (f=1) da rosca dupla ao longo de toda a sua extensão, corrigindo-as conforme a metodologia já discutida na Seção 3.4.4, não afeta os resultados no que se referem as pressões e a extensão e localização das regiões totalmente cheias. Destaca-se que durante testes realizados, percebe-se que o modelo HME-modificado não depende mais da inserção dos chamados elementos de transição toda vez que há transição entre elementos de rosca de transporte a frente (positivo) e atrás (negativo) ou vice-versa, reduzindo assim a

complexidade na solução numérica do modelo. Ainda, pode-se destacar que a solução agora é direta, onde obtém-se o perfil de pressões na condição de regime permanente estabelecido, sendo a solução numérica independente do tempo. Isso é explicado pela imposição da condição de pleno preenchimento das roscas, resultando na solução apenas de um sistema algébrico de equações, onde as variáveis desconhecidas são somente as pressões em cada um dos elementos que compõe a malha 1D. Ainda, conforme relatado por Eitzlmayr et. al. (2014), a solução do modelo HME original ficou limitada a certo nível de refinamento da malha, justificada pelo autor pela baixa eficiência computacional do MATLAB devido a linguagem do programa não ser compilada durante a solução. No modelo HME-modificado proposto não se percebeu nenhuma limitação no nível de refinamento passível de ser solucionado através da linguagem do MATLAB, ao menos nas condições dos estudos avaliados a partir do modelo. Por fim, o modelo HME-modificado desenvolvido estende a capacidade da análise, através da incorporação do modelo da Lei de Arrhenius ao modelo de Carreau-Yasuda, antes limitado apenas aos modelos Carreau-WLF.

4.2.3.2 Previsão dos locais plenamente cheios das roscas

A previsão da extensão e localização das zonas plenamente preenchidas através do modelo HME-modificado, nas condições de processo avaliadas nesse estudo, para a melhor representação da realidade adota o perfil de temperaturas, obtido nas análises térmicas do barril, para representar a temperatura do PP RP141 ao longo da extensão das roscas. As temperaturas tomadas das análises CFD representam um instante no qual o regime transiente periódico está estabelecido (Figura 4.6), que nesse caso corresponde a 5 horas após o início do aquecimento. Como a origem do sistema de coordenadas adotado nas simulações térmicas do barril (origem localizada ao centro e na extremidade superior do barril) não coincide com o sistema de coordenadas empregado no modelo HME-modificado (origem localizada ao centro e na extremidade do elemento de transporte 20/40), um ajuste de coordenadas no perfil de temperaturas é aplicado. No Apêndice B estão apresentadas as temperaturas

com as coordenadas de posição já ajustadas para coincidirem com as coordenadas adotadas no modelo HME-modificado.

Uma vez que a temperatura na zona de descarga, resultante das análises térmicas do barril, demonstraram que a temperatura nessa região tende a se manter em aproximadamente 220°C (Figura 4.6), para representar a pressão recorre-se aos resultados obtidos da simulação do perfil de pressão no bico (Seção 4.2.1) a essa temperatura. Assim, as pressões consumidas no bico, na temperatura 220°C, e adotadas na simulação a partir do modelo HME-modificado, são de 0,5768 MPa e 0,4040 MPa para as vazões de 40 g/h e 20 g/h, respectivamente.

Conforme já apresentado na Seção 3.4.4, um conjunto de dados relacionados ao polímero e ao modelo reológico, a geometria do barril e das roscas, as pressões consumidas no bico, as condições do processo (velocidade das roscas, temperaturas, taxa de alimentação, etc.) e informações para a geração da malha 1D (número de elementos da malha, tipos físicos dos elementos de rosca, etc.) são necessários para a solução do modelo.

As entradas de dados no modelo HME-modificado, a partir da interface gráfica implementada no MATLAB, possibilita a interação direta com o modelo, permitindo o rápido ajuste do mesmo para diferentes condições de processo e polímeros. Na Figura 4.23 está representada a interface gráfica do modelo HMEmodificado implementado no programa MATLAB, cuja estrutura é construída na forma de abas onde os dados de entrada são informados e ainda permite acompanhar, em detalhes, o comportamento das grandezas de interesse ao longo da sequência de etapas para solução numérica do modelo.



Figura 4.23 – Interface gráfica desenvolvida para o modelo HME-modificado demonstrando a sequência de abas para a inserção dos dados de entrada e monitoramento dos resultados das simulações, programado através do módulo *appDesigner* disponível no programa MATLAB. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para essa etapa, quatro condições de operação da rosca dupla foram simuladas com o modelo HME-modificado (Seção 3.4.5). Os cenários representam duas taxas de alimentação distintas de PP RP141, de 40 g/h e 20 g/h, que são avaliadas para as velocidades das roscas de 80 rpm e 100 rpm. Na Figura 4.24 é possível observar os dados de entrada na interface do programa HME-modificado que representa a condição de operação em que a vazão de alimentação é de 40 g/h (1,111e-5 kg/s) e a rotação das roscas é de 100 rpm. Para as outras 3 condições de operação, apenas são alteradas a vazão de alimentação, a velocidade das roscas e a pressão consumida no bico, já os demais parâmetros de entrada do modelo não são alterados.

Como resultados dessas simulações, as pressões ao longo das roscas e consequentemente a extensão das zonas plenamente cheias são previstas. E como já discutido, nesses estudos, o perfil de temperaturas do polímero foi aproximado pelas temperaturas obtidas na parede que formam os canais de escoamento no barril, obtidas das simulações térmicas do barril. Na Figura 4.25 são apresentados os resultados do modelo HME-modificado para os 4 cenários avaliados e o perfil de temperaturas obtidos das simulações térmicas do barril.



Figura 4.24 – Sequência de etapas para a solução do modelo HME-modificado através da interface gráfica implementada, demonstrando os dados de entrada e resultados obtidos para a taxa de alimentação de 40 g/h (1,11e-5 kg/s) e rotação de 100 rpm. Fonte: Elaborado pelo autor.

60 Posição (mm)



Figura 4.25 – Perfil de pressões e temperaturas paras as taxas de alimentação de 40 g/h e 20 g/h, nas velocidades de 80 rpm e 100 rpm, obtidas das simulações através do modelo HME-modificado. Fonte: Elaborado pelo autor.

Três extensões, para ambos os cenários, foram previstas estarem completamente cheias. É notável que essas zonas representam os elementos consumidores de pressão (blocos de malaxagem e bico) e que para serem transpassados pelo fluxo do material dependem de certa extensão de preenchimento dos elementos de rosca a montante (elementos de transporte

positivo) para que assim as pressões requeridas para transposição destes obstáculos sejam geradas. Como a pressão consumida no bico depende somente da taxa de alimentação e temperatura do polímero, da mesma forma como relatado na literatura, a extensão do elemento de transporte a montante do bico completamente preenchido é menor a medida que a velocidade das roscas é aumentada. Já nos blocos de malaxagem, a medida que se aumenta a rotação maior é o consumo de pressão e assim os elementos de transporte a montante desses blocos aumentam a sua extensão de preenchimento para poderem suprir a demanda adicional de pressão consumida devido a maior velocidade das roscas. Contudo, pode-se concluir que os resultados dessas simulações, ao menos qualitativamente, condizem com o comportamento esperado conforme a literatura.

Da mesma forma, como já era de se esperar, a medida que a taxa de alimentação é maior, maiores são as pressões desenvolvidas no sistema. Da mesma forma, para as mesmas taxas de alimentação, a medida que a velocidade das roscas aumenta a pressão aumenta. Dos cenários avaliados, a pressão máxima ocorreu no elemento de malaxagem -60/5/15, com valor e 0,6617 MPa para a rotação de 100 rpm e 0,6493 MPa para a rotação de 80 rpm.

Os resultados dos experimentos de extração das roscas (*pull-out*) realizados por NETTO (2022) [10] (Figura 4.26), para a mesma configuração de rosca e polímero (PP RP141) estudados aqui, demonstram que as partículas sólidas do polímero sobreviveram apenas até o início da zona de amassamento a montante (aproximadamente a ³/₄ da extensão do elemento 20/40), da mesma forma como previsto no modelo HME-modificado proposto. Contudo, é comprovada a boa assertividade nas hipóteses, simplificações e técnicas adotadas na metodologia empregada para a previsão das extensões das zonas completamente cheias da rosca dupla miniaturizada.



Figura 4.26 – Teste de extração da rosca dupla miniaturizada obtidas por Justino Netto (2022) para o PP RP141. Adaptado de [10].
4.2.4 Fluxo nos canais plenamente preenchidos (f = 1)

Os resultados desta etapa demonstram o estudo do escoamento nos trechos completamente cheios, previstos com o modelo HME-modificado, para uma taxa de alimentação de 20 g/h e velocidade das roscas de 80 rpm. Três segmentos cheios das roscas foram previstos nessas condições (ver Figura 4.25) e estão representados na Figura 4.27, cujas extensões são: trecho A de 13 mm, trecho B de 26 mm e trecho C de 28 mm. A pressão no bico, prevista em etapas anteriores por meio de simulação 3D, para essa condição é de 0,404026 MPa (ver Figura 4.15) quando se considera que o bico despeja o material (PP RP141) a temperatura de 220°C.



Figura 4.27 – Trechos de preenchimento pleno previstos através do modelo HME-modificado para a taxa de alimentação de 20 g/h e velocidade de 80 rpm das roscas. Fonte: Elaborado pelo autor.

O trecho "A", que precede os canais que formam o bico de deposição do material, é composto somente pelo elemento de transporte 10/20. Esse elemento é responsável por gerar a pressão que será consumida para vencer os obstáculos dos canais que formam o bico. Assim, a pressão gerada pela

extensão cheia do trecho "A" deve ser suficiente e indicará se a previsão do modelo HME-modificado foi assertiva.

Na Figura 4.28 está ilustrado as pressões desenvolvidas no modelo nas faces que representam as roscas extrusoras obtidas das simulações para o trecho "A". A diferença entre as pressões médias nas seções correspondentes a entrada e a saída do escoamento resultaram em 0,404455 MPa. Esse valor corresponde muito bem a pressão consumida no bico (P = 0,404026 MPa) e demonstra a boa previsão da extensão de preenchimento a partir do modelo HME-modificado. Na Figura 4.28 é notável que há picos de pressão (picos de pressão local na ordem de 0,439 MPa), em pontos específicos, localizados no final da extensão do elemento 10/20 que superam o valor da pressão consumida no bico, porém os valores médios das pressões são compatíveis e correspondem bem as previsões.



Figura 4.28 – Pressões relativas desenvolvidas sobre as superfícies das roscas no trecho "A", para a taxa de alimentação de 20 g/h e velocidade das roscas de 80 rpm. Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 4.29 representa os perfis de velocidades radial na seção transversal do domínio de escoamento em diferentes distâncias axiais do elemento de transporte 10/20 (trecho "A") para velocidade de rosca de 80 rpm. Como pode ser visto, o fluido sofre um movimento circular tanto nas regiões de

entrelaçamento quanto nas pontas dos parafusos (filetes). As trocas de fluxo entre dois parafusos levam a reduzir o movimento do fluxo na direção axial e aumentam o tempo de residência e, consequentemente, a eficiência de mistura na região de transporte.



Figura 4.29 – Perfil de velocidades radial nas seções transversais a diferentes posições axiais, obtidas para o trecho "A" a uma taxa de alimentação de 20 g/h e velocidades das roscas de 80 rpm. Fonte: Elaborado pelo autor.

Já, na Figura 4.30 são representadas a distribuição das velocidades axiais em diferentes seções transversais para velocidade da rosca de 80 rpm e as mesmas mostram o fenômeno do movimento axial do fluido dentro dos elementos de transporte. Essa figura confirma que o movimento positivo



(bombeamento positivo) é o mecanismo de transporte na Co-TSE. Os valores positivos para a velocidade nessa figura expressam fluxos reversos na Co-TSE.

Figura 4.30 - Perfil de velocidades axial nas seções transversais a diferentes posições axiais, obtidas para o trecho "A" a uma taxa de alimentação de 20 g/h e velocidades das roscas de 80 rpm. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para avaliar o efeito da taxa de cisalhamento na Co-TSE, a distribuição da taxa de cisalhamento é representada para o trecho "A". A Figura 4.31 mostra os perfis de taxa de cisalhamento e sua variação a diferentes posições axiais para velocidade de roscas de 80 rpm. Vale ressaltar que os valores máximos para taxa de cisalhamento são criados tanto na região de entrelaçamento quanto entre as regiões das roscas e do barril. Como a maior taxa de cisalhamento ocorre nessas áreas, fica claro que a maior dissipação viscosa e a temperatura

também devem ocorrer nessas áreas. O valor máximo (pico) encontrado para essa configuração é de 649,25 1/s.



Figura 4.31 - Taxas de cisalhamento nas seções transversais a diferentes posições axiais, obtidas para o trecho "A" a uma taxa de alimentação de 20 g/h e velocidades das roscas de 80 rpm. Fonte: Elaborado pelo autor.

Os trechos "B" e "C" apresentam características semelhantes, onde um conjunto de discos de amassamento de fluxo reverso (-60/5/15) são precedidos de elementos de transporte positivo 15/40 e 20/40, respectivamente, responsáveis por gerar a pressão necessária para vencer os obstáculos a jusante e enviar o material em direção ao bico. É notável, nesses casos, que o pico de pressão ocorre justamente na transição entre os elementos de transporte e malaxagem conforme previstos pelo modelo HME-modificado. A diferença de pressões médias, entre a seção transversal que representa a entrada do escoamento e a seção que se encontra no ponto de transição entre esses elementos, é de 0,3251 MPa e 0,5324 MPa para os trechos "B" e "C", respectivamente. Quando comparadas aos valores obtidos do modelo HME-

modificado representam um desvio 4,467 % (0,3403 MPa) e 0,486 % (0,5350 MPa) para os trechos "B" e "C", respectivamente. Os picos de pressão, em valores locais, obtidos das simulações são 0,449 MPa e 0,577 MPa para os trechos "B" e "C", respectivamente. A Figura 4.32 comprova os valores obtidos para as pressões locais e demonstra, conforme previsto, que aumentam axialmente da entrada até o início do elemento de amassamento de fluxo reverso (-60/15/5) e, a partir dessa posição, são consumidas completamente para vencerem os obstáculos retornando a pressão atmosférica (P = 0) ao final do trecho.



Figura 4.32 – Distribuição de pressões nos trechos "B" e "C" para a rotação de 80 rpm das roscas e taxa de alimentação de 20 g/h. Fonte: Elaborado pelo autor.

É possível evidenciar a assertividade das previsões obtidas do modelo HME-modificado ao comparar as pressões médias obtidas das análises dos segmentos cheios via CFD 3D com os obtidos no modelo HME-modificado, pois se as extensões previstas, como são as mesmas adotadas na simulação 3D, as pressões não corresponderiam entre os modelos. Os blocos de malaxagem, presentes nos trechos "B" e "C" desempenham o papel de intensificar a capacidade de fusão, mistura distributiva e dispersiva, as custas de um escoamento onde as deformações impostas ao fluido são intensificadas. Conforme representado na Figura 4.33, os blocos amassadores apresentam dois canais de fluxo. A massa fundida pode fluir ao longo da direção principal de transporte, entre a ponta dos discos, ou através da ponta dos discos.



Figura 4.33 - Vetores de velocidades resultante, tomados a uma distância radial de 5,3 mm dos centros das roscas, nos trechos "B" e "C" para a taxa de alimentação de 20 g/h e rotação de 80 rpm. Fonte: Elaborado pelo autor.

O efeito do aquecimento viscoso na temperatura do PP RP141, para os trechos "A", "B" e "C", estão representados na Figura 4.34. O trecho "A" apresentou a menor elevação da temperatura, entrando o escoamento a 220°C e elevando-se, no máximo, a 222,58 °C. Já, nos trechos "B" e "C" as temperaturas se elevaram de 207 °C para 216,251 °C e de 180 °C a 197,176°C, respectivamente. Assim, de forma resumida, o aquecimento viscoso representou aumentos de 2,58 °C, 9,251 °C e 17,176°C na temperatura para os trechos "A", "B" e "C", respectivamente.



Figura 4.34 – Aumento da temperatura do PP devido aos efeitos de aquecimento viscoso, nos trechos "A", "B" e "C", demonstram a evolução das temperaturas ao longo das superfícies das roscas a medida que o escoamento avança na direção principal. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para a determinação das taxas de cisalhamento médias, em cada trecho analisado, coletam-se os valores em 6 linhas dispostas axialmente nos quadrantes dos lóbulos do barril, a uma distância radial equivalente a metade da folga entre as roscas e o barril (raio de 5,95 mm). Essas linhas de monitoramento estão ilustradas, para trecho "A", na Figura 4.35. São coletados 300 pontos equidistantes em cada um dos seis quadrantes monitorados.



Figura 4.35 – Linhas vermelhas representam as posições no modelo onde são coletados os valores das taxas de cisalhamento, ao longo da extensão das rocas, localizadas na distância média das folgas entre barril e roscas. Fonte: Elaborado pelo autor.

Da mesma forma, para se determinar o tempo de residência médio nos trechos avaliados, coletam-se os tempos de residência nas linhas, localizadas nos 6 quadrantes, e calcula-se o valor médio. Os tempos médios de residência e as taxas de cisalhamento médias para os trechos analisados estão representados na Tabela 25.

Tabela 25 – Taxas de cisalhamento e tempos de residência médios obtidos das simulações dos trechos "A", "B" e "C" para a rotação de 80 rpm e taxa de alimentação de 20 g/h. Fonte: Elaborado pelo autor.

Trecho	Taxa de Cisalhamento Média (1/s)	Tempo Médio de Residência (s)
А	139,75	14,78
В	154,57	388,50
С	168,09	535,14

As análises térmicas do barril e as hipóteses estabelecidas para os estudos, em regime transiente periódico, permitiram prever a distribuição de temperaturas no barril, comprovando boa correspondência com os valores de temperatura instrumentados. Um desvio máximo de 4,35 % foi encontrado entre os dados da simulação e os experimentados. Essas análises, ainda demonstraram um nível de homogeneidade das temperaturas no entorno do cilindro extrusor compatível com os requeridos em projeto, divergindo no máximo em 2 °C. Uma percepção dos tempos de aquecimento do sistema e de equilíbrio térmico foram estimados, demonstrando que o sistema demora em torno de 45 min. para alcançar as temperaturas de processo e para o equilíbrio térmico transiente periódico, cerca de 5 horas. As temperaturas médias na zona de alimentação, que não devem superar os 60 °C, se mostraram um pouco superiores, na ordem de 64 °C. Uma discussão detalhada do comportamento térmico e da influência dos distintos aquecedores foi abordada e revelou potenciais melhorias. Uma configuração nova de potências de aquecimento e disposição no barril, demonstraram a possibilidade de se reduzir os tempos de início de processo (alcançar as temperaturas do processo, mesmo que o equilíbrio térmico não esteja estabelecido) de 45 para cerca de 8 min., estimando uma redução de aproximadamente 67% do tempo de início de operação do sistema.

As análises do escoamento 3D não isotérmico nos canais que formam o bico (matriz) revelaram resultados com comportamento compatível, em aspectos qualitativos, com o que a literatura prevê. Para a mesma temperatura e velocidade das roscas, à medida que a vazão aumenta a pressão consumida aumenta. Da mesma forma, quando as temperaturas se elevam, a pressão consumida no bico se reduz quando comparadas a mesma vazão e rotação. Dos resultados dessa etapa, conclui-se que as pressões consumidas operaram entre os valores de 0,4 MPa e 0,8 MPa quando se consideram as temperaturas de descarga entre 200°C e 220 °C e vazões entre 40 g/h e 20 g/h. As taxas de cisalhamento máximas foram encontradas no canal mais estreito do bico, que corresponde a um cilindro de diâmetro de 0,6 mm e 1,2 mm de comprimento (L/D

=2). Os valores máximos e mínimos das taxas, para as condições avaliadas se restringiram entre 363,38 1/s e 742,68 1/s. O efeito de aquecimento viscoso, como esperado, se manifestou com maior intensidade junto a parede desse estreito canal (taxas de deformação mais elevadas), prevendo-se um acréscimo não superior a 1 °C na temperatura do PP RP141.

Os parâmetros adimensionais dos tipos físicos dos elementos que compõe as roscas extrusoras foram determinados via simulação CFD 3D pela técnica MST. Em aspectos qualitativos, os resultados se mostraram coerentes com os observados na literatura. Elementos de transporte de maior passo apresentaram maiores valores de A1 e os de menor passo apresentaram maiores valores de A2 devido a sua maior capacidade de pressurização. Já os elementos de malaxagem se demonstraram os com menor capacidade de transporte e pressurização, como era de se esperar.

A proposta do modelo 1D HME-modificado e sua implementação na forma de código e interface gráfica se mostrou eficaz, uma vez que foi testado com situações já documentadas por Eitzmayr et. al. (2014) [35] e obteve-se excelente correspondência entre a previsão dos perfis de pressão e extensão dos canais preenchidos. As alterações propostas no modelo HME-modificado, em relação ao modelo original, demonstraram uma solução numericamente mais fácil, pois resultam na solução apenas de sistemas de equações algébricas e independentes do tempo. Quando aplicado para a previsão das pressões e as extensões e localização das regiões completamente cheias das roscas, nas condições de operação de interesse desse estudo, é notável que foram identificadas 3 regiões totalmente cheias para as distintas rotações e taxas de alimentação avaliadas. Evidências da assertividade das previsões do modelo HME-modificado foram obtidas da comparação com os resultados das simulações 3D desses trechos. Foram encontrados um desvio máximo de 4,47% para o trecho "B" e nos demais trechos ("A" e "C") um desvio inferior a 1% quando comparadas as pressões entre os modelos. Além disso, os resultados obtidos demonstraram que houve boa correspondência com os dados experimentais de extração das roscas (pull out).

A simulação do fluxo 3D, dos trechos preenchidos, revelou os tempos de residência médios, os picos de pressão local, bem como permitiram a estimativa do aquecimento viscoso, com detalhes que não são capturados por modelos de

dimensões inferiores. Nesses estudos, foi previsto que localmente as pressões não devem superar 0,577 MPa, o que garante que para o PP RP141 na condição de operação analisada, estão, de forma segura, abaixo do limite do sistema. As taxas de cisalhamento médias, para os trechos, conforme previstas, não devem ser superiores a 170 1/s. Porém os valores locais podem ser muitas vezes superiores, como os que ocorrem nas folgas e nas regiões de interpenetração das roscas. Os tempos médios de residência demonstraram que o trecho "C", onde as temperaturas são menores, o polímero tenderá a residir por um período de, aproximadamente, 536 s. No trecho "B" o tempo de residência médio é um pouco menor, aproximadamente, 389 s e para o trecho "A" o tempo é de aproximadamente 15 s. Apesar do considerável tempo de residência previstos paras os trechos "B" e "C", os efeitos do aquecimento viscoso na temperatura do PP, apesar de pronunciados nestes trechos, ficaram abaixo da temperatura de degradação térmica do material. As temperaturas se elevam, no máximo, em 18 °C no trecho "C", 10 °C no trecho "B" e 3 °C no trecho "A".

5 CONCLUSÕES

Nesse trabalho combinaram-se técnicas numéricas, via CFD 3D e algoritmo 1D, para a previsão do comportamento térmico do barril e termomecânico do escoamento do PP RP141, em um inovador sistema de extrusão Co-TSE miniaturizado destinado a MA, proposto por Justino Netto (2022). Valores experimentais e teóricos foram empregados para validar a metodologia abordada no estudo, demonstrando a sua boa correspondência.

Conclui-se que as técnicas abordadas de simulação e as hipóteses estabelecidas nesse estudo permitiram a investigação ampla do comportamento térmico do barril e do comportamento do escoamento, demonstrando boa aproximação. Estabeleceu-se, assim, um roteiro de procedimentos que pode ser adotado para exploração dos limites de processamento da unidade, composição de roscas, variáveis e materiais de processo, bem como auxiliar na tomada de decisões nas etapas projetiva de outras unidades e melhorias.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Com base no que foi desenvolvido e apresentado neste trabalho, algumas sugestões para trabalhos futuros podem ser elencadas:

 Explorar através dos modelos propostos os limites de processamento da unidade de extrusão em termos de taxa de alimentação e velocidade das roscas, observando os limites de projeto.

 Verificar a eficiência das melhorias propostas para o sistema de aquecimento do barril por de meio de experimentação.

• Explorar a previsão do comportamento do sistema miniaturizado para outros materiais com diferentes níveis de viscosidade;

• Explorar as possibilidades de combinações dos elementos de roscas, estabelecendo as mais adequadas, para diferentes materiais de impressão.

 Estudar com mais detalhes o modelo HME-modificado com vistas em reincorporar a parte térmica, mantendo as soluções das equações de conservação de massa pela técnica desempenhada nesse trabalha, com vistas na redução do custo computacional.

 Ampliar a gama de experimentos para comprovar mais detalhadas a assertividade dos métodos aplicados nesse estudo, uma vez da complexidade e amplitude dos fenômenos aqui representados.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- MANRICH, S. Processamento de Termoplásticos. 2^a. ed. [S.I.]: Artiliber, 2005.
- 2. RAUWENDAAL, C. Polymer Extrusion. 5^a. ed. [S.I.]: Hanser, 2014.
- TEIXEIRA, C.; GASPAR-DUTRA, A.; COVAS, J. Flow and heat transfer along the length of co-rotating twin extruder. Polymer Plastic Technology and Engineering, 51, 2012. 1567-1577.
- RAUWENDAAL, C. Polymer Extrusion. 5^a. ed. Munich: Hanser Publications, 2014.
- ROBERSON, D. et al. Expanding the applicability of FDM-type technologies through materials development. Rapid Prototyping Journal, 22 fev. 2014. 137-143.
- TORRADO, A. R. Characterizing the effect of additives to ABS on the mechanical property anisotropy of specimens fabricated by material extrusion 3D printing. Additive Manufacturing, V. 6, 2015. 16-29.
- BELLINI, A. Fused deposition of ceramics: a comprehensive experimental, analytical and Computational study of material behavior, fabrication process and equipment design, PhD thesis. Drexel University, USA, 2002.
- CHENG, X. et al. The design of screw extrusion mechanism based on melted extrusion modelling. Applied Mechanics and Materials, V. 44, 2011. 1455-1459.
- 9. LIU, F. et al. Structural Evolution of PCL during Melt Extrusion 3D Printing. Macromol Mater Eng 303(2):1700494, 2018.
- 10. JUSTINO NETTO, J. M. Development of an innovative additive manufacturing system containing a co-rotating twin screw extrusion unit. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. Departamento de Engenharia Mecânica, EESC-USP. Bolsista: CNPq, 2022.
- SINGHA, S.; RAMAKRISHNA, S.; SINGHC, R. Material issues in additive manufacturing: A review. Journal of Manufacturing Processes, 2016. 185-198.

- 12. JUSTINO NETTO, J. M. Projeto de uma miniextrusora dupla rosca corrotativa vertical para aplicação em Manufatura Aditiva, Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Escola de Engenharia de São Carlos (EESC/USP), Universidade de São Paulo, São Carlos., 2017. 122.
- BETHANY C. GROSS, J. L. E. et al. Evaluation of 3D Printing and Its Potential Impact on Biotechnology and the Chemical Sciences. ACS Publications, p. 3240-3253, 2014.
- BRIAN, N. T.; ROBERT, S.; SCOTT, A. G. A review of melt extrusion additive manufacturing processes: I. Process design and modeling. Rapid Prototyping Journal, v. 20, n. 3, p. 192-204, 2014.
- KAMRAN, M.; SAXENA, A. A Comprehensive Study on 3D Printing Technology. MIT International Journal of Mechanical Engineering, Vol. 6, No. 2, p. 63-69, 2016.
- KHOOA, Z. X. et al. 3D printing of smart materials: A review on recent progresses in 4D printing. VIRTUAL AND PHYSICAL PROTOTYPING, v. 10, n. 3, p. 103-122, 2015.
- SINGH, S.; RAMAKRISHNA, S.; SINGH, R. Material issues in additive manufacturing: A review. Journal of Manufacturing Processes, p. 185-195, 2016. ISSN http://dx.doi.org/10.1016/j.jmapro.2016.11.006.
- 18. DYLAN, D. et al. CONTROL-ORIENTED ENERGY-BASED MODELING OF A SCREW EXTRUDER USED FOR 3D PRINTING. Proceedings of the ASME 2016 Dynamic Systems and Control Conference, 2016.
- MALIK, M.; KALYON, D. M.; GOLBA, J. C. Simulation of Co-Rotating Twin Screw Extrusion Process Subject to Pressure-Dependent Wall Slip at Barrel and Screw Surfaces: 3D FEM Analysis for Combinations of Forward and Revers e Conveying Screw Elements. International Polymer Processing XXIX, 2014. 51-62.
- TADMOR, Z.; GOGOS, C. G. Principles of Polymer Processing. 2^a. ed.
 [S.I.]: Wiley, 2006.
- BRETAS, R. E. S.; D'ÁVILA, M. A. Reologia de Polímeros Fundidos. 2^a.
 ed. São Carlos: EdUFSCar, 2005.

- OSSWALD, T.; MENGES, G. Material Science of Polymers for Engineers. 3^a. ed. [S.I.]: Hanser Publications , 2012.
- MITSOULIS, E. Modeling and Simulation in Polymers. 1^a. ed. [S.I.]: Wiley-VCH , 2010.
- WHITE, J. L.; CHEN, Z. Simulation of Non-Isothermal Flow in Modular Co-Rotating Twin Screw Extrusion. **POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE**, 1994. 229-237.
- RIOS, A. C. J.; GRAMANN, P. A.; OSSWALD, T. Comparative Study of Mixing in Corotating Twin Screw Extruders. Advances in Polymer Technology, v. 17, n. 2, p. 107–113, 1998.
- AVALOSSE, T.; RUBIN, Y. Analysis of Mixing in Corotating Twin Screw Extruders through Numerical Simulation. International Polymer Processing XV, 2000. 117-123.
- LAWAL, A.; RAILKAR, S.; KALYON, D. M. A New Approach to Simulation of Die Flow which Incorporates the Extruder and the Rotating Screw Tips in the Analysis. Intenational Polymer Processing, n. 12, p. 123–135, 1997. ISSN https://doi.org/10.3139/217.970123.
- 28. ZHU, W.; JALURIA, Y. Residence Time and Conversion in the Extrusion. **POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE**, v. 41, n. 7, p. POLYMER
 ENGINEERING AND SCIENCE, JULY 2001, Vol. 41, No. 7, Julho 2001.
- KALYON, D. M.; MALIK, M. An Integrated Approach for Numerical Analysis of Coupled Flow and Heat Transfer in Co-rotating Twin Screw Extruders. International Polymer Processing, v. XXII, n. 3, p. 1280-1291, 2007.
- ILINCA, F.; HÉTU, J. F. Three-dimensional Numerical Study of the Mixing Behaviour of Twin-screw Elements. International Polymer Processing XXVII (2012), v. XXVII, n. 111-120, 2012.
- ALTINKAYNAK, A. et al. Melting in a Single Screw Extruder: Experiments and 3D Finite Element Simulations. International Polymer Processing, Munich, v. XXVI , n. 2, p. 182-196, 2011. ISSN https://doi.org/10.3139/217.2419.

- WILCZYNSKI, K.; LEWANDOWSKI, A. Study on the Polymer Melt Flow in a Closely Intermeshing Counter-Rotating Twin Screw Extruder. International Polymer Processing, v. XXIX, n. 5, p. 649-659, 2014.
- CARSON, S. O.; COVAS, J. A. A New Extensional Mixing Element for Improved Dispersive Mixing in Twin-Screw Extrusion, Part 1: Design and Computational Validation. Advances in Polymer Technology, v. 00, n. 0, p. 1-11, 2015. ISSN DOI 10.1002/adv.21627.
- KENNEDY, A. O. et al. A Novel Modeling Approach to the Mixing Process in TwinScrew Extruders. AIP Conference Proceedings, v. 1593, n. 29, p. 29-38, 2014. ISSN 10.1063/1.4873728.
- EITZLMAYR, A. et al. Mechanistic modeling of modular co-rotating twinscrew extruders. International Journal of Pharmaceutics, 4 August 2014. 157-176.
- KOHLGRÜBER, K. Co-rotating twin-screw extruder. Germany: Verlag, Carl Hanser, 2008.
- 37. EITZLMAYR, et al. Experimental Characterization and Modeling of Twin-Screw. **AIChE Journal**, 59, june 27 2013. 4440-4450.
- ANSYS Polyflow. ANSYS, Inc. Disponivel em: https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-polyflow>. Acesso em: 22 agosto 2018.
- 39. ANSYS POLYFLOW. **PADTINC**. Disponivel em: http://www.padtinc.com/products/software/ansys/computational-fluid-dynamics-CFD/ansys-polyflow.html>. Acesso em: 13 setembro 2018.
- 40. SALAHUDEEN, S. A. et al. Comparative study of internal batch mixer such as cam, banbury and roller: Numerical simulation and experimental verification. **Chemical Engineering Science**, 2011. 2502-2511.
- BARRERA, M. A.; VEGA, J. F.; MARTINEZ-SALAZAR, J. Threedimensional modelling of flow curves in co-rotating twin-screw extruder elements. Journal of Materials Processing Technology, 2008. 221–224.
- 42. RATHOD, M. L. et al. Non-Newtonian Fluid Mixing in a Twin-Screw Mixer Geometry: Three-Dimensional Mesh Development, Effect of Fluid Model and Operating Conditions. Journal of Food Process Engineering, 2014. 1-18.

- ANSYS, INC. ANSYS Help Viewer. Manual Eletrônico, 11 Abril 2017. Versão 18.1.0.
- MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluídos Computacional. 1^a. ed. [S.I.]: LTC - Livros Técnicos e Cinetíficos Editora S. A., 1995.
- 45. SUNWOOA, K. B. P. S. J. et al. Numerical simulation of three-dimensional viscoelastic flow using the open boundary condition method in coextrusion process. Journal Non-Newtonian Fluid Mech, 2001. 125-144.
- 46. GILES, H. F. J.; WAGNES, J. R. J.; MOUNT-III, E. M. Extrusion: the definitive processing guide and handbook. USA: Andrew, 2004.
- 47. VLACHOPOULOS, J.; STRUTT, D. Overview Polymer Processing.
 Materials Science and Technology, v. 19, p. 1161-1169, 2003. ISSN DOI 10.1179/026708303225004738.
- 48. JUSTINO NETTO, J. M. Design of an Innovative 3D Print Head Based Twin-Screw Extrusion. Journal of Mechanical Design, 2018. 24.
- 49. INFORÇATTI NETO, P. Estudo da viabilidade técnica e projeto de um mini-cabeçote de extrusão com rosca para impressoras tridimensionais portáteis. São Carlos - SP. 2013.
- 50. PAWLOWSKI, J. **Transportvorgänge in Einwellen-Schnecken:** Förder-, Homogenisier- und Wärmeaustausch-Verhalten. [S.I.]: Salle, 1990.
- GIBSON, I. . R. W. D.; STUCKER, B. Additive Manufacturing Technologies: Rapid Prototyping to Direct Digital Manufacturing. Springer, 2010.
- 52. VOLPATO, N. Manufatura aditiva: tecnologias e aplicações em impressões3-D. 400 p. ed. São Paulo: Blucher, 2017.
- 53. ZHANG, X.,; LIOU, F. Introduction to additive manufacturing. **Handbooks in Advanced Manufacturing: additive manufacturing.**, [S.L], 2021. p. 1-32.
- ASTM F 2792-10. Standard terminology for additive manufacturing technologies, copyright ASTM international. Copyright ASTM International, Barr Harbor Drive, West Conshohocken, PA, p. 19428, 2010.

- CONNER, B. P. E. A. Making sense of 3-D printing: creating a map of additive manufacturing products and services. Additive Manufacturing, v. 1-4, out. 2014. p. 64-76.
- MARTINS, S. R. M.; COSTA, B. L. S.; LEPIKSON, H. A. Um sistema CAM para máquinas de prototipagem rápida de baixo custo. Anais do CONEM 2010, Campina Grande, ABCM, 2010. Disponivel em: https://www.abcm.org.br/anais/conem/2010/PDF/CON10-0886.pdf. Acesso em: 9 setembro 2021.
- RAFIEE, M.; FARAHANI, R. D.; THERRIAULT, D. Multi-Material 3D and 4D Printing: a survey. Advanced Science, [S.L.], v. 7, n. 12, julho 2020. p. 1902307.
- TASHI. Analytical Point-Cloud Based Geometric Modeling for Additive Manufacturing and Its Application to Cultural Heritage Preservation. Applied Sciences, [S.L.], 24 abril 2018. MDPI AG. p. 656.
- KRISHNANAND; TAUFIK, M. Fused Filament Fabrication (FFF) Based 3D Printer and Its Design: a review. In: DEEPAK, B. B. V. L.; PARHI, D. R. K.; BISWAL, B. B. Advanced Manufacturing Systems and Innovative Product Design: lecture notes in mechanical engineering, Singapore, 2021. p. 497-505.
- ADEL, M. E. A. Polishing of fused deposition modeling products by hot air jet: evaluation of surface roughness. Journal of Materials Processing Technology, [S.L.], v. 251, Janeiro 2018. p. 73-82. Disponivel em: http://dx.doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2017>.
- 61. SANTANA, L. Avaliação de Uma Impressora 3D Baseada em Projeto de Código Aberto na Fabricação de Peças em PLA. [S.I.]: [s.n.], 2015. 166 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica., Centro Tecnológico, Universidade Federal de Santa Catarina.
- 62. KRETSCHEK, D. Desenvolvimento de um Cabeçote de Extrusão por Êmbolo para Polipropileno Granulado Visando a Manufatura Aditiva. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais. UFPR: Curitiba, 2012.

- 63. MUEHLENFELD, C.; ROBERTS, S. A. 3D/4D Printing in Additive Manufacturing: Process Engineering and Novel Excipients. In: MANIRUZZAMAN, Mohammed (Ed.). 3D and 4D Printing in Biomedical Applications: Process Engineering and Additive Manufacturing, Weinheim, Germany, n. Cap. 1., p. 1-23, 2019.
- 64. 3DXTECH. Gearbox[™] HT2 3D Printer: materials performance vs. cost. Materials performance vs. Cost, 2021. Disponivel em: <https://www.3dxtech.com/3d-printer-gearbox/>. Acesso em: 13 setembro 2021.
- SHANMUGAM, V. E. A. The mechanical testing and performance analysis of polymer-fibre composites prepared through the additive manufacturing.
 Polymer Testing, Elsevier BV, v. 93, jan. 2021. p. 106925.
- GONZALEZ-GUTIERREZ, J. E. A. Additive Manufacturing of Metallic and Ceramic Components by the Material Extrusion of Highly-Filled Polymers: a review and future perspectives. **Materials**, [S.L.], v. 11, n. 5, 2018. p. 840. MDPI AG.
- VALKENAERS, H. E. A. A novel approach to additive manufacturing: screw extrusion 3D printing. 10th International Conference on Multi-Material Micro Manufacture, 2013, San Sebastian. **Proceedings...**, San Sebastian, Research Publishing, 2013. p. 235–238.
- SINGHAL, S. E. A. 3D food printing: paving way towards novel foods. Anais da Academia Brasileira de Ciências, v. 92, n. n. 3, 2020.
- HU, F. E. A. Extrusion-Based 3D Printing of Ceramic Pastes: mathematical modeling and in situ shaping retention approach. Materials, v. 14, n. 5, 28 fev. 2021. p. 1137.
- BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. Incropera Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa. ed. 8. ed. [S.I.]: LTC, 2019.
- 71. JUSTINO NETTO, J. M.; SILVEIRA, Z. C. Design of an innovative 3D print head based on twin-screw extrusion. Transactions of the ASME, Journal of Mechanical Design, V. 140, n. n. 12, 2018.

- 72. XU, B. et al. Numerical study of mixing dynamics inside the novel elements of a corotating nontwin screw extruder. Advances Polymer Technologies, p. 1-19, 2017. ISSN 10.1002/adv.21923.
- SCHUSCHNIGG, S. et al. Optimization of Twin Screw Extrusion using CFD for Polymer/Nanoclay Composites. Proceedings of the Regional Conference Graz 2015 – Polymer Processing Society PPS, 31 october 2016.
- 74. STANSBURY, J. W.; IDACAVAGE, M. J. 3D Printing with Polymers: Challenges Among Expanding Opitions and Opotunites. **Dent Maters**, 2015.
- 75. TORRADO, A. R.; ROBERSON, D. A. Failure Analysis and Anisotropy Evaluation of 3D-Printed Tensile Test Specimens of Different Geometries and Print Raster Patterns. **ASM International**, p. 154-164, 2016.
- GARTNER. https://www.gartner.com/smarterwithgartner/top-trends-fromthe-gartner-hype-cycle-for-midsize-enterprises-2017, 2017. Acesso em: 09 nov. 2018.
- 77. ARMENDARIZ, U. et al. Evaluation and Performance Analysis of 3D Printing Technique for Ka-Band Antenna Production. 46th European Microwave Conference, p. 1259-1262, 2016.
- 78. GAO, W. et al. Thestatus, challenges, and future of additive manufacturing inengineering., p. v. 69, p. 65–89, 2015. ISSN ISSN 0010-4485.
- BIKAS, H.; STAVROPOULOS, P.; CHRYSSOLOURIS, G. Additive manufacturing methods and modelling approaches: a critical review. International Journal Of Advanced Manufacturing Technology, 2015. 389-405.
- CHENG, X. M. . E. A. The design of screw extrusion mechanism based on melted extrusion modeling. **Applied Mechanics and Material**, v. 44, p. 1455–1459, 2011.
- IVANOVA, O.; WILLIAMS, C.; CAMPBELL, T. Additive manufacturing (AM) and nanotechnology: promises and challenges. Rapid Prototyping Journal, 2012. 353-364.

- GARG, A.; TAI, K. State-of-the-art in empiric modelling of rapid prototyping processes. Rapid Prototyping Journal, p. 164-178, 20/02 2014. ISSN DOI 10.1108/RPJ-08-2012-0072.
- THOMPSON, M. K. et al. Design for Additive Manufacturing: Trends, opportunities, considerations and constraints. CIRP Annals – Manufacturing Technology, v. 65, p. p.737-760, 2016.
- 84. HANAJE, W.; BARTOLO, P. J. Structural Evolution of PCL during Melt Extrusion 3D Printing. Macromol Mater Eng 303(2):1700494, 2018.
- 85. TSENG, J. W. et al. Screw extrusion-based additive manufacturing of PEEK. Materials & Design 140:209–221.
- 86. VOLPATO, N. et al. Experimental analysis of an extrusion system for additive. Additive Manufacturing, V. 81, n. 9-12. 1519-1531.
- 87. JUSTINO NETTO, J. M.; SILVEIRA, Z. C. Dispositivo extrusor dupla rosca corrotativa vertical e modular e processo de extrusão do mesmo. Publicado na RPI 2729 de 25/04/2023, Consessão: 25 abr. 2017.
- 88. AMERICAM SOCIETY FOR TESTING F2792: Standard Terminology Technologies. [S.I.]: [s.n.], 2012.

APENDICE A

ALGORÍTIMO NUMÉRICO MODELO HME - MODIFICADO

classdef HME-MODIFICADO < matlab.apps.AppBase</pre>

% Properties that correspond to app components properties (Access = public) ProgramaTesteUIFigure matlab.ui.Figure TabGroup matlab.ui.container.TabGroup CarreauTab matlab.ui.container.Tab RUN 2 matlab.ui.control.Button Label 2 matlab.ui.control.Label TaxaCriticaCarreau matlab.ui.control.NumericEditField Expoente matlab.ui.control.NumericEditField matlab.ui.control.Label EditField 2Label 2 Visco_zero_Carreau matlab.ui.control.NumericEditField gØLabel matlab.ui.control.Label Axes 2 matlab.ui.control.UIAxes CarreauWLFTab matlab.ui.container.Tab C1 2 matlab.ui.control.NumericEditField T0Label 10 matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.NumericEditField C1 T0Label 9 matlab.ui.control.Label aT 3 matlab.ui.control.EditField aTEditFieldLabel 3 matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.NumericEditField T_3 T0Label 8 matlab.ui.control.Label Tref 3 matlab.ui.control.NumericEditField T0Label 7 matlab.ui.control.Label RUN 3 matlab.ui.control.Button Label 3 matlab.ui.control.Label TaxaCriticaCarreau_2 matlab.ui.control.NumericEditField Expoente 2 matlab.ui.control.NumericEditField EditField 2Label 3 matlab.ui.control.Label Visco zero Carreau 2 matlab.ui.control.NumericEditField matlab.ui.control.Label g0Label 2 Axes 3 matlab.ui.control.UIAxes CareauYasudaArheniusTab matlab.ui.container.Tab matlab.ui.control.NumericEditField ER T0Label 3 matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.EditField aТ aTEditFieldLabel matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.NumericEditField т matlab.ui.control.Label T0Label_2 matlab.ui.control.NumericEditField Tref T0Label matlab.ui.control.Label RUN matlab.ui.control.Button matlab.ui.control.Label Label TaxaInf matlab.ui.control.NumericEditField TempRelax matlab.ui.control.NumericEditField EditField 2Label matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.NumericEditField а aEditFieldLabel matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.NumericEditField TaxaZero EditFieldLabel matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.NumericEditField m mEditFieldLabel matlab.ui.control.Label matlab.ui.control.UIAxes Axes

```
EntradaRoscasTab
                                        matlab.ui.container.Tab
        GRAVARButton
                                        matlab.ui.control.Button
        NumElemRosca
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        NmerodeElementosdaroscaLabel
                                        matlab.ui.control.Label
                                        matlab.ui.control.Table
        UTTable
        MalhaTab
                                        matlab.ui.container.Tab
        Table2
                                        matlab.ui.control.Table
                                        matlab.ui.control.EditField
        CompRosca 2
        ComprimentoElementoLabel
                                        matlab.ui.control.Label
        CalcularButton
                                        matlab.ui.control.Button
                                        matlab.ui.control.EditField
        CompRosca
        ComprimentodaroscaEditFieldLabel matlab.ui.control.Label
        MEFNUMEL
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        NmerodeElementosEditFieldLabel
                                        matlab.ui.control.Label
                                        matlab.ui.container.Tab
        kfkbkpeVmxTab
        TABELAGLOBAL
                                        matlab.ui.control.Table
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        Rotao
        RotaoEditFieldLabel
                                        matlab.ui.control.Label
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        Afree
        AfreeEditFieldLabel
                                        matlab.ui.control.Label
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        D
        DEditFieldLabel
                                        matlab.ui.control.Label
        TableTAB4
                                        matlab.ui.control.Table
        CalcularButton 2
                                        matlab.ui.control.Button
                                        matlab.ui.container.Tab
        Tab
        MassicaAlimenta
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        MssicadeAlimentaoEditFieldLabel matlab.ui.control.Label
        IITTahle2
                                        matlab.ui.control.Table
        DensidadePolmeroEditField
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        DensidadePolmeroEditFieldLabel
                                        matlab.ui.control.Label
        PressoBocalEditField
                                        matlab.ui.control.NumericEditField
        PressoBocalEditFieldLabel
                                        matlab.ui.control.Label
        CalcularButton 3
                                        matlab.ui.control.Button
        UIAxes
                                        matlab.ui.control.UIAxes
    end
    % Callbacks that handle component events
    methods (Access = private)
        % Button pushed function: RUN
        function RUNButtonPushed(app, event)
            cla(app.Axes,"reset");
            aT = exp(app.ER.Value*((1/(app.T.Value + 273))-(1/(app.Tref.Value
+ 273))));
            app.aT.Value = num2str(aT);
            Taxa = 0:0.1:10000;
            Visco =
app.TaxaZero.Value*aT*(1+((app.TempRelax.Value*aT*Taxa).^app.a.Value)).^((app
.m.Value-1)/app.a.Value);
            A = loglog(app.Axes,Taxa,Visco);
            app.Axes.XLim = [0.1,10000]
            A.LineWidth = 2;
            A.Color = "red";
            app.Axes.XLabel.String = 'Taxa de Cisalhamento s^-1'
            app.Axes.YLabel.String = 'Viscosidade Pa.s'
```

```
end
```

% Callback function

```
% Button pushed function: GRAVARButton
        function GRAVARButtonPushed(app, event)
           NumElem = app.NumElemRosca.Value;
           Elementos Rosca = zeros(NumElem,6);
           for i = 1:1:NumElem
               Elementos Rosca(i,6) = i;
           end
           S.Comprimento = [Elementos Rosca(1:NumElem,1)];
           S.A1 = [Elementos_Rosca(1:NumElem,2)];
           S.A2 = [Elementos Rosca(1:NumElem,3)];
           S.A3 = [Elementos Rosca(1:NumElem,4)];
           Sa(1:NumElem) = { 'A' }
           S.Tipo = Sa(:)
           S.Num = [Elementos Rosca(1:NumElem,6)];
           categor = categorical(S.Tipo,{'A', 'B', 'C', 'D', 'E', 'F'})
           S.Tipo = categor;
           DS = struct2table(S);
           app.UITable.Data = DS;
        end
        % Button pushed function: CalcularButton
        function CalcularButtonPushed(app, event)
            A = app.UITable.Data
            CompRosca = sum(A.Comprimento(:))
            for i = 1:1:app.NumElemRosca.Value
                QTDElementos(i) =
A.Comprimento(i)*app.MEFNUMEL.Value/(CompRosca)
            end
```

function TabelaCellEdit(app, event)

end

```
Elementos = [1:app.MEFNUMEL.Value+1]
cont = QTDElementos(1)
Ind_Elem_E{1} = Elementos(1:cont+1)
for i = 2:1:app.NumElemRosca.Value
       cont = cont + QTDElementos(i)
       Ind_Elem_E{i} = Elementos((cont-QTDElementos(i))+1:cont)
```

end

OTDElementos = OTDElementos(:) % transpor vetor coluna para vetor linha assim combina com entrada da tabela

```
app.Table2.ColumnName = { 'Num.Elem' 'Comprimento'
'Número de Elementos' }
                       app.Table2.Data = b
                       CompEle = CompRosca/app.MEFNUMEL.Value
                       app.CompRosca.Value = num2str(CompRosca)
                       app.CompRosca_2.Value = num2str(CompEle)
        end
        % Button pushed function: CalcularButton 2
        function CalcularButton 2Pushed(app, event)
            A = app.UITable.Data
            for i = 1:1:app.NumElemRosca.Value
                V(i)= A.A1(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value^3)
            end
            for i = 1:1:app.NumElemRosca.Value
            kf(i) = A.A1(i)*((app.D.Value)^2)/app.Afree.Value
            kb(i) = A.A1(i)*((app.D.Value)^2)/app.Afree.Value
            kp(i) = A.A2(i)/A.A1(i)
            end
            CompRosca = sum(A.Comprimento(:))
            for i = 1:1:app.NumElemRosca.Value
                QTDElementos(i) =
A.Comprimento(i)*app.MEFNUMEL.Value/(CompRosca)
            end
            QTDElementos = QTDElementos(:) % transpor vetor coluna para vetor
linha assim combina com entrada da tabela
            Elementos = [1:app.MEFNUMEL.Value+1]
            cont = QTDElementos(1)
            Ind_Elem_E{1} = Elementos(1:cont+1)
            for i = 2:1:app.NumElemRosca.Value
                    cont = cont + QTDElementos(i)
                    Ind_Elem_E{i} = Elementos((cont-QTDElementos(i))+1:cont)
            end
            for i = 1:1:app.NumElemRosca.Value
                  kf_Global([Ind_Elem_E{i}]) = kf(i)
                  kb_Global([Ind_Elem_E{i}]) = kb(i)
                  kp_Global([Ind_Elem_E{i}]) = kp(i)
                  A3_Global([Ind_Elem_E{i}]) = A.A3(i)
                  V_Global([Ind_Elem_E{i}]) = V(i)
                  A1_Global([Ind_Elem_E{i}]) = A.A1(i)
                  A2_Global([Ind_Elem_E{i}]) = A.A2(i)
            end
```

```
for i = 1:1:app.NumElemRosca.Value
  if A.Tipo(i) == 'A'
      kb_Global([Ind_Elem_E{i}]) = 0
  end
```

```
if A.Tipo(i) == 'B'
                kf Global([Ind Elem E{i}]) = 0
             end
            if A.Tipo(i) == 'C'
                kf_Global([Ind_Elem_E{i}]) = 0
                kb Global([Ind Elem E{i}]) = 0
             end
             if A.Tipo(i) == 'D'
                kf_Global([Ind_Elem_E{i}]) = 0
                kb Global([Ind Elem E{i}]) = 0
             end
             if A.Tipo(i) == 'F'
                kf_Global([Ind_Elem_E{i}]) = 0
                kb_Global([Ind_Elem_E{i}]) = 0
             end
           end
           app.TableTAB4.ColumnName = { 'kf', 'kb', 'kp', 'V_máx' }
           C = table(kf(:),kb(:),kp(:),V(:))
           app.TableTAB4.Data = C
           app.TABELAGLOBAL.ColumnName = { 'kf', 'kb',
'kp','V_máx','A3','A1','A2'}
           D =
table(kf_Global(:),kb_Global(:),kp_Global(:),V_Global(:),A3_Global(:),A1_Glob
al(:),A2_Global(:))
           app.TABELAGLOBAL.Data = D
       end
       % Button pushed function: CalcularButton 3
       function CalcularButton_3Pushed(app, event)
           A = app.UITable.Data
           A.Properties.VariableNames = ["Comp", "A1",
"A2", "A3", "Tipo", "Posi"]
           B = app.TABELAGLOBAL.Data
           B.Properties.VariableNames = ["kf", "kb",
"kp","V_máx","A3","A1","A2"]
           X = linspace(0,
str2double(app.CompRosca.Value),app.MEFNUMEL.Value+1)
P = sym('P',[1,app.MEFNUMEL.Value+1])
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
             m f(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
```

m b(i) =app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va lue*app.D.Value if i == app.MEFNUMEL.Value $m_p(i) = -$ ((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/app.Visco zero Carreau.Value)*((app.PressoBocalEditField.Value-P(i))/(str2double(app.CompRosca.Value)-X(i))) end if i < app.MEFNUMEL.Value</pre> m p(i) = -((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/app.Visco_zero _Carreau.Value)*((P(i+1)-P(i))/(X(i+1)-X(i)))

> end end

for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value

if i == 1

me(i) = [m b(i+1) + app.MassicaAlimenta.Value - m f(i) $m_b(i) - m_p(i) == 0$] end if i == app.MEFNUMEL.Value % $me(i) = [m_f(i-1) - m_p(i) + m_p(i-1) == 0]$ end if i>1 && i<app.MEFNUMEL.Value</pre>

$$me(i) = [m_f(i-1) + m_b(i+1) + m_p(i-1) - m_f(i) - m_b(i)]$$

- m p(i) == 0]

end

end

```
m e = solve(me)
fnames = fieldnames(m_e)
```

```
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
Pressoes_Newtoniano(i) = double(m_e.(fnames{i}))
end
```

```
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
```

```
if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
                  V(i) =
B.A1(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*(app.D.Value^3) -
```

```
(B.A1(i)/B.A2(i))*((app.D.Value^4)/app.TaxaZero.Value)*((Pressoes_Newtoniano(
i+1)-Pressoes_Newtoniano(i))/(X(i+1)-X(i)))
```

end

```
if i == app.MEFNUMEL.Value
             V(i) =
B.A1(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*(app.D.Value^3) -
(B.A1(i)/B.A2(i))*((app.D.Value^4)/app.TaxaZero.Value)*((app.PressoBocalEditF
ield.Value-Pressoes Newtoniano(i))/(X(i+1)-X(i)))
          end
          end
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
               Taxa_Rep(i) = B.A3(i)*(app.Rotao.Value/60)*abs(1-
(V(i)/(B.A1(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value^3))))
           end
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
               Visco Rep(i) =
app.Visco zero Carreau.Value/((1+(Taxa Rep(i)/app.TaxaCriticaCarreau.Value))^
app.Expoente.Value)
           end
P_C = sym('P',[1,app.MEFNUMEL.Value+1])
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
             m fC(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
             m bC(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
             if i == app.MEFNUMEL.Value
                 m_pC(i) = -
((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/Visco_Rep(i))*
((app.PressoBocalEditField.Value-P_C(i))/(str2double(app.CompRosca.Value)-
X(i)))
             end
             if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
                 m pC(i) = -
((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/Visco_Rep(i))*
((P_C(i+1)-P_C(i))/(X(i+1)-X(i)))
```

```
end
            end
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
                 if i == 1
                    meC(i) = [ m bC(i+1) + app.MassicaAlimenta.Value -
m fC(i) - m bC(i) - m pC(i) == 0
                 end
                 if i == app.MEFNUMEL.Value
%
                    meC(i) = [m fC(i-1) - m pC(i) + m pC(i-1) == 0]
                 end
                 if i>1 && i<app.MEFNUMEL.Value</pre>
                    meC(i) = [m_fC(i-1) + m_bC(i+1) + m_pC(i-1) - m_fC(i) -
m_bC(i) - m_pC(i) == 0]
                 end
           end
           m eC = solve(meC)
           fnamesC = fieldnames(m eC)
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
           Pressoes_Carreau(i) = double(m_eC.(fnamesC{i}))
           end
            for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
           if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
                VC(i) =
B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value +
B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value -
((1/B.kp(i))*((app.D.Value^4)/Visco_Rep(i))*((Pressoes_Carreau(i+1)-
Pressoes_Carreau(i))/((X(i+1)-X(i))))
           end
           if i == app.MEFNUMEL.Value
               VC(i) =
B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value +
B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value -
((1/B.kp(i))*((app.D.Value^4)/Visco_Rep(i))*((app.PressoBocalEditField.Value-
Pressoes Carreau(i))/((X(i+1)-X(i))))
           end
```

end

```
aT = exp((-app.C1.Value*(app.T 3.Value -
app.Tref_3.Value))/(app.C1_2.Value + app.T_3.Value - app.Tref_3.Value ));
   app.aT 3.Value = num2str(aT);
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
           Visco RepCW(i) =
aT*app.Visco zero Carreau 2.Value*((1+(Taxa Rep(i)*aT/app.TaxaCriticaCarreau
2.Value)).^-app.Expoente 2.Value)
end
P CW = sym('P',[1,app.MEFNUMEL.Value+1])
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
             m fCW(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
              m bCW(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
             if i == app.MEFNUMEL.Value
                 m pCW(i) = -
((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/Visco RepCW(i)
)*((app.PressoBocalEditField.Value-P_CW(i))/(str2double(app.CompRosca.Value)-
X(i)))
             end
             if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
                 m pCW(i) = -
((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/Visco RepCW(i)
)*((P_CW(i+1)-P_CW(i))/(X(i+1)-X(i)))
             end
           end
          for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
               if i == 1
                  meCW(i) = [ m_bCW(i+1) + app.MassicaAlimenta.Value -
m_fCW(i) - m_bCW(i) - m_pCW(i) == 0
               end
               if i == app.MEFNUMEL.Value
%
                  meCW(i) = [m_fCW(i-1) - m_pCW(i) + m_pCW(i-1) == 0]
               end
               if i>1 && i<app.MEFNUMEL.Value
```

```
meCW(i) = [m_fCW(i-1) + m_bCW(i+1) + m_pCW(i-1) -
m fCW(i) - m bCW(i) - m pCW(i) == 0
               end
         end
         m_eCW = solve(meCW)
         fnamesCW = fieldnames(m eCW)
         for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
         Pressoes CarreauW(i) = double(m eCW.(fnamesCW{i}))
         end
          for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
         if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
              VCW(i) =
B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value +
B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value
((1/B.kp(i))*((app.D.Value^4)/Visco_RepCW(i))*((Pressoes_CarreauW(i+1)-
Pressoes_CarreauW(i))/((X(i+1)-X(i))))
         end
         if i == app.MEFNUMEL.Value
             VCW(i) =
B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value +
B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value -
((1/B.kp(i))*((app.D.Value^4)/Visco_RepCW(i))*((app.PressoBocalEditField.Valu
e-Pressoes_CarreauW(i))/((X(i+1)-X(i)))))
         end
         end
filename = ('D:\DOUTORADO 2023\Pasta4.csv');
```

```
dados = readtable(filename, 'Delimiter', ';');
AX = dados.X1
AY = dados.X2
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
    if i == 1
    T_interp(i) = AY(1)
    else
        T_interp(i) = interp1(AX,AY,X(i)*1000,'linear')
    end
end
```

for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
```
aT1(i) = exp(app.ER.Value*((1/(T_interp(i) + 273))-(1/(app.Tref.Value +
273))))
 end
% aT1 = exp(app.ER.Value*((1/(app.T.Value + 273))-(1/(app.Tref.Value +
273))));
% app.aT.Value = num2str(aT1);
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
           Visco RepCYA(i) =
app.TaxaZero.Value*aT1(i)*((1+((app.TempRelax.Value*aT1(i)*abs(Taxa_Rep(i))).
^app.a.Value)).^((app.m.Value-1)/app.a.Value));
end
P_CYA = sym('P',[1,app.MEFNUMEL.Value+1])
            for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
               m_fCYA(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
               m bCYA(i) =
app.DensidadePolmeroEditField.Value*B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*app.Afree.Va
lue*app.D.Value
               if i == app.MEFNUMEL.Value
                   m pCYA(i) = -
((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/Visco_RepCYA(i
))*((app.PressoBocalEditField.Value-
P CYA(i))/(str2double(app.CompRosca.Value)-X(i)))
               end
               if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
                   m pCYA(i) = -
((app.D.Value^4)/B.kp(i))*(app.DensidadePolmeroEditField.Value/Visco RepCYA(i
))*((P_CYA(i+1)-P_CYA(i))/(X(i+1)-X(i)))
               end
            end
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
                 if i == 1
                    meCYA(i) = [ m_bCYA(i+1) + app.MassicaAlimenta.Value -
m_fCYA(i) - m_bCYA(i) - m_pCYA(i) == 0]
                 end
                 if i == app.MEFNUMEL.Value
%
                    meCYA(i) = [m fCYA(i-1) - m pCYA(i) + m pCYA(i-1) == 0]
                 end
                 if i>1 && i<app.MEFNUMEL.Value
```

183

```
meCYA(i) = [m_fCYA(i-1) + m_bCYA(i+1) + m_pCYA(i-1) -
m fCYA(i) - m bCYA(i) - m pCYA(i) == 0
               end
          end
          m eCYA = solve(meCYA)
          fnamesCYA = fieldnames(m eCYA)
          for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
          Pressoes CarreauYA(i) = double(m eCYA.(fnamesCYA{i}))
          end
           for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
          if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
              VCYA(i) =
B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value +
B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value
((1/B.kp(i))*((app.D.Value^4)/Visco_RepCYA(i))*((Pressoes_CarreauYA(i+1)-
Pressoes CarreauYA(i))/((X(i+1)-X(i))))
          end
          if i == app.MEFNUMEL.Value
             VCYA(i) =
B.kb(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value +
B.kf(i)*(app.Rotao.Value/60)*(app.D.Value)*app.Afree.Value -
((1/B.kp(i))*((app.D.Value^4)/Visco_RepCYA(i))*((app.PressoBocalEditField.Val
ue-Pressoes_CarreauYA(i))/((X(i+1)-X(i))))
          end
          end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
 if i == app.MEFNUMEL.Value
 Derid(i) = app.PressoBocalEditField.Value -Pressoes_Newtoniano(i)
 end
 if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
 Derid(i) = Pressoes_Newtoniano(i+1) - Pressoes_Newtoniano(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes Newtoniano(i)> 0
  P_Newt(i) = Pressoes_Newtoniano(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes Newtoniano(i)<=0</pre>
   %P_Newt(i) = Pressoes_Newtoniano(i)
```

```
if Derid(i) < 0 && Derid(i+1) > 0
       ContadorMatriz = i
       for i = ContadorMatriz:-1:1
       P_Newt(i) = Pressoes_Newtoniano(i) -
Pressoes Newtoniano(ContadorMatriz)
       end
   end
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
if P Newt(i) < 0
     P_Newt(i) = 0
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
   if P_Newt(i)<=0</pre>
     P_NewtF(i) = 0
   end
   if P_Newt(i) > 0
   P_NewtF(i) = P_Newt(i)
   end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
 if i == app.MEFNUMEL.Value
 Derid_1(i) = app.PressoBocalEditField.Value - Pressoes_Carreau(i)
 end
 if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
 Derid_1(i) = Pressoes_Carreau(i+1) - Pressoes_Carreau(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes Carreau(i)> 0
  P_Carreau(i) = Pressoes_Carreau(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes_Carreau(i)<=0</pre>
   %P_Carreau(i) = Pressoes_Carreau(i)
   if Derid_1(i) < 0 && Derid_1(i+1) > 0
       ContadorMatriz_1 = i
       for i = ContadorMatriz 1:-1:1
       P_Carreau(i) = Pressoes_Carreau(i) -
Pressoes_Carreau(ContadorMatriz_1)
       end
   end
end
end
```

```
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
if P Carreau(i) < 0</pre>
      P_Carreau(i) = 0
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
    if P Carreau(i)<=0</pre>
      P CarreauF(i) = 0
    end
    if P Carreau(i) > 0
    P_CarreauF(i) = P_Carreau(i)
    end
end
%%%%%% CARREAU WLF - NÃO ISOTÉRMICO (MATERIAL AMORFO) %%%%%%%
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
 if i == app.MEFNUMEL.Value
 Derid_2(i) = app.PressoBocalEditField.Value - Pressoes_CarreauW(i)
 end
  if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
  Derid_2(i) = Pressoes_CarreauW(i+1) - Pressoes_CarreauW(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes CarreauW(i)> 0
   P_CarreauW(i) = Pressoes_CarreauW(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes_CarreauW(i)<=0</pre>
    if Derid 2(i) < 0 && Derid 2(i+1) > 0
        ContadorMatriz 2 = i
        for i = ContadorMatriz_2:-1:1
        P_CarreauW(i) = Pressoes_CarreauW(i) -
Pressoes_CarreauW(ContadorMatriz_2)
        end
    end
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
if P_CarreauW(i) < 0</pre>
      P_CarreauW(i) = 0
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
    if P CarreauW(i)<=0</pre>
      P_CarreauWF(i) = 0
    end
```

```
if P CarreauW(i) > 0
    P CarreauWF(i) = P CarreauW(i)
    end
end
%%%%% CARREAU-YASUDA - NÃO ISOTÉRMICO (MATERIAL SEMICRISTALINO) %%%%%
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
 if i == app.MEFNUMEL.Value
  Derid_3(i) = app.PressoBocalEditField.Value - Pressoes_CarreauYA(i)
 end
  if i < app.MEFNUMEL.Value</pre>
  Derid_3(i) = Pressoes_CarreauYA(i+1) - Pressoes_CarreauYA(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes CarreauYA(i)> 0
   P_CYARHE(i) = Pressoes_CarreauYA(i)
end
end
for i=app.MEFNUMEL.Value:-1:1
if Pressoes_CarreauYA(i)<=0</pre>
    if Derid_3(i) < 0 && Derid_3(i+1) > 0
        ContadorMatriz_3 = i
        for i = ContadorMatriz_3:-1:1
        P CYARHE(i) = Pressoes CarreauYA(i) -
Pressoes_CarreauYA(ContadorMatriz_3)
        end
    end
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
if P_CYARHE(i) < 0
      P_CYARHE(i) = 0
end
end
for i=1:1:app.MEFNUMEL.Value
    if P_CYARHE(i)<=0</pre>
      P_CYARHEF(i) = 0
    end
    if P_CYARHE(i) > 0
    P_CYARHEF(i) = P_CYARHE(i)
    end
end
```

P_NewtF(app.MEFNUMEL.Value+1) = app.PressoBocalEditField.Value
P_CarreauF(app.MEFNUMEL.Value+1) = app.PressoBocalEditField.Value
P_CarreauWF(app.MEFNUMEL.Value+1) = app.PressoBocalEditField.Value
P CYARHEF(app.MEFNUMEL.Value+1) = app.PressoBocalEditField.Value

Z =
plot(app.UIAxes,X,P_NewtF/1e6,X,P_CarreauF/1e6,X,P_CarreauWF/1e6,X,P_CYARHEF/
1e6);

app.UIAxes.XLim = [0,str2double(app.CompRosca.Value)]

```
% Z.LineWidth = 2;
% Z.Color = "red";
app.UIAxes.XLabel.String = 'Posição'
app.UIAxes.YLabel.String = 'Pressão MPa'
```

end

```
% Button pushed function: RUN 2
       function RUN_2ButtonPushed(app, event)
            cla(app.Axes 2, "reset");
            Taxa = 0:0.1:10000;
            Visco =
app.Visco_zero_Carreau.Value*((1+(Taxa/app.TaxaCriticaCarreau.Value)).^-
app.Expoente.Value)
            A = loglog(app.Axes_2,Taxa,Visco);
            app.Axes_2.XLim = [0.1,10000]
            A.LineWidth = 2;
            A.Color = "red";
            app.Axes_2.XLabel.String = 'Taxa de Cisalhamento s^-1'
            app.Axes_2.YLabel.String = 'Viscosidade Pa.s'
        end
       % Button pushed function: RUN 3
       function RUN_3ButtonPushed(app, event)
```

```
cla(app.Axes_3,"reset");
```

```
aT = exp((-app.C1.Value*(app.T_3.Value -
app.Tref 3.Value))/(app.C1 2.Value + app.T 3.Value - app.Tref 3.Value ));
            app.aT 3.Value = num2str(aT);
            Taxa = 0:0.1:10000;
           Visco =
aT*app.Visco zero Carreau 2.Value*((1+(Taxa*aT/app.TaxaCriticaCarreau 2.Value
)).^-app.Expoente 2.Value)
            A = loglog(app.Axes 3,Taxa,Visco);
            app.Axes 3.XLim = [0.1,10000]
           A.LineWidth = 2;
           A.Color = "red";
            app.Axes_3.XLabel.String = 'Taxa de Cisalhamento s^-1'
            app.Axes 3.YLabel.String = 'Viscosidade Pa.s'
        end
   end
   % Component initialization
   methods (Access = private)
       % Create UIFigure and components
       function createComponents(app)
           % Create ProgramaTesteUIFigure and hide until all components are
created
            app.ProgramaTesteUIFigure = uifigure('Visible', 'off');
            app.ProgramaTesteUIFigure.Position = [100 100 640 480];
            app.ProgramaTesteUIFigure.Name = 'Programa Teste';
            app.ProgramaTesteUIFigure.Icon = 'braço robótico.png';
           % Create TabGroup
            app.TabGroup = uitabgroup(app.ProgramaTesteUIFigure);
            app.TabGroup.Position = [1 1 640 480];
           % Create CarreauTab
            app.CarreauTab = uitab(app.TabGroup);
            app.CarreauTab.Title = 'Carreau ';
           % Create Axes 2
            app.Axes_2 = uiaxes(app.CarreauTab);
            title(app.Axes_2, 'Title')
            xlabel(app.Axes_2, 'X')
           ylabel(app.Axes_2, 'Y')
            zlabel(app.Axes_2, 'Z')
            app.Axes_2.Position = [140 11 484 431];
           % Create g0Label
            app.g0Label = uilabel(app.CarreauTab);
            app.g0Label.HorizontalAlignment = 'right';
            app.g0Label.Position = [26 390 25 22];
            app.g0Label.Text = 'η0';
           % Create Visco zero Carreau
            app.Visco zero Carreau = uieditfield(app.CarreauTab, 'numeric');
            app.Visco zero Carreau.Position = [66 390 51 22];
            app.Visco_zero_Carreau.Value = 2999.9;
           % Create EditField_2Label_2
```

```
app.EditField_2Label_2 = uilabel(app.CarreauTab);
            app.EditField 2Label 2.HorizontalAlignment = 'right';
            app.EditField 2Label 2.Position = [26 327 25 22];
            app.EditField_2Label_2.Text = 'm';
            % Create Expoente
            app.Expoente = uieditfield(app.CarreauTab, 'numeric');
            app.Expoente.Position = [66 327 51 22];
            app.Expoente.Value = 0.39489;
            % Create TaxaCriticaCarreau
            app.TaxaCriticaCarreau = uieditfield(app.CarreauTab, 'numeric');
            app.TaxaCriticaCarreau.Position = [66 361 51 21];
            app.TaxaCriticaCarreau.Value = 5.78;
            % Create Label 2
            app.Label_2 = uilabel(app.CarreauTab);
            app.Label_2.HorizontalAlignment = 'center';
            app.Label 2.VerticalAlignment = 'top';
            app.Label_2.Position = [23 361 41 30];
            app.Label_2.Text = {''; 'y_crit'};
            % Create RUN 2
            app.RUN_2 = uibutton(app.CarreauTab, 'push');
            app.RUN_2.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@RUN 2ButtonPushed, true);
            app.RUN 2.FontWeight = 'bold';
            app.RUN_2.Position = [31 147 100 23];
            app.RUN_2.Text = 'RUN';
            % Create CarreauWLFTab
            app.CarreauWLFTab = uitab(app.TabGroup);
            app.CarreauWLFTab.Title = 'Carreau WLF';
            % Create Axes 3
            app.Axes_3 = uiaxes(app.CarreauWLFTab);
            title(app.Axes_3, 'Title')
xlabel(app.Axes_3, 'X')
ylabel(app.Axes_3, 'Y')
zlabel(app.Axes_3, 'Z')
            app.Axes_3.Position = [140 11 484 431];
            % Create g0Label_2
            app.g0Label 2 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
            app.g0Label 2.HorizontalAlignment = 'right';
            app.g0Label_2.Position = [22 409 25 22];
            app.g0Label_2.Text = 'n0';
            % Create Visco_zero_Carreau_2
            app.Visco_zero_Carreau_2 = uieditfield(app.CarreauWLFTab,
'numeric');
            app.Visco_zero_Carreau_2.Position = [62 409 53 22];
            app.Visco_zero_Carreau_2.Value = 2999;
            % Create EditField 2Label 3
            app.EditField 2Label 3 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
            app.EditField 2Label 3.HorizontalAlignment = 'right';
            app.EditField_2Label_3.Position = [22 346 25 22];
            app.EditField_2Label_3.Text = 'm';
```

```
% Create Expoente 2
            app.Expoente 2 = uieditfield(app.CarreauWLFTab, 'numeric');
            app.Expoente_2.Position = [62 346 53 22];
            app.Expoente 2.Value = 0.39489;
            % Create TaxaCriticaCarreau_2
            app.TaxaCriticaCarreau 2 = uieditfield(app.CarreauWLFTab,
'numeric');
            app.TaxaCriticaCarreau 2.Position = [62 380 53 21];
            app.TaxaCriticaCarreau 2.Value = 5.78;
            % Create Label_3
            app.Label_3 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
            app.Label 3.HorizontalAlignment = 'center';
            app.Label_3.VerticalAlignment = 'top';
            app.Label_3.Position = [19 380 41 30];
            app.Label_3.Text = {''; 'y_crit'};
            % Create RUN 3
            app.RUN 3 = uibutton(app.CarreauWLFTab, 'push');
            app.RUN_3.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@RUN 3ButtonPushed, true);
            app.RUN_3.FontWeight = 'bold';
            app.RUN 3.Position = [31 147 100 23];
            app.RUN 3.Text = 'RUN';
            % Create T0Label_7
            app.T0Label_7 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
            app.T0Label_7.HorizontalAlignment = 'right';
            app.T0Label_7.Position = [21 257 25 22];
            app.T0Label 7.Text = 'TR';
            % Create Tref 3
            app.Tref_3 = uieditfield(app.CarreauWLFTab, 'numeric');
            app.Tref_3.Position = [61 257 53 22];
            app.Tref_3.Value = 170;
            % Create T0Label 8
            app.T0Label_8 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
            app.T0Label_8.HorizontalAlignment = 'right';
            app.T0Label_8.Position = [26 208 25 22];
            app.T0Label_8.Text = 'T';
            % Create T 3
            app.T_3 = uieditfield(app.CarreauWLFTab, 'numeric');
            app.T_3.Position = [66 208 37 22];
            app.T_3.Value = 200;
            % Create aTEditFieldLabel_3
            app.aTEditFieldLabel_3 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
            app.aTEditFieldLabel_3.HorizontalAlignment = 'right';
            app.aTEditFieldLabel_3.Position = [19 80 25 22];
            app.aTEditFieldLabel_3.Text = 'aT';
            % Create aT 3
            app.aT 3 = uieditfield(app.CarreauWLFTab, 'text');
            app.aT_3.Editable = 'off';
            app.aT_3.Position = [59 80 44 22];
```

```
% Create T0Label_9
app.T0Label_9 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
app.T0Label_9.HorizontalAlignment = 'right';
app.T0Label_9.Position = [22 316 25 22];
app.T0Label_9.Text = 'C1';
```

% Create C1

```
app.C1 = uieditfield(app.CarreauWLFTab, 'numeric');
app.C1.Position = [62 316 53 22];
app.C1.Value = 10.72;
```

% Create T0Label_10

```
app.T0Label_10 = uilabel(app.CarreauWLFTab);
app.T0Label_10.HorizontalAlignment = 'right';
app.T0Label_10.Position = [22 286 25 22];
app.T0Label_10.Text = 'C2';
```

% Create C1_2

app.C1_2 = uieditfield(app.CarreauWLFTab, 'numeric'); app.C1_2.Position = [62 286 52 22]; app.C1_2.Value = 135.4;

% Create CareauYasudaArheniusTab

app.CareauYasudaArheniusTab = uitab(app.TabGroup); app.CareauYasudaArheniusTab.Title = 'Careau Yasuda Arhenius';

% Create Axes

```
app.Axes = uiaxes(app.CareauYasudaArheniusTab);
title(app.Axes, 'Title')
xlabel(app.Axes, 'X')
ylabel(app.Axes, 'Y')
zlabel(app.Axes, 'Z')
app.Axes.Position = [140 11 484 431];
```

% Create mEditFieldLabel

```
app.mEditFieldLabel = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
app.mEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
app.mEditFieldLabel.Position = [22 409 25 22];
app.mEditFieldLabel.Text = 'm';
```

% Create m

```
app.m = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab, 'numeric');
app.m.Position = [62 409 37 22];
app.m.Value = 0.33;
```

% Create EditFieldLabel

```
app.EditFieldLabel = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
app.EditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'center';
app.EditFieldLabel.VerticalAlignment = 'top';
app.EditFieldLabel.Position = [22 380 41 30];
app.EditFieldLabel.Text = {''; 'o0'};
```

% Create TaxaZero

```
app.TaxaZero = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab,
'numeric');
app.TaxaZero.Position = [62 380 53 21];
app.TaxaZero.Value = 3500;
```

```
% Create aEditEieldLabel
            app.aEditFieldLabel = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.aEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.aEditFieldLabel.Position = [22 347 25 22];
            app.aEditFieldLabel.Text = 'a';
            % Create a
            app.a = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab, 'numeric');
            app.a.Position = [62 347 37 22];
            app.a.Value = 0.97;
            % Create EditField 2Label
            app.EditField 2Label = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.EditField_2Label.HorizontalAlignment = 'right';
            app.EditField 2Label.Position = [22 316 25 22];
            app.EditField 2Label.Text = '\lambda';
            % Create TempRelax
            app.TempRelax = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab,
'numeric');
            app.TempRelax.Position = [62 316 37 22];
            app.TempRelax.Value = 0.11;
            % Create TaxaInf
            app.TaxaInf = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab,
'numeric');
            app.TaxaInf.Position = [62 287 53 21];
            % Create Label
            app.Label = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.Label.HorizontalAlignment = 'center';
            app.Label.VerticalAlignment = 'top';
            app.Label.Position = [22 287 41 30];
            app.Label.Text = {''; 'oco'};
            % Create RUN
            app.RUN = uibutton(app.CareauYasudaArheniusTab, 'push');
            app.RUN.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@RUNButtonPushed, true);
            app.RUN.FontWeight = 'bold';
            app.RUN.Position = [31 147 100 23];
            app.RUN.Text = 'RUN';
            % Create T0Label
            app.T0Label = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.T0Label.HorizontalAlignment = 'right';
            app.T0Label.Position = [22 257 25 22];
            app.T0Label.Text = 'T0';
            % Create Tref
            app.Tref = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab, 'numeric');
            app.Tref.Position = [62 257 37 22];
            app.Tref.Value = 260;
            % Create T0Label 2
            app.T0Label 2 = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.T0Label_2.HorizontalAlignment = 'right';
            app.T0Label_2.Position = [22 229 25 22];
            app.T0Label_2.Text = 'T';
```

```
% Create T
            app.T = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab, 'numeric');
            app.T.Position = [62 229 37 22];
            app.T.Value = 220;
            % Create aTEditFieldLabel
            app.aTEditFieldLabel = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.aTEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.aTEditFieldLabel.Position = [19 80 25 22];
            app.aTEditFieldLabel.Text = 'aT';
            % Create aT
            app.aT = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab, 'text');
            app.aT.Editable = 'off';
            app.aT.Position = [59 80 44 22];
            % Create T0Label 3
            app.T0Label 3 = uilabel(app.CareauYasudaArheniusTab);
            app.T0Label_3.HorizontalAlignment = 'right';
            app.T0Label 3.Position = [22 197 25 22];
            app.T0Label_3.Text = 'E/R';
            % Create ER
            app.ER = uieditfield(app.CareauYasudaArheniusTab, 'numeric');
            app.ER.Position = [62 197 37 22];
            app.ER.Value = 7500;
            % Create EntradaRoscasTab
            app.EntradaRoscasTab = uitab(app.TabGroup);
            app.EntradaRoscasTab.Title = 'Entrada Roscas';
            app.EntradaRoscasTab.ButtonDownFcn = createCallbackFcn(app,
@EntradaRoscasTabButtonDown, true);
            % Create UITable
            app.UITable = uitable(app.EntradaRoscasTab);
            app.UITable.ColumnName = {'Comprimento'; 'A1'; 'A2'; 'A3';
'Tipo'; 'Elem.'};
            app.UITable.RowName = {};
            app.UITable.ColumnEditable = [true true true true true false];
            app.UITable.Position = [31 29 576 362];
            % Create NmerodeElementosdaroscaLabel
            app.NmerodeElementosdaroscaLabel = uilabel(app.EntradaRoscasTab);
            app.NmerodeElementosdaroscaLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.NmerodeElementosdaroscaLabel.Position = [31 419 177 22];
            app.NmerodeElementosdaroscaLabel.Text = 'Número de Elementos da
rosca ';
            % Create NumElemRosca
            app.NumElemRosca = uieditfield(app.EntradaRoscasTab, 'numeric');
            app.NumElemRosca.Limits = [0 50];
            app.NumElemRosca.Position = [223 419 46 22];
            % Create GRAVARButton
            app.GRAVARButton = uibutton(app.EntradaRoscasTab, 'push');
            app.GRAVARButton.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@GRAVARButtonPushed, true);
```

app.GRAVARButton.Position = [507 419 100 23];

```
app.GRAVARButton.Text = 'GRAVAR';
            % Create MalhaTab
            app.MalhaTab = uitab(app.TabGroup);
            app.MalhaTab.Title = 'Malha';
            % Create NmerodeElementosEditFieldLabel
            app.NmerodeElementosEditFieldLabel = uilabel(app.MalhaTab);
            app.NmerodeElementosEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.NmerodeElementosEditFieldLabel.Position = [22 419 124 22];
            app.NmerodeElementosEditFieldLabel.Text = 'Número de Elementos';
            % Create MEFNUMEL
            app.MEFNUMEL = uieditfield(app.MalhaTab, 'numeric');
            app.MEFNUMEL.Position = [161 419 61 22];
            % Create ComprimentodaroscaEditFieldLabel
            app.ComprimentodaroscaEditFieldLabel = uilabel(app.MalhaTab);
            app.ComprimentodaroscaEditFieldLabel.HorizontalAlignment =
'right';
            app.ComprimentodaroscaEditFieldLabel.Position = [366 419 126 22];
            app.ComprimentodaroscaEditFieldLabel.Text = 'Comprimento da
rosca';
            % Create CompRosca
            app.CompRosca = uieditfield(app.MalhaTab, 'text');
            app.CompRosca.Editable = 'off';
            app.CompRosca.Position = [507 419 100 22];
            % Create CalcularButton
            app.CalcularButton = uibutton(app.MalhaTab, 'push');
            app.CalcularButton.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@CalcularButtonPushed, true);
            app.CalcularButton.Position = [82 384 100 23];
            app.CalcularButton.Text = 'Calcular';
            % Create ComprimentoElementoLabel
            app.ComprimentoElementoLabel = uilabel(app.MalhaTab);
            app.ComprimentoElementoLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.ComprimentoElementoLabel.Position = [361 388 131 22];
            app.ComprimentoElementoLabel.Text = 'Comprimento Elemento';
            % Create CompRosca 2
            app.CompRosca 2 = uieditfield(app.MalhaTab, 'text');
            app.CompRosca 2.Editable = 'off';
            app.CompRosca_2.Position = [507 388 100 22];
            % Create Table2
            app.Table2 = uitable(app.MalhaTab);
            app.Table2.ColumnName = {'Column 1'; 'Column 2'; 'Column 3';
'Column 4'};
            app.Table2.RowName = {};
            app.Table2.Position = [31 157 576 197];
            % Create kfkbkpeVmxTab
            app.kfkbkpeVmxTab = uitab(app.TabGroup);
            app.kfkbkpeVmxTab.Title = 'kf, kb, kp e Vmáx';
            % Create CalcularButton_2
```

```
196
```

```
app.CalcularButton_2 = uibutton(app.kfkbkpeVmxTab, 'push');
            app.CalcularButton 2.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@CalcularButton 2Pushed, true);
            app.CalcularButton_2.Position = [491 408 100 23];
            app.CalcularButton 2.Text = 'Calcular';
            % Create TableTAB4
            app.TableTAB4 = uitable(app.kfkbkpeVmxTab);
            app.TableTAB4.ColumnName = {'Column 1'; 'Column 2'; 'Column 3';
'Column 4'}:
            app.TableTAB4.RowName = {};
            app.TableTAB4.Position = [38 223 569 131];
            % Create DEditFieldLabel
            app.DEditFieldLabel = uilabel(app.kfkbkpeVmxTab);
            app.DEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.DEditFieldLabel.Position = [52 408 25 22];
            app.DEditFieldLabel.Text = 'D';
            % Create D
            app.D = uieditfield(app.kfkbkpeVmxTab, 'numeric');
            app.D.Position = [92 408 100 22];
            app.D.Value = 0.0122;
            % Create AfreeEditFieldLabel
            app.AfreeEditFieldLabel = uilabel(app.kfkbkpeVmxTab);
            app.AfreeEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.AfreeEditFieldLabel.Position = [43 368 34 22];
            app.AfreeEditFieldLabel.Text = 'Afree';
            % Create Afree
            app.Afree = uieditfield(app.kfkbkpeVmxTab, 'numeric');
            app.Afree.Position = [92 368 100 22];
            app.Afree.Value = 6.47e-05;
            % Create RotaoEditFieldLabel
            app.RotaoEditFieldLabel = uilabel(app.kfkbkpeVmxTab);
            app.RotaoEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.RotaoEditFieldLabel.Position = [228 408 50 22];
            app.RotaoEditFieldLabel.Text = 'Rotação';
            % Create Rotao
            app.Rotao = uieditfield(app.kfkbkpeVmxTab, 'numeric');
            app.Rotao.Position = [293 408 100 22];
            app.Rotao.Value = 80;
            % Create TABELAGLOBAL
            app.TABELAGLOBAL = uitable(app.kfkbkpeVmxTab);
            app.TABELAGLOBAL.ColumnName = {'Column 1'; 'Column 2'; 'Column
3'; 'Column 4'};
            app.TABELAGLOBAL.RowName = {};
            app.TABELAGLOBAL.Position = [38 29 569 169];
            % Create Tab
            app.Tab = uitab(app.TabGroup);
            app.Tab.Title = 'Tab';
            % Create UIAxes
            app.UIAxes = uiaxes(app.Tab);
```

```
title(app.UIAxes, 'Title')
            xlabel(app.UIAxes, 'X')
ylabel(app.UIAxes, 'Y')
zlabel(app.UIAxes, 'Z')
            app.UIAxes.Position = [22 21 602 185];
            % Create CalcularButton_3
            app.CalcularButton 3 = uibutton(app.Tab, 'push');
            app.CalcularButton 3.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@CalcularButton 3Pushed, true);
            app.CalcularButton 3.Position = [524 408 100 23];
            app.CalcularButton_3.Text = 'Calcular';
            % Create PressoBocalEditFieldLabel
            app.PressoBocalEditFieldLabel = uilabel(app.Tab);
            app.PressoBocalEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.PressoBocalEditFieldLabel.Position = [19 408 82 22];
            app.PressoBocalEditFieldLabel.Text = 'Pressão Bocal';
            % Create PressoBocalEditField
            app.PressoBocalEditField = uieditfield(app.Tab, 'numeric');
            app.PressoBocalEditField.Position = [116 408 100 22];
            app.PressoBocalEditField.Value = 3950000;
            % Create DensidadePolmeroEditFieldLabel
            app.DensidadePolmeroEditFieldLabel = uilabel(app.Tab);
            app.DensidadePolmeroEditFieldLabel.HorizontalAlignment = 'right';
            app.DensidadePolmeroEditFieldLabel.Position = [234 408 114 22];
            app.DensidadePolmeroEditFieldLabel.Text = 'Densidade Polímero';
            % Create DensidadePolmeroEditField
            app.DensidadePolmeroEditField = uieditfield(app.Tab, 'numeric');
            app.DensidadePolmeroEditField.Position = [363 408 100 22];
            app.DensidadePolmeroEditField.Value = 740;
            % Create UITable2
            app.UITable2 = uitable(app.Tab);
            app.UITable2.ColumnName = {'Column 1'; 'Column 2'; 'Column 3';
'Column 4'}:
            app.UITable2.RowName = {};
            app.UITable2.Position = [22 218 602 130];
            % Create MssicadeAlimentaoEditFieldLabel
            app.MssicadeAlimentaoEditFieldLabel = uilabel(app.Tab);
            app.MssicadeAlimentaoEditFieldLabel.HorizontalAlignment =
'right';
            app.MssicadeAlimentaoEditFieldLabel.Position = [22 367 134 22];
            app.MssicadeAlimentaoEditFieldLabel.Text = 'Mássica de
Alimentação';
            % Create MassicaAlimenta
            app.MassicaAlimenta = uieditfield(app.Tab, 'numeric');
            app.MassicaAlimenta.Position = [171 367 100 22];
            app.MassicaAlimenta.Value = 1.111111e-06;
            % Show the figure after all components are created
            app.ProgramaTesteUIFigure.Visible = 'on';
        end
    end
```

```
% App creation and deletion
    methods (Access = public)
        % Construct app
        function app = ProgramV23CORRETOSIMP
            % Create UIFigure and components
            createComponents(app)
            % Register the app with App Designer
            registerApp(app, app.ProgramaTesteUIFigure)
            if nargout == 0
                clear app
            end
        end
       % Code that executes before app deletion
        function delete(app)
            % Delete UIFigure when app is deleted
            delete(app.ProgramaTesteUIFigure)
        end
    end
end
```

APÊNDICE B

Perfil de temperaturas obtidas das simulações da Seção 4.1.4, para a configuração I de barril. Coordenadas de posição foram ajustadas para correspondência com as coordenadas do modelo HME-modificado. Esses valores são interpolados no modelo HME-modificado para representarem as temperaturas em cada posição dos elementos que constituem a malha 1D do modelo.

Posição(mm); Temp. (°C) -14.37625415:55.35697127 -14.31438122;55.35827736 -14.2525083;55.35965564 -14.19063537;55.36107001 -14.12876245:55.36254516 -14.06688952;55.3642615 -14.00501659:55.36607861 -13.94314367;55.36799682 -13.88127074;55.36994762 -13.81939782;55.37196828 -13.75752489;55.37405277 -13.69565197;55.37617588 -13.63377904;55.37839405 -13.57190612;55.38064348 -13.51003319;55.38297147 -13.44816026;55.38535458 -13.38628734;55.38778502 -13.32441441;55.39030182 -13.26254149;55.39293833 -13.20066856;55.39617158 -13.13879564;55.39940004 -13.07692271;55.40261836 -13.01504978;55.40582929 -12.95317686;55.40903266 -12.89130393;55.41222607 -12.82943101;55.4154145 -12.76755808;55.41860562 -12.70568516;55.42179572 -12.64381223:55.42497651 -12.58193931;55.42815249 -12.52006638:55.43132243 -12.45819345;55.4344843 -12.39632053;55.43764288 -12.3344476;55.44079113 -12.27257468:55.4439356 -12.21070175;55.44707299 -12.14882883:55.45020334 -12.0869559;55.45332989 -12.02508297:55.45644612 -11.96321005;55.45955907 -11.90133712:55.46266393 -11.8394642;55.46576742 -11.77759127;55.46886982 -11.71571835;55.47198441 -11.65384542;55.4751044 -11.5919725:55.47823901 -11.53009957;55.48137657 -11.46822664;55.48456839 -11.40635372;55.48776548 -11.34448079;55.49097238 -11.28260787;55.49418694 -11.22073494;55.49740729 -11.15886202;55.50063932 -11.09698909;55.50387537 -11.03511616;55.50712261 -10.97324324;55.51037613 -10.91137031;55.51363683 -10.84949739;55.51690782 -10.78762446;55.52018283 -10.72575154;55.52347042 -10.66387861;55.5267629 -10.60200569;55.53006394 -10.54013276:55.5333739 -10.47825983;55.53668838 -10.41638691:55.54004933 -10.35451398;55.54342003 -10.29264106;55.54679907

-10.23076813;55.55019024 -10.16889521:55.5536251 -10.10702228;55.55706286 -10.04514935:55.56051041 -9.983276429;55.56396246 -9.921403504:55.5674227 -9.859530578;55.57088906 -9.797657652:55.57436199 -9.735784727;55.57784264 -9.673911801;55.58132826 -9.612038875;55.58482322 -9.55016595;55.58832153 -9.488293024;55.59183078 -9.426420099;55.59534178 -9.364547173;55.59886533 -9.302674247;55.60239049 -9.240801322;55.60592688 -9.178928396;55.60946633 -9.11705547;55.61301541 -9.055182545;55.6164906 -8.993309619;55.61983397 -8.931436694;55.62333629 -8.869563768;55.62740219 -8.807690842;55.6314338 -8.745817917;55.63540793 -8.683944991;55.63933489 -8.622072065;55.64321723 -8.56019914;55.64703954 -8.498326214;55.65083011 -8.436453289:55.65454777 -8.374580363;55.65824656 -8.312707437:55.66185957 -8.250834512;55.66545972 -8.188961586;55.66897495

-2.558525354:56.03824152 -2.496652428;56.04270929 -2.434779503:56.0472291 -2.372906577;56.0517571 -2.311033651:56.05628994 -2.249160726;56.06082704 -2.1872878;56.06536665 -2.125414875;56.06991268 -2.063541949;56.07448071 -2.001669023;56.07908117 -1.939796098;56.08368363 -1.877923172;56.0882874 -1.816050246;56.09289383 -1.754177321;56.09750094 -1.692304395;56.10211131 -1.63043147:56.10672239 -1.568558544;56.11133607 -1.506685618:56.11595112 -1.444812693;56.12056811 -1.382939767;56.12518713 -1.321066841;56.12980742 -1.259193916:56.13443042 -1.19732099;56.13905501 -1.135448065;56.14372483 -1.073575139;56.1483962 -1.011702213;56.15307009 -0.949829288;56.15774696 -0.887956362;56.16242529 -0.826083436:56.16710729 -0.764210511;56.17179113 -0.702337585;56.17647718 -0.64046466;56.18119685 -0.578591734;56.18592433 -0.516718808;56.19065162 -0.454845883;56.19537886 -0.392972957:56.20010593 -0.331100031;56.20483292 -0.269227106;56.20955978 -0.20735418;56.21428652 -0.145481255;56.21901317 -0.083608329;56.22373966 -0.021735403;56.2284661 0.040137522;56.23319234 0.102010448;56.23792212 0.163883374;56.24267154

-5.342807007:55.84410986 -5.280934082;55.84820025 -5.219061156:55.85229331 -5.15718823;55.85638922 -5.095315305:55.86048936 -5.033442379:55.86463684 -4.971569453;55.8688132 -4.909696528;55.87299599 -4.847823602;55.87721303 -4.785950677:55.88145387 -4.724077751;55.88569918 -4.662204825;55.8899457 -4.6003319;55.89419762 -4.538458974;55.89845087 -4.476586048;55.90270834 -4.414713123:55.90696834 -4.352840197;55.91123134 -4.290967272:55.91549808 -4.229094346;55.91976663 -4.16722142;55.92404011 -4.105348495;55.9283148 -4.043475569:55.93259443 -3.981602643;55.93687586 -3.919729718;55.94116102 -3.857856792;55.9454492 -3.795983867;55.94973991 -3.734110941;55.95408084 -3.672238015;55.95843894 -3.61036509:55.96280288 -3.548492164;55.96717094 -3.486619238;55.97154194 -3.424746313;55.97597022 -3.362873387;55.98039968 -3.301000461;55.98483305 -3.239127536;55.98926847 -3.17725461:55.99370675 -3.115381685;55.99814811 -3.053508759;56.0025913 -2.991635833;56.00703862 -2.929762908;56.01148697 -2.867889982;56.01593999 -2.806017056;56.02039429 -2.744144131;56.02485223 -2.682271205;56.02931247 -2.62039828;56.03377532

-8.12708866:55.67247044 -8.065215735;55.67589389 -8.003342809:55.67928474-7.941469884;55.68261641 -7.879596958:55.68590261 -7.817724032;55.6891425 -7.755851107;55.69232405 -7.693978181;55.69547217 -7.632105255;55.69862045 -7.57023233;55.70183209 -7.508359404;55.70511481 -7.446486479;55.70844004 -7.384613553;55.71186599 -7.322740627;55.71532158 -7.260867702;55.718874 -7.198994776:55.72247283 -7.13712185;55.72613884 -7.075248925:55.7298809 -7.013375999;55.7336605 -6.951503073;55.7375458 -6.889630148;55.74146074 -6.827757222:55.74546752 -6.765884297;55.7495257 -6.704011371;55.75364608 -6.642138445;55.75784748 -6.58026552;55.76208146 -6.518392594;55.7664261 -6.456519668;55.77080038 -6.394646743:55.77526154 -6.332773817;55.77935537 -6.270900892;55.78313523 -6.209027966;55.78717886 -6.14715504;55.79122442 -6.085282115;55.79527389 -6.023409189;55.79932616 -5.961536263:55.80338147 -5.899663338;55.80744045 -5.837790412;55.81150161 -5.775917487;55.8155673 -5.714044561;55.81963431 -5.652171635;55.8237067 -5.59029871;55.82777996 -5.528425784;55.83185867 -5.466552858;55.83593863 -5.404679933;55.84002318 3.010037952:56.45448419 3.071910878;56.45876088 3.133783804:56.46302173 3.195656729;56.46727543 3.257529655:56.47150837 3.319402581:56.47573303 3.381275506;56.47994409 3.443148432;56.48413972 3.505021357;56.48829757 3.566894283;56.49151006 3.628767209:56.49468506 3.690640134;56.49766433 3.75251306;56.50057608 3.814385986;56.50332213 3.876258911;56.50597064 3.938131837:56.50848346 4.000004762;56.51164415 4.000033729:56.61121585 4.42143817;56.61121585 4.842842612;56.61121585 5.264247053;56.62557902 5.685651495:56.6422386 6.107055936;56.65889819 6.528460378;56.68562077 6.949864819;56.72074699 7.371269261;56.7558732 7.792673702;56.79180911 8.214078144;56.83049126 8.635482585:56.86917341 9.056887027;56.90785556 9.478291468;56.94978838 9.89969591;56.99204084 10.32110035:57.0342933 10.74250479;57.07882105 11.16390923:57.12490884 11.58531368:57.17099663 12.00671812;57.21827734 12.42812256;57.26868703 12.849527;57.31909672 13.27093144;57.36950641 13.69233588;57.42472286 14.11374033;57.48014591 14.53514477;57.53556896 14.95654921;57.59478212 15.37795365;57.65611277

0.225756299:56.24742011 0.287629225;56.25216779 0.34950215:56.25691401 0.411375076;56.26165963 0.473248002:56.26640382 0.535120927;56.2711471 0.596993853:56.27588955 0.658866779:56.28063049 0.720739704;56.28537432 0.78261263;56.29012932 0.844485556;56.29488128 0.906358481;56.2996286 0.968231407:56.30437152 1.030104332;56.30911116 1.091977258;56.31384503 1.153850184:56.31857699 1.215723109;56.32330182 1.277596035:56.32802528 1.339468961;56.33274188 1.401341886:56.33744883 1.463214812;56.34213148 1.525087737:56.34680331 1.586960663;56.35146846 1.648833589;56.35611695 1.710706514;56.36075958 1.77257944;56.36538975 1.834452366;56.37000904 1.896325291;56.37462171 1.958198217:56.37921766 2.020071142;56.38380776 2.081944068;56.38838545 2.143816994;56.39292452 2.205689919;56.39744043 2.267562845;56.40193137 2.329435771;56.40641541 2.391308696:56.41086944 2.453181622;56.41531843 2.515054547;56.41973871 2.576927473:56.42415078 2.638800399;56.42853918 2.700673324;56.43290843 2.76254625;56.43725075 2.824419176;56.44157683 2.886292101;56.44589574 2.948165027;56.45019431

15.79935809:57.71744343 16.22076253;57.78104268 16.64216697:57.84936789 17.06357142;57.91769311 17.48497586:57.98607664 17.9063803;58.06260474 18.32778474;58.13913284 18.74918918:58.21566094 19.17059362;58.29859943 19.59199806:58.38441956 20.01340251;58.47023968 20.43480695;58.55965367 20.85621139:58.65511774 21.27761583;58.75058182 21.69902027;58.84649291 22.12042471:58.95002182 22.54182916:59.05355072 22.9632336:59.15707963 23.38463804;59.25086066 23.80604248;59.34118463 24.22744692;59.4315086 24.64885136:59.49934608 25.0702558;68.74999306 25.49166025;71.03207668 25.91306469;73.59889334 26.33446913;78.62552992 26.75587357;83.65216649 27.17727801;88.67880306 27.59868245:93.98621702 28.0200869;99.36984176 28.44149134;104.7534665 28.86289578;110.0231671 29.28430022;115.1640333 29.70570466;120.3048995 30.1271091:125.3987503 30.54851354:130.2304315 30.96991799;135.0621126 31.39132243;139.8937938 31.81272687:144.4255401 32.23413131;148.8979469 32.65553575;153.3703537 33.07694019;157.6531543 33.49834463;161.7592485 33.91974908;165.8653426 34.34115352;169.373436

34.76255796:170.4954302 35.1839624;176.4458702 35.60536684:176.4665557 36.02677128;176.5490358 36.44817573:176.6396918 36.86958017;176.7303478 37.29098461;176.8297401 37.71238905;176.9358334 38.13379349;177.0419266 38.55519793;177.1514559 38.97660237;177.2713653 39.39800682;177.3912747 39.81941126;177.5111841 40.2408157;177.641756 40.66222014;177.7731123 41.08362458:177.9044686 41.50502902;178.0415902 41.92643347:178.1823327 42.34783791;178.3230752 42.76924235;178.466116 43.19064679;178.6145967 43.61205123:178.7630774 44.03345567;178.911558 44.45486011;179.0663522 44.87626456;179.2212766 45.297669;179.376201 45.71907344;179.5347178 46.14047788;179.6950642 46.56188232:179.8554106 46.98328676;180.0173529 47.40469121;180.1823203 47.82609565;180.3472877 48.24750009;180.5123679 48.66890453;180.6813474 49.09030897;180.850327 49.51171341:181.0193065 49.93311785;181.1908055 50.3545223;181.3633292 50.77592674;181.5358529 51.19733118;181.7096302 51.61873562;181.8853385 52.04014006;182.0610467 52.4615445;182.2369778 52.88294894;182.4156019

53.30435339;182.594226

53.72575783:182.7728501 54.14716227;182.9535312 54.56856671:183.1348647 54.98997115;183.3161982 55.41137559:183.4986633 55.83278004;183.682557 56.25418448;183.8664508 56.67558892;184.05065 57.09699336:184.2369927 57.5183978;184.4233353 57.93980224;184.609678 58.36120668;184.7979354 58.78261113;184.9866494 59.20401557;185.1753633 59.62542001;185.3652102 60.04682445:185.5562351 60.46822889;185.74726 60.88963333:185.9386774 61.31103778;186.1319703 61.73244222;186.3252633 62.15384666;186.5185562 62.5752511:186.7137657 62.99665554;186.9092981 63.41805998;187.1048305 63.83946442;187.301557 64.26086887;187.4993064 64.68227331;187.6970558 65.10367775;187.8952944 65.52508219:188.0952537 65.94648663;188.295213 66.36789107;188.4951723 66.78929552;188.6971269 67.21069996;188.8992931 67.6321044;189.1014593 68.05350884;189.3049171 68.47491328:189.509284 68.89631772;189.7136509 69.31772216;189.9186122 69.73912661:190.125183 70.16053105;190.3317538 70.58193549;190.5383246 71.00333993;190.7470024 71.42474437;190.9557853 71.84614881;191.1645683 72.26755325;191.3747578

72.6889577:191.5857551 73.11036214;191.7967523 73.53176658:192.008455 73.95317102;192.2216707 74.37457546:192.4348863 74.7959799;192.6481038 75.21738435;192.8635462 75.63878879;193.0789887 76.06019323;193.2944311 76.48159767;193.5113958 76.90300211;193.7290652 77.32440655;193.9467346 77.74581099;194.1652179 78.16721544;194.3851093 78.58861988;194.6050006 79.01002432:194.8250004 79.43142876;195.0471006 79.8528332:195.2692008 80.27423764;195.491301 80.69564209;195.7150023 81.11704653;195.9392901 81.53845097:196.1635779 81.95985541;196.3887602 82.38125985;196.6152052 82.80266429;196.8416501 83.22406873;197.0683002 83.64547318;197.2968504 84.06687762;197.5254007 84.48828206:197.7539509 84.9096865;197.9840888 85.33109094;198.214674 85.75249538;198.4452591 86.17389983;198.6767448 86.59530427;198.9092752 87.01670871;199.1418055 87.43811315:199.3746016 87.85951759;199.6089557 88.28092203;199.8433097 88.70232647;200.0776637 89.12373092;200.313401 89.54513536:200.5494245 89.9665398;200.785448 90.38794424;201.0222263 90.80934868;201.2597261 91.23075312;201.4972259 91.65215756:201.7349685 92.07356201;201.9737196 92.49496645:202.2124708 92.91637089:202.4512219 93.33777533:202.6908356 93.75917977;202.9305705 94.18058421;203.1703053 94.60198866:203.4104128 95.0233931;203.6508137 95.44479754;203.8912145 95.86620198;204.1316876 96.28760642;204.3723863 96.70901086;204.613085 97.1304153;204.8537838 97.55181975;205.0943918 97.97322419:205.3349924 98.39462863:205.575593 98.81603307:205.8158526 99.23743751;206.055892 99.65884195:206.2959315 100.0802464;206.5356595 100.5016508:206.7746274 100.9230553;207.0135952 101.3444597:207.2525631 101.7658642;207.4899617 102.1872686;207.7273175 102.608673;207.9646733 103.0300775;208.2006016 103.4514819:208.435782 103.8728864;208.6709624 104.2942908;208.9051986 104.7156953;209.137594 105.1370997;209.3699894 105.5585041;209.6023105 105.9799086:209.8312971 106.401313:210.0602838 106.8227175;210.2892705 107.2441219;210.5154194 107.6655263:210.7403783 108.0869308;210.9653372 108.5083352;211.1884913 108.9297397;211.4087905 109.3511441;211.6290896 109.7725486;211.8490185 110.193953;212.0640357

110.6153574:212.2790528 111.0367619;212.49407 111.4581663:212.7046448 111.8795708;212.9137615 112.3009752:213.1228782 112.7223796;213.3291656 113.1437841;213.5317878 113.5651885;213.73441 113.986593:213.9362005 114.4079974;214.1317989 114.8294018;214.3273973 115.2508063;214.5229956 115.6722107;214.7125803 116.0936152;214.9006726 116.5150196;215.088765 116.9364241:215.2730159 117.3578285;215.4531708 117.7792329:215.6333258 118.2006374;215.8120999 118.6220418;215.9839733 119.0434463;216.1558466 119.4648507:216.32772 119.8862551;216.4923401 120.3076596;216.6556754 120.729064;216.8190106 121.1504685;216.9777351 121.5718729;217.1324081 121.9932774;217.287081 122.4146818:217.4398928 122.8360862;217.5859109 123.2574907;217.731929 123.6788951;217.8779471 124.1002996;218.016453 124.521704;218.154104 124.9431084;218.2917551 125.3645129:218.4250195 125.7859173;218.5551152 126.2073218;218.6852109 126.6287262:218.8138616 127.0501307;218.9384709 127.4715351;219.0630802 127.8929395;219.1876894 128.314344;219.3647151 128.7357484;219.5447246 129.1571529;219.724734

129.5785573:219.8335792 129.9999617;219.9004345 130:219.9004406 130.0584184;219.9116069 130.1168369:219.9241698 130.1752553;219.9370166 130.2336737;219.9503622 130.2920921;219.9639617 130.3505106;219.9778664 130.408929;219.9922485 130.4673474;220.0068845 130.5257658;220.0218471 130.5841843;220.0372657 130.6426027;220.0529382 130.7010211;220.0689587 130.7594396:220.0771938 130.817858;220.0851752 130.8762764:220.0979217 130.9346948;220.1194555 130.9931133;220.1458282 131.0515317;220.1708513 131.1099501:220.1951684 131.1683685;220.2187484 131.226787;220.2410099 131.2852054;220.262659 131.3436238;220.2833527 131.4020423;220.3029462 131.4604607;220.3219273 131.5188791:220.3397348 131.5772975;220.3566603 131.635716;220.3729733 131.6941344;220.3878946 131.7525528;220.4021521 131.8109712;220.4156302 131.8693897;220.4217264 131.9278081:220.426937 131.9862265;220.4322419 132.044645;220.437641 132.1030634;220.4431476 132.1614818;220.4495329 132.2199002;220.4559629 132.2783187;220.4622829 132.3367371;220.4684634 132.3951555;220.4745651 132.4535739;220.4805439

135.1408216:220.6145811 135.19924;220.6146536 135.2576585:220.6146872 135.3160769;220.6146651 135.3744953:220.6145884 135.4329137;220.6144727 135.4913322;220.614308 135.5497506;220.6138464 135.608169;220.6133162 135.6665874;220.6127455 135.7250059;220.6121258 135.7834243;220.6114774 135.8418427;220.6107848 135.9002612;220.6100466 135.9586796;220.6092797 136.017098:220.6084652 136.0755164;220.6076086 136.1339349:220.6067233 136.1923533;220.6057869 136.2507717;220.6048119 136.3091901;220.6038291 136.3676086:220.6029695 136.426027;220.6020499 136.4844454;220.6005463 136.5428638;220.5990277 136.6012823;220.5974956 136.6597007;220.5959363 136.7181191;220.594365 136.7765376:220.5927759 136.834956;220.5911639 136.8933744;220.5895399 136.9517928;220.5878938 137.0102113;220.5862291 137.0686297;220.5845524 137.1270481;220.5828493 137.1854665:220.5811319 137.243885;220.5794003 137.3023034;220.5776423 137.3607218:220.576204 137.4191403;220.5753697 137.4775587;220.5745421 137.5359771;220.5737181 137.5943955;220.5729003 137.652814;220.5720884 137.7112324;220.5710039

132.5119924:220.4863962 132.5704108;220.4921696 132.6288292:220.4978072 132.6872477;220.5033311 132.7456661:220.5088298 132.8040845;220.5145437 132.8625029;220.5201982 132.9209214;220.5257891 132.9793398:220.5312769 133.0377582;220.5367212 133.0961766;220.5420659 133.1545951;220.5473435 133.2130135:220.5525653 133.2714319;220.5576762 133.3298504;220.5627435 133.3882688:220.5677192 133.4466872;220.5726198 133.5051056:220.5774724 133.5635241;220.581257 133.6219425;220.5848409 133.6803609;220.587767 133.7387793:220.5897183 133.7971978;220.5916028 133.8556162;220.5934477 133.9140346;220.595252 133.9724531;220.5969839 134.0308715:220.5986743 134.0892899;220.6003274 134.1477083:220.6019078 134.2061268;220.6034591 134.2645452;220.6049456 134.3229636;220.6063851 134.381382;220.6077887 134.4398005;220.6091162 134.4982189;220.6104147 134.5566373:220.6116524 134.6150558;220.6123228 134.6734742;220.6126366 134.7318926;220.6129399 134.790311;220.6132323 134.8487295;220.6135166 134.9071479;220.6137928 134.9655663;220.614056 135.0239847:220.6142778 135.0824032;220.6144606 137.7696508:220.5686406 137.8280692;220.5673951 137.8864877:220.5663017 137.9449061;220.5652359 138.0053742:220.5646297 138.0998084;220.5632663 138.1942426;220.5619029 138.2886769;220.5605395 138.3831111;220.5591762 138.4775453;220.5578129 138.5719795;220.5564496 138.6664137;220.5550864 138.7608479;220.5537232 138.8552821;220.5523601 138.9497163;220.550997 139.0441505:220.549634 139.1385847;220.5473847 139.2330189:220.5439186 139.3274531;220.5404525 139.4218874;220.5369864 139.5163216;220.5335203 139.6107558:220.5300542 139.70519;220.5265881 139.7996242;220.523122 139.8940584;220.5196559 139.9884926;220.5161897 140.0829268;220.5127236 140.177361;220.5092575 140.2717952:220.5057914 140.3662294;220.5023253 140.4606636;220.4988592 140.5550979;220.4955179 140.6495321;220.4929152 140.7439663;220.4919633 140.8384005:220.4910115 140.9328347:220.4900596 141.0193114;220.4601029 141.086188;220.4598386 141.1530647;220.4595605 141.2199413;220.4592708 141.2868179;220.4589703 141.3536946;220.4587112 141.4205712;220.4585443 141.4874479;220.4583795

141.5767098;220.4581825

141.671144:220.4580352 141.7655783;220.4578878 141.8600125:220.4577405 141.9544467;220.4569342 142.0488809:220.4557474 142.1433151;220.4545605 142.2377494;220.4533737 142.3321836;220.4521869 142.4266178;220.4510001 142.521052;220.4498133 142.6154862;220.4486264 142.7099205;220.4474396 142.8043547;220.4462528 142.8987889;220.445066 142.9932231;220.4438791 143.0876573:220.4426923 143.1820916;220.4415055 143.2765258:220.4403187 143.37096;220.4383398 143.4653942;220.4362 143.5598284;220.4340603 143.6542627:220.4319205 143.7486969;220.4297807 143.8431311;220.4276409 143.9375653;220.4255012 144.0319995;220.4233614 144.1264338;220.4212216 144.220868;220.4190818 144.3153022:220.4169421 144.4097364;220.4148023 144.5041707;220.4126625 144.5986049;220.4105228 144.6930391;220.4083368 144.7874733;220.4045643 144.8819075:220.4007917 144.9763418:220.3970192 145.070776;220.3932466 145.1652102;220.3894741 145.2596444;220.3857015 145.3540786;220.381929 145.4485129;220.3781564

145.5429471:220.3743839 145.6373813;220.3706113 145.7318155:220.3668388 145.8262497;220.3630662 145.920684:220.3592937 146.0151182;220.3555212 146.1095524;220.3509389 146.2039866;220.3435746 146.2984208;220.3362103 146.3928551;220.328846 146.4872893;220.3214817 146.5817235;220.3141174 146.6761577;220.3067531 146.7705919;220.2993888 146.8650262;220.2920245 146.9594604:220.2846602 147.0538946;220.2772959 147.1483288:220.2699316 147.242763;220.2625673 147.3371973;220.255203 147.4316315;220.2478387 147.5260657:220.240415 147.6204999;220.2329101 147.7149341;220.2254052 147.8093684;220.2179003 147.9038026;220.2103954 147.9982368;220.2028906 148.092671;220.1953857 148.1871052:220.1878808 148.2815395;220.1803759 148.3759737;220.172871 148.4704079;220.1653661 148.5648421;220.1578613 148.6592763;220.1503564 148.7537106;220.1428515 148.8481448:220.1353466 148.942579;220.1295497 149.0370132;220.1248006 149.1314474;220.1200516 149.2258817;220.1153025 149.3203159;220.1105534 149.4147501:220.1058043 149.5091843;220.1010553 149.6036185:220.0963062 149.6980528;220.0915571 149.792487:220.0868081 149.8869212;220.082059 149.9813554;220.0773099 150.0757896;220.0725609 150.1702239;220.0678118 150.2646581;220.0630627 150.3590923;220.0607353 150.4535265;220.0589505 150.5413212;220.0569796 150.6230885;220.0553831 150.7048558;220.0538023 150.7866231:220.0522306 150.8683903;220.0506674 150.9501576:220.0491193 151.0319249;220.0475809 151.1136922;220.046051 151.1954595;220.0445351 151.2772268:220.0430303 151.3589941;220.0415346 151.4407614;220.0400499 151.5225287;220.0385789 151.604296;220.0371172 151.6860633;220.0355917 151.7767894;220.0336796 151.8712236:220.0330994 151.9656578;220.0325191 152.060092;220.0319388 152.1545262;220.0313585 152.2489605;220.0307783 152.3433947;220.030198 152.4378289:220.0296177 152.5322631:220.0290374 152.6266973;220.0284572 152.7211316;220.0278769 152.8155658:220.0272966 152.91;220.02671