



EDIMILSON DA SILVA ZAMBALDI

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE COMPÓSITOS POLIMÉRICOS
DE POLI(ÁCIDO LÁTICO) REFORÇADO COM CELULOSE
NANOFIBRILADA PARA APLICAÇÕES INDUSTRIAIS**

LAVRAS – MG

2020

EDIMILSON DA SILVA ZAMBALDI

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE COMPÓSITOS POLIMÉRICOS DE POLI(ÁCIDO
LÁTICO) REFORÇADO COM CELULOSE NANOFIBRILADA PARA
APLICAÇÕES INDUSTRIAIS**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Engenharia de Biomateriais, área de concentração em Compósitos e nanocompósitos lignocelulósicos, para a obtenção do título de Doutor.

Orientador

Prof. Dr. Gustavo Henrique Denzin Tonoli

Co-orientador

Prof. Dr. Ricardo Rodrigues Magalhães

LAVRAS – MG

2020

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Zambaldi, Edimilson da Silva.

Simulação numérica de compósitos poliméricos de poli(ácido
lático) reforçado com celulose nanofibrilada para aplicações
industriais. / Edimilson da Silva Zambaldi. - 2020.

109 p. : il.

Orientador(a): Gustavo Henrique Denzin Tonoli.

Coorientador(a): Ricardo Rodrigues Magalhães.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2020.

Bibliografia.

1. Biopolímero. 2. Celulose nanofibrilada. 3. Análise por
elementos finitos. I. Tonoli, Gustavo Henrique Denzin. II.
Magalhães, Ricardo Rodrigues. III. Título.

EDIMILSON DA SILVA ZAMBALDI

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE COMPÓSITOS POLIMÉRICOS DE POLI(ÁCIDO LÁTICO) REFORÇADO COM CELULOSE NANOFIBRILADA PARA APLICAÇÕES INDUSTRIAIS

NUMERICAL SIMULATION OF POLYMERIC COMPOSITES OF POLY(LACTIC ACID) REINFORCED WITH NANOFIBRILLATED CELLULOSE FOR INDUSTRIAL APPLICATIONS

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Engenharia de Biomateriais, área de concentração em Compósitos e nanocompósitos lignocelulósicos, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 18 de setembro de 2020.

Dr. Leonardo Sant'Ana Gallo
Dr. Mario Guimarães Junior
Dra. Lina Bufalino

UFLA
CEFET/MG
UFRA

Prof. Dr. Gustavo Henrique Denzin Tonoli
Orientador

Prof. Dr. Ricardo Rodrigues Magalhães
Co-orientador

LAVRAS – MG

2020

Aos meus pais
Dilson e Maria,
à minha irmã
Edneusa
à minha querida esposa
Fernanda
e aos meus filhos
Angelo, Luigi e Enzo

DEDICO

AGRADECIMENTOS

Ao Deus do meu coração e do meu entendimento, o Grande Arquiteto do Universo, agradeço a oportunidade de viver e de evoluir, tanto no intelecto como espiritualmente e por ter colocado na minha vida tantas pessoas boas e generosas.

À minha família, por me dar uma base sólida. Em especial à minha esposa Fernanda, por nos permitir alcançar grandes conquistas. Tenho consciência de que sem o seu apoio o caminho teria sido muito mais difícil. Aos meus pais por sempre serem um exemplo de que nunca é tarde para estudar!

Agradeço aos Professores Rafael Farinassi Mendes e Lourival Marin Mendes pelo apoio, dedicação, amizade e confiança depositada ao longo deste projeto. Em especial, agradeço aos professores Ricardo Rodrigues Magalhães e Gustavo H. D. Tonoli, pois sem as suas respectivas participações e preciosos conselhos nada disso seria possível.

À universidade de Trento (UNITN) pelo apoio e em disponibilizar toda a estrutura necessária para o desenvolvimento de parte deste projeto. Assim como, aos professores que se disponibilizaram a participar da banca de defesa.

Agradeço Matheus Cordazzo pelas imagens do MEV, Kelen Reis pela ideia inicial para o projeto e à empresa Academia das palavras, em especial Renata Hetmanek dos Santos pela revisão do artigo em inglês.

Agradeço ao Grupo Girardini, SolidPower e BM Group (Polytec) por terem disponibilizado os recursos da empresa e tempo, com o apoio técnico necessário.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro inicial que possibilitou a estruturação deste trabalho.

À Universidade Federal de Lavras (UFLA), através do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Biomateriais, bem como a todos os professores, colegas e funcionários, por me darem a oportunidade de realizar este trabalho e de aprimorar meus conhecimentos técnicos.

Enfim, agradeço a todos aqueles que colaboraram de alguma forma para o cumprimento desta etapa da minha vida.

Muito obrigado!

Esta tese, esta minúscula contribuição ao conhecimento humano, é também um ato de resistência contra o atual Estado fascista, negacionista, sectário e retrógrado, de quem acredita que o conhecimento é uma ponte para a libertação e estudar, uma grande ação revolucionária.

Autor

"O mistério é a coisa mais nobre de que podemos ter experiência. É a emoção que se encontra no cerne da verdadeira ciência. Aquele que não sente essa emoção e que não pode mais se maravilhar nem se espantar, é como se já estivesse morto. Saber que aquilo que é impenetrável para nós verdadeiramente existe e se manifesta como a mais alta sabedoria e a mais radiosa beleza, que nossas limitadas faculdades só podem apreender em suas formas mais primitivas, esse conhecimento, esse sentimento, está no centro de toda verdadeira devoção. A experiência cósmica é com efeito o mais poderoso e mais nobre pivô da pesquisa científica."

Albert Einstein

RESUMO

A simulação numérica para esforços de tensão é uma importante ferramenta utilizada para avaliar o comportamento e prever possíveis falhas e rupturas de componentes mecânicos durante a sua aplicação. Esta utiliza as propriedades mecânicas do material e com base nas forças atuantes e condições de contorno, em um modelo matemático discretizado da peça, apresenta as respostas do material em termos de absorção dos esforços, em tensões e deformações. A utilização de celulose nanofibrilada como reforço em matrizes poliméricas tem recebido destaque nos últimos anos em trabalhos de pesquisa, dando origem a compósitos cujas propriedades podem ser potencializadas e modificadas de acordo com as suas aplicações. Com base nisso, este trabalho apresenta o uso de simulações numéricas como ferramenta para avaliar e remodelar componentes mecânicos construídos a partir de um compósito biodegradável, de matriz renovável e reciclável, constituído por celulose nanofibrilada (NFC) como reforço em uma matriz de poli(ácido láctico) (PLA). Uma característica importante para uma maior versatilidade em aplicações industriais, como componente mecânico submetido a esforços, os compósitos devem apresentar um bom equilíbrio entre módulo de elasticidade e deformação plástica. Para isso, foram produzidos corpos de prova de PLA usando concentrações de reforço de NFC de 30%, 40% e 50% em peso e com o uso de glicerol como plastificante, na proporção de 4% e 6% do peso total incluindo uma amostra pura de PLA para comparação. Os resultados dos ensaios de tração indicaram o aumento da deformação plástica sem uma perda significativa no módulo de elasticidade e conseqüentemente uma melhoria na tenacidade do material, confirmada pelo teste de impacto Izod. Portanto, simulações numéricas foram realizadas via análise por elementos finitos (FEA) para comparar os resultados das simulações dos corpos de prova com os resultados dos ensaios físicos de tração e como meio para avaliar e remodelar um componente mecânico, construído com o compósito escolhido, para substituir o atual componente produzido em liga de alumínio 1060 H12 em uma ferramenta conectada a um robô, em um caso de estudo e aplicação na indústria. Como resultado, obteve-se um novo modelo para o componente e a viabilidade no uso do compósito como material substitutivo apresentando vantagens como menor peso e rigidez dielétrica, importantes para a aplicação estudada.

Palavras-chave: Biopolímero. Celulose nanofibrilada. Poli(ácido láctico). Análise por elementos finitos.

ABSTRACT

The numerical simulation for stress efforts is an important tool to evaluate the behavior and to predict possible failures and ruptures of mechanical components during its application. It uses the mechanical properties of the material and based on the acting forces and boundary conditions, in a discrete mathematical model of the part, it presents the material's responses in terms of effort absorption, stresses and deformations. The use of nanofibrillated cellulose as a reinforcement in polymeric matrices has been highlighted in recent years in research works, giving rise to composites whose properties can be enhanced and modified according to their applications. Based on this, this work presents the use of numerical simulations as a tool to evaluate and remodel mechanical components constructed from a biodegradable composite, of renewable and recyclable matrix, consisting of nanofibrillated cellulose (NFC), as reinforcement in a matrix of poly(lactic acid) (PLA). An important characteristic for greater versatility in industrial applications, as a mechanical component subjected to efforts, composites must present a good balance between modulus of elasticity and plastic deformation. For this, PLA specimens were produced using NFC as reinforcement by concentrations of 30%, 40% and 50% by weight and with the use of glycerol as a plasticizer, in the proportion of 4% and 6% of the total weight, including a pure PLA sample for comparison. The results of the tensile tests indicated an increase in the plastic deformation without a significant loss in the modulus of elasticity and, consequently, an improvement in the toughness of the material, confirmed by the Izod impact test. Therefore, numerical simulations were carried out via finite element analysis (FEA) to compare the results of the specimen simulations with the results of the physical tensile tests and as a means to evaluate and remodel a mechanical component, constructed with the chosen composite, for replace the current component produced in aluminum alloy 1060 H12 in a tool connected to a robot, in a case study and application in the industry. As a result, a new model was obtained for the component and the technical feasibility in using the composite as a substitute material, presenting advantages such as lower weight and dielectric strength, which are important for the studied application.

Keywords: Biopolymers. Nanofibrillated cellulose. Poly(Lactic Acid). Finite element analysis.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação esquemática molecular do PLA	18
Figura 2 – Representação da estrutura química PLLA, meso-PLA e PDLA	19
Figura 3 – Estrutura de uma fibra vegetal.	22
Figura 4 – Representação de elementos e as suas aplicações na FEA.	32
Figura 5 – Representação das tensões nos planos	33
Figura 6 – Representação dos limites de escoamento para os critérios de Tresca e von Mises	34
Figura 7 – Sequência para o processo de FEA	36
Figura 8 – Diferença entre as curvas verdadeira ou real e de engenharia	37
Figura 9 – Curvas típicas para materiais dúcteis e frágeis	38
Figura 10 – Fluxograma da obtenção das NFCs.	41
Figura 11 – Fluxograma da obtenção dos corpos de prova.	44
Figura 12 – Tela utilizada para o inserimento da curva tensão-deformação no <i>software</i> comercial. Curva do compósito PLANFC40/6.	46
Figura 13 – Tela utilizada para o inserimento das propriedades do material. Propriedades do compósito PLANFC40/6.	46
Figura 14 – Opções sequenciais de pré-processamento.	48
Figura 15 – Condições de contorno do modelo matemático com malha tetraédrica.	49
Figura 16 – Opções de refinamento da malha tetraédrica no SolidWorks.	50
Figura 17 – Estrutura das malhas hexaédricas e tetraédricas.	51
Figura 18 – Visão geral da ferramenta do robô para a soldagem de pinos com as etiquetas.	54
Figura 19 – Fluxograma simplificado de cálculo para a análise de tensões de von Mises com a FEA no estudo de caso apresentado.	55
Figura 20 – Curvas tensão-deformação dos ensaios de tração dos compósitos produzidos.	59
Figura 21 – Valores obtidos durante convergência de malha do corpo de prova de tração em função da distância entre nós dos vértices.	60
Figura 22 – Valores obtidos durante convergência de malha do corpo de prova de tração em função da quantidade de nós.	61
Figura 23 – Distribuição das tensões de von Mises na simulação para o corpo de prova PLANFC40/6.	62
Figura 24 – Imagem da ruptura de um corpo de prova do compósito PLANFC40/6 durante o ensaio de tração.	62
Figura 25 – Diferença entre a deformação elástica linear e a não linear.	63
Figura 26 – Valor médio da tensão em 80% do LOP dos ensaios físicos (Real) e desvios destes valores obtidos nas simulações utilizando elementos tetraédricos (FEA(T)) e elementos hexaédricos (FEA(H)).	63

Figura 27 – Ferramenta do robô com o sistema de garras.....	66
Figura 28 – Modelo sólido do componente na posição frontal, com os alojamentos para parafusos M6 de cabeça cilíndrica.	67
Figura 29 – Modelo sólido na posição frontal com a aplicação das áreas fixas nos apoios dos parafusos de cabeça cilíndrica.	68
Figura 30 – Modelo sólido na posição traseira com a aplicação da força correspondente à reação de abertura das garras.	68
Figura 31 – Modelo sólido com malha tetraédrica de segunda ordem com 1,5 mm de distância entre nós dos vértices.....	69
Figura 32 – Valores obtidos na convergência da malha em função da distância entre nós dos vértices.....	69
Figura 33 – Valores obtidos na simulação com a liga de alumínio 1060 H12 utilizando malha tetraédrica de segunda ordem, com distância entre nós dos vértices de 1,5 mm.	70
Figura 34 – Valores obtidos na simulação com o compósito PLANFC40/6 utilizando malha tetraédrica e 1,5 mm de distância entre nós dos vértices (parafusos de cabeça cilíndrica).....	71
Figura 35 – Malha tetraédrica com refinamento nos rebaixos dos parafusos e indicação da distância entre nós dos vértices em cada zona.	72
Figura 36 – Vista ortogonal frontal do componente com a vista em seção (A-A) no rebaixo para um dos parafusos de cabeça cilíndrica.....	73
Figura 37 – Parafusos M6 com cabeça cilíndrica e escareada, com sextavado interno.	74
Figura 38 – Valores obtidos na simulação com o compósito PLANFC40/6 utilizando malha tetraédrica e 1,5 mm de distância entre nós dos vértices (parafusos de cabeça escareada).	75
Figura 39 – Vista ortogonal frontal do componente com a vista em seção (A-A) no rebaixo para um dos parafusos de cabeça escareada.	76
Figura 40 – Imagem do componente após vários ciclos de trabalho com os parafusos de cabeça escareada.....	77

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Resistência à tração (TS), módulo de elasticidade (MOE), densidade (Ds) e módulo específico (ME) dos nanocristais de celulose, comparados com outros materiais. ...	21
Tabela 2 – Características gerais do PLA 3251D.....	42
Tabela 3 – Condições de temperatura na extrusão e na injeção.....	43
Tabela 4 – Designação dos corpos de prova e proporções em peso (wt%) dos compósitos produzidos.	43
Tabela 5 – Valores médios e de desvio-padrão das propriedades obtidas nos ensaios de tração e nas medições da densidade aparente dos compósitos produzidos.....	56
Tabela 6 – Valores médios e de desvio-padrão dos testes de impacto e DSC dos compósitos produzidos	58
Tabela 7 - Valores médios comparativos do material PLANFC40/6 e a liga de alumínio 1060 H12.	67
Tabela 8 – Valores para a tensão obtidos nas várias simulações e diferentes configurações para a malha.	73

LISTA DE SIGLAS

ABNT	Associação brasileira de normas técnicas
ASTM	Norma americana para testes de materiais
ATRP	Polimerização radical de transferência de átomos
CAD	Desenho auxiliado por computador
CAE	Engenharia auxiliada por computador
CLP	Controlador lógico programável
Cwa	Clima subtropical úmido
DMA	Análise mecânica dinâmica
DSC	Calorimetria exploratória diferencial
EN	Norma europeia
FB	Fibras de bambu
FEA	Análise de elementos finitos
FETs	Transistor de efeito de campo
GMA	Glicidil metacrilato
GDL	Graus de liberdade (elementos)
ISO	Organização internacional de normas
LOP	Limite de proporcionalidade ou escoamento
MEV	Microscopia eletrônica de varredura
MEF	Método dos elementos finitos
MFC	Celulose microfibrilada
MOE	Módulo de elasticidade ou módulo de Young
NBR	Norma brasileira
NCA	Nanocelulose de algas
NCB	Nanocelulose bacteriana
NCC	Cristais de nanocelulose
NCT	Nanocelulose de tunicados
NFC	Celulose nanofibrilada
NMCs	Nanomateriais de celulose
OFET	Transistor orgânico de efeito de campo
PBS	Polibutileno succinato
PCL	Policaprolactona
PEG	Polietilenoglicol
PET	Polietileno tereftalato
PHB	Polihidroxibutirato
PLA	Poli(ácido láctico)
PVAc	Poli(acetato de vinila)
PVB	Poli(vinil butiral)
PVC	Polivinilcloruro
ROP	Abertura radical do anel (polimerização)
RPM	Rotações por minuto
TCF	Totalmente livre de Cloro
UFLA	Universidade federal de Lavras
UNI	Norma italiana
Wt%	Proporção em base ao peso

SUMÁRIO

PRIMEIRA PARTE	15
1 INTRODUÇÃO	15
2 OBJETIVOS	17
2.1 Objetivo geral	17
2.2 Objetivos específicos	17
3 REFERENCIAL TEÓRICO	18
3.1 Compósitos de PLA e NFC	18
3.2 Biopolímeros em aplicações avançadas de engenharia	27
3.3 Simulação numérica aplicada a esforços mecânicos	29
3.4 Propriedades mecânicas dos materiais para a análise das tensões	36
4 MATERIAL E MÉTODOS	39
4.1 Obtenção da celulose nanofibrilada e dos corpos de prova	39
4.2 Ensaio térmico, medições e análise das propriedades mecânicas	44
4.3 Análise por elementos finitos	45
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	56
5.1 Comparação do compósito PLA/NFC em substituição à liga de alumínio: um estudo de caso na indústria	65
6 CONCLUSÃO	78
6.1 Trabalhos futuros	79
REFERÊNCIAS	80
APÊNDICES	86
SEGUNDA PARTE - Artigo	86

PRIMEIRA PARTE

1 INTRODUÇÃO

Avaliar a utilização dos biopolímeros biodegradáveis como matéria prima para a construção de componentes mecânicos é de interesse industrial e acadêmico, uma vez que estes componentes são submetidos a esforços mecânicos, cujas respostas do material na absorção aos diversos esforços podem ser representados por diferentes níveis de tensão e deformação e descritos por modelos matemáticos. Com base nesses modelos e outras propriedades do material é possível conhecer os seus limites de emprego, devendo-se considerar a possibilidade de substituição tanto dos polímeros de origem fóssil ou não biodegradáveis comumente utilizados, assim como dos materiais metálicos em engenharia avançada. O crescente interesse nesse tipo de material surge a partir da necessidade de se criar peças mecânicas que sejam sustentáveis, biodegradáveis, recicláveis, biocompatíveis ou mesmo metabolizáveis. Características comumente encontradas nos polímeros como rigidez dielétrica, resistência à corrosão, baixo coeficiente de atrito e a relação entre resistência mecânica e peso tornam estes materiais uma opção atraente para aplicações industriais em diversas áreas. Assim como, a possibilidade de conformação por meio de técnicas de processamento mecânico como usinagem e estampagem e de técnicas de processamento à quente como moldagem sob pressão, que favorecem a produção desses componentes em alto escala.

Em aplicações em que um componente mecânicos é submetido a esforços, a indústria dispõe de métodos computacionais capazes de descrever o seu comportamento e relacionar as propriedades mecânicas do material com os diversos estados de tensões e deformações mecânicas. Por meio da simulação numérica é possível aplicar as propriedades físicas do material, condições de contorno e atuações de forças, em um modelo matemático do componente para verificar a sua capacidade de resistir a estes esforços antes de produzi-lo. Com os ciclos de simulação é possível verificar e comparar as diferentes respostas do modelo às várias intensidades de esforços mecânicos, modificações nas propriedades do material e na geometria do componente. Esta fase no projeto industrial encurta a colocação de produtos no mercado e evita outros métodos de testes destrutivos mais dispendiosos.

Biomateriais¹ na forma de biocompósitos permitem que as suas propriedades mecânicas possam ser ajustadas, potencializadas e direcionadas com base na sua aplicação. A boa aceitação dos materiais compósitos é devida, essencialmente, as suas novas propriedades físico-mecânicas, pois é possível desenvolver novos materiais que combinam e intensificam as propriedades de cada fase de modo sinérgico. Durante o desenvolvimento de materiais compósitos é necessário considerar as propriedades físico-químicas das suas fases: reforço e matriz. Como também, as suas dimensões, as suas concentrações e as suas interações no compósito. O processo produtivo do compósito e a técnica empregada para a obtenção do componente mecânico influenciam, muitas vezes de modo determinante, as suas propriedades finais e qualidades dimensionais e superficiais, os quais devem ser orientados durante todo o processo de produção.

O poli(ácido láctico) (PLA) é um biopolímero, biodegradável e termoplástico, obtido a partir de fontes 100% renováveis, como açúcar de milho e beterraba. Devido às suas qualidades de biocompatibilidade, muitas pesquisas indicam sua aplicação como estrutura para tecidos ósseos construídos por meio de impressoras 3D. Pelas suas características mecânicas é considerado um material frágil, apresenta alto módulo de elasticidade se comparado com outros biopolímeros e boa capacidade de moldagem. A fratura em materiais frágeis ocorre a partir de um alongamento baixo durante a deformação plástica, o que significa pouca ductibilidade, necessária em algumas aplicações. Muitas pesquisas têm sido realizadas com o objetivo de diminuir esta fragilidade, o que significa aumentar a sua tenacidade com o uso de plastificantes, resultando em grandes perdas no seu módulo de elasticidade e diminuição na sua temperatura de transição vítrea.

Trabalhos recentes indicam o uso de celulose nanofibrilada (NFC) como reforço em matrizes poliméricas, com o objetivo de melhorar certas propriedades mecânicas como a resistência mecânica e propriedades térmicas como o aumento da temperatura de transição vítrea. Sendo um material extraído de fontes naturais e renováveis, os vegetais são as principais fontes de celulose. Nesse caso, o bambu é uma importante opção para se obter nanofibrilas naturais e portanto, sustentáveis, por ser uma planta de rápido crescimento, rica em celulose e que completa seu ciclo em poucos meses atingindo a resistência máxima em alguns anos.

¹ Nesta tese, os termos biomateriais e biopolímeros indicam não somente os materiais ou polímeros que são capazes de interagir com os diversos sistemas biológicos, mas também, se refere àqueles que possuem suas origens orgânicas e/ou em fontes renováveis.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Este trabalho tem como objetivo o uso de simulações numéricas como ferramenta para avaliar e remodelar a aplicação de um compósito biodegradável, de matriz renovável e reciclável, constituído por celulose nanofibrilada (NFC), obtida a partir de fibras de bambu, como reforço em uma matriz de poli(ácido láctico) (PLA), como material na construção de componentes mecânicos.

2.2 Objetivos específicos

- a) Produzir corpos de prova de compósitos utilizando celulose nanofibrilada de bambu como reforço em uma matriz de PLA e inserindo o glicerol como agente plastificante, de modo a obter como resultado um material versátil para a construção de componentes mecânicos, com boa tenacidade e sem perdas significativas no seu módulo de elasticidade.
- b) Obter as propriedades mecânicas dos corpos de prova produzidos por meio de ensaios experimentais e medições, para analisar e comparar os resultados dos métodos experimentais com os resultados das simulações dos modelos via *software*, quando submetidos às mesmas tensões dos ensaios.
- c) Verificar via simulações numéricas, se um componente mecânico construído com o compósito proposto suporta carregamentos de esforços durante o seu emprego e é capaz de substituir o mesmo componente no sistema mecânico, hoje construído em liga de alumínio 1060 H12, em um estudo de caso na indústria. Avaliar possíveis modificações da geometria do componente para adaptá-lo à aplicação específica com o uso dos métodos numéricos.

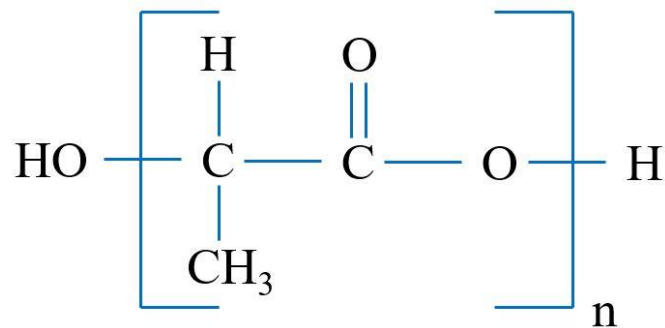
3 REFERENCIAL TEÓRICO

Além de compreender o estado da arte e alguns conceitos necessários para se criar as diretrizes desta tese, nessa etapa buscou-se delimitar os testes com base em pesquisas precedentes e de acordo com os objetivos finais deste trabalho.

3.1 Compósitos de PLA e NFC

O PLA é um poliéster alifático termoplástico, que pode ter uma estrutura semicristalina ou amorfa, sintetizado a partir do ácido lático (QUINTERO et al., 2014). A estrutura molecular do PLA é esquematicamente ilustrada na Figura 1.

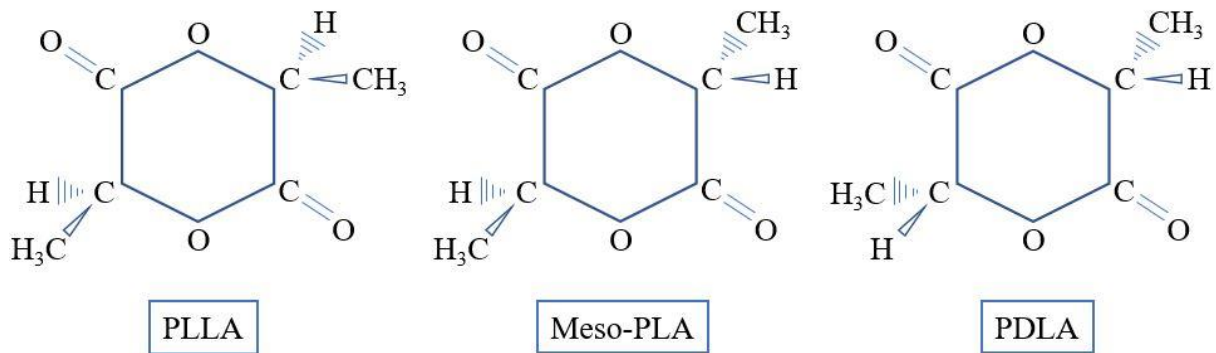
Figura 1– Representação esquemática molecular do PLA.



Fonte: Adaptado de Rudnik (2016).

O PLA consiste basicamente em dois estereoisômeros, o ácido L- e D-ácido lático e como uma molécula quiral pode ser produzido biologicamente ou quimicamente. Quando elaborado biologicamente produz L-ácido lático quase que exclusivamente levando à produção de ácido L-polilático ou PLLA, com baixo peso molecular. No entanto, durante o processo químico são obtidos diferentes níveis de L- e D-ácido lático originando o meso-PLA ou PDLA. Nesse caso, durante a reação química é produzido um diéster cíclico, lactídeo, como ilustrado na Figura 2 como parte do processo de produção de PLA. A polimerização por abertura de anel, por exemplo, possui a vantagem de produzir polímeros com maior peso molecular (YUNZI et al., 2016) e permitir o controle das propriedades finais do PLA ajustando proporções e sequências de L- e D-ácido lático.

Figura 2 – Representação da estrutura química PLLA, meso-PLA e PDLA.



Fonte: Adaptado de Siebert-Raths et al. (2011).

As propriedades mecânicas do PLA são semelhantes às dos polímeros derivados de recursos fósseis especialmente alto módulo de elasticidade, rigidez, transparência, comportamento termoplástico e boa capacidade de moldagem (OCHI, 2015). Segundo Huneault e Li (2007), o PLA é, em muitos aspectos, semelhante ao tereftalato de polietileno (PET). Suas propriedades térmicas e mecânicas são superiores quando comparadas a outros poliésteres alifáticos biodegradáveis como o succinato de polibutileno (PBS), polihidroxibutirato (PHB) e policaprolactona (PCL) (MOKHENA et al., 2018).

A degradação do PLA é impulsionada pela alta agitação térmica de suas moléculas (temperatura) e altos valores de umidade. Segundo Qianru et al. (2019), Em casos extremos de compostagem, pode deteriorar-se em questão de semanas ou meses. A hidrólise é o principal mecanismo de degradação, seguido de um ataque de bactérias sobre os resíduos fragmentados. Além disso, existem outros fatores que aceleram a hidrólise, como o contato com ácidos ou bases. Outras características como dimensões da amostra, grau de cristalinidade e proporções das fases (blendas, compósitos e nanocompósitos) afetam a taxa de degradação. Esses materiais se decompõem rapidamente sob condições de compostagem tanto aeróbicas quanto anaeróbicas. Sob condições normais de uso, o PLA é muito estável e mantém suas propriedades moleculares e físicas por anos. Estudos indicam a possibilidade de aumentar consideravelmente a vida útil desses componentes aplicando tratamentos superficiais, como películas protetoras (ROYSE, 2012; BOROWICZ, 2019).

A estrutura deste biopolímero composta por átomos de carbono assimétricos pode apresentar alta transparência com grau de cristalinidade relativamente baixo. Assim, o PLA possui características significativas para produzir filmes orientados biaxialmente e componentes moldados por sopro (REBOUILLAT e PLA, 2013). Pode até ser usado para o

fabrico de fibras para a indústria têxtil, bem como para produzir sacolas e embalagens plásticas. Como o PLA é biocompatível sua aplicação pode ser estendida à medicina, como material para implantes cirúrgicos, estruturas para tecidos ósseos, sistemas de administração de medicamentos e fibras de sutura (GREMARE et al., 2017). Para Liu Y. et al. (2018), o PLA é um termoplástico bastante rígido, que resulta em baixa tenacidade quando comparado a outros termoplásticos. Sua alta fluidez durante os processos de extrusão e compressão apresenta baixa contração, o que permite a produção de componentes com dimensões precisas e com ótimo acabamento superficial (CHEN et al., 2014). No entanto, por apresentar baixo coeficiente de atrito está sujeito sofrer deformações graves e alto desgaste em temperaturas acima de 120 °C (SHARMA et al., 2019).

As novas técnicas que manipulam materiais na escala nanométrica, que inauguraram a era da nanotecnologia propiciam uma variedade maior de propriedades nos materiais, que podem ser obtidas e modificadas. Nessa escala, as propriedades são completamente diferentes se comparadas à escala macroscópica, pois se ultrapassa os limites da física clássica onde passa a valer a dualidade da partícula onda e seus efeitos quânticos. Muito dessas novas possibilidades ocorrem também ao notável aumento da relação entre superfície e volume.

A celulose é um biopolímero, polissacarídeo e é o polímero mais abundante em nosso planeta. Pode ser obtido de várias fontes vegetais, além as de origem bacteriana e de espécies marinhas como algas e tunicados. Como reportado por Saba e Jawaid (2017), os monômeros de celulose são formados por duas moléculas de glicose conhecidas como celobiose e contêm seis grupos hidroxila que estabelecem ligações de hidrogênio intra e intermolecular. Seu grau de cristalinidade depende de sua origem e do processamento ao qual foi submetido para isolamento da hemicelulose e da lignina. Os efeitos da celulose nanofibrilada (NFC) têm recebido muita atenção em estudos recentes como reforço em matrizes poliméricas e abre novas possibilidade com as suas notáveis propriedades, assim como na criação de novos materiais na forma de compósitos. Nessa escala, as NFCs apresentam aspectos estruturais e físicos únicos que lhes conferem propriedades de resistência mecânica, óptica, elétrica e química distintas de sua forma macrométrica.

A estrutura das NFCs são formadas por sequências da fase amorfa e da fase cristalina. As propriedades mecânicas de seus cristais possuem ainda uma compreensão restrita devido às suas dimensões e às limitadas técnicas metrológicas disponíveis. As medidas quantitativas de suas propriedades mecânicas seguem como um desafio (MOON et al., 2011). Contudo, conforme dados médios experimentais apresentados na Tabela 1, se observa a alta resistência dos nanocristais celulósicos em conjunto com a sua baixa densidade, se comparado com outros

materiais. Portanto, as propriedades mecânicas das NFCs são fortemente influenciadas pelo grau de cristalinidade da sua estrutura, a qual depende da sua origem e dos métodos utilizados no processamento das fibras.

Tabela 1 – Resistência à tração (TS), módulo de elasticidade (MOE), densidade (Ds) e módulo específico (ME) dos nanocristais de celulose, comparados com outros materiais.

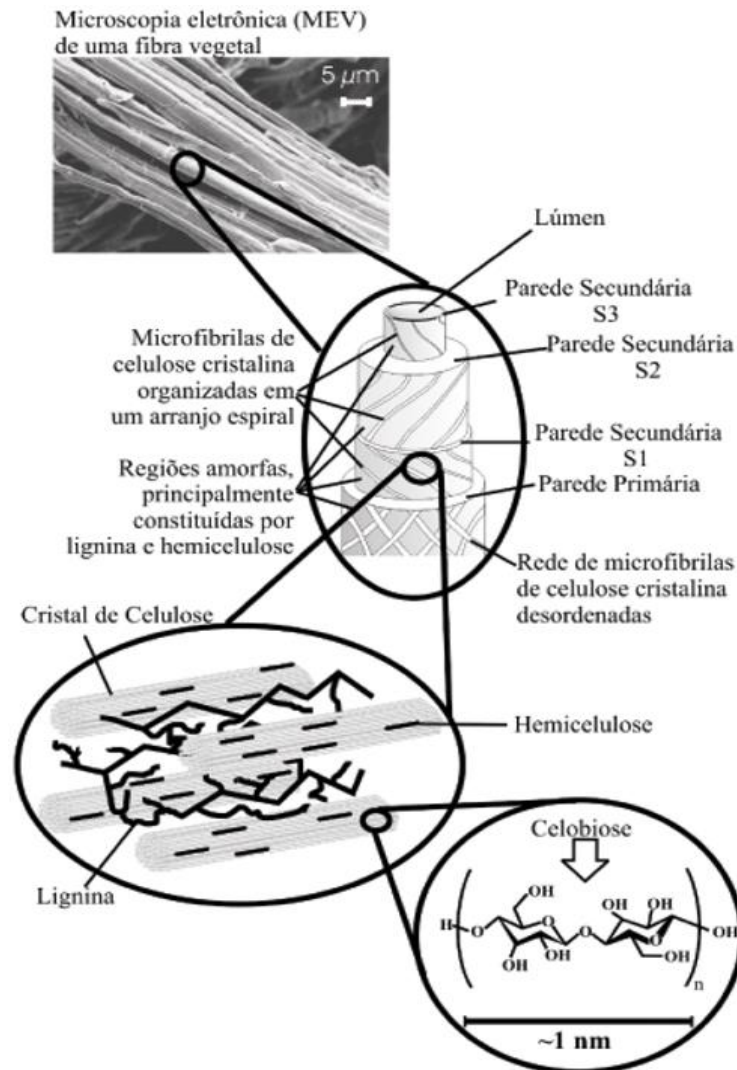
Materiais	TS (MPa)	MOE (GPa)	Ds (g/cm ³)	ME (GPa.g ⁻¹ .cm ³)
Aço de alta resistência	600	210	7,9	26,5
Alumínio 6061/T6	275	70	2,7	25,9
Fibra de vidro	3500	80	2,5	32,0
Fibra de Carbono	4000	230	1,8	127,7
Nanocristal de celulose	7500	135	1,5	90,0

TS: Resistência à tração; MOE: Módulo de elasticidade; Ds: Densidade; ME: Módulo específico (MOE/Ds).

Fonte: Adaptado de Braun et al. (2016).

Existem vários processos para se obter celulose, que basicamente decompõem o complexo lignina-hemiceluloses-celulose por meios químicos, físicos, térmicos, biológicos ou nas várias combinações dos mesmos com o objetivo de deslignificação com baixo impacto ambiental, minimizar danos nas fibrilas celulósicas e visando um baixo consumo de energia durante o processo. A separação entre celulose, hemicelulose e lignina é conhecida como polpação e o grau de remoção desses elementos e o processo empregado depende do objetivo pretendido e das características do material resultante. Como exemplo, a polpação alcalina separa e solubiliza a lignina e a hemicelulose da celulose por hidrólise de ésteres. Nesse processo, a celulose extraída aumenta seu grau de cristalinidade e, conseqüentemente aumenta sua resistência na proporção da sua pureza (XUAN et al., 2018). A Figura 3 ilustra a estrutura de uma fibra vegetal e a sua microestrutura.

Figura 3 –Estrutura de uma fibra vegetal.



Legenda: A imagem MEV se refere à fibra de Eucalipto.
Fonte: Silva et al. (2009).

Para se obter partículas menores e de tamanhos mais homogêneos, geralmente o tratamento mecânico é repetido várias vezes. Com isso, a maior ocorrência de danos mecânicos na celulose cristalina, se comparado com outros processos de obtenção. Porém, Piras, Prieto e Borggraeve (2019) obtiveram bons resultados utilizando o processo de moagem por esferas (*ball milling*), inclusive na funcionalização da nanocelulose com a separação da fase cristalina daquela amorfa. Contudo, a homogeneização dimensional é ainda um desafio nesse processo.

O processo químico Kraft é o mais difundido, onde o material é submetido a uma temperatura de 160 °C imersa em uma solução de hidróxido de sódio e sulfeto, o que permite a remoção de grande parte da lignina presente. Para alcançar níveis mais altos de remoção de lignina e alveamento do material, que é escuro após a polpação, atualmente se utiliza o

branqueamento pelo processo totalmente sem cloro (TCF), o qual é comumente realizado pela aplicação de agentes oxidantes (SILVA et al., 2009). A aplicação desse processo, em vez do uso sequencial de cloro produz um menor impacto ambiental sem alterar as propriedades mecânicas das fibras. No entanto, existem vários trabalhos que buscam novos métodos e aprimoramento dos processos atuais, visando um custo menor e impactos ambientais ainda menores.

Segundo Mokhena et al. (2018), a nanotecnologia abrange ciência, tecnologia e engenharia, cujo objeto de trabalho se encontra em escala nanométrica (1 a 100 nm). Esse campo de estudos faz convergir vários setores do conhecimento, como: química, física, biologia e engenharia. Na engenharia de materiais existe a manipulação e caracterização de partículas ou materiais em que pelo menos uma das dimensões está na escala nanométrica, como ocorre com microfibrilas de celulose. Nesse caso, por exemplo, embora o comprimento médio das microfibrilas esteja na escala micrométrica, seu diâmetro médio está na escala de nanômetros. Portanto, na maioria dos casos, as designações microfibrilas de celulose (MFC) e nanofibrilas de celulose (NFC) são usadas para o mesmo material, sem distinção.

Os nanomateriais de celulose (NMCs) são potenciais substitutos das nanofibras inorgânicas atualmente em uso, porque apresentam um custo mais baixo durante o processamento, são materiais renováveis e de classificação biodegradável, com alta resistência mecânica (SHARMA et al., 2019). Os NMCs podem ser extraídos de diferentes fontes naturais e biomassa (madeira, materiais não madeireiros e animais) por tratamento mecânico e hidrólise (ácida ou alcalina) ou uma combinação dos dois. Eles podem ser agrupados em cinco categorias: nanofibrilas de celulose (NFC), nanocristais de celulose (NCC), nanocelulose bacteriana (NCB), celulose de algas (NCA) e celulose de tunicados (NCT), dependendo da fonte e do método de extração.

Nanofibrilas de celulose (NFC), também conhecidas como microfibrilas de celulose (MFC) ou celulose micro/nanofibrilada, são obtidas principalmente por tratamento mecânico a partir de materiais à base de celulose de origem vegetal. As NFCs possuem alta resistência à tração, baixo peso específico, forte atividade superficial e biocompatibilidade, e são usadas como material de enchimento no campo de compósitos (indústria de embalagens e papel), estabilizador de emulsão, camada condutora em eletrônica e biomaterial em aplicações médicas. Normalmente, os processos de extração de NFC incluem moagem, homogeneização de alto cisalhamento, ultra-som de alta intensidade e trituração criogênica. Esses tratamentos mecânicos induzidos por alta energia, que também consomem tempo como resultado de ciclos repetidos dificultam o uso industrial (RAMACHANDRAN et al., 2015). Processos anteriores,

como tratamentos químicos e/ou enzimáticos para reduzir o consumo de energia e o tempo podem resultar em danos à fase cristalina das nanofibrilas afetando negativamente as propriedades mecânicas. No entanto, essas desvantagens são ofuscadas pelas propriedades valiosas exclusivas das NFCs, como alta pureza, alta resistência específica, disponibilidade abundante, biocompatibilidade e estruturas ajustáveis à superfície, que fornecem suas diversas aplicações biomédicas (MOKHENA et al., 2018).

Segundo Oksman et al. (2015), as propriedades da superfície dos NMCs desempenham um papel importante na ligação fibra-fibra dentro da rede de nanocelulose e na adesão interfacial entre fibra e matriz, que por sua vez determina as propriedades resultantes dos nanocompósitos. Portanto, a otimização da interface fibra-matriz é importante, para que suas propriedades mecânicas possam ser transferidas em macroescala para todo o material compósito, bem como para toda a sua distribuição na rede de polímeros. A natureza hidrofílica dos NMCs facilita a sua dispersão com polímeros solúveis em água. A modificação da superfície, no entanto, abre as portas para a aplicação dos NMCs como reforço em vários materiais poliméricos usando diferentes métodos de processamento, especialmente técnicas clássicas de processamento térmico, como no uso de moldes de injeção. A modificação da superfície dos NMCs, Segundo Chakrabarty e Teramoto (2018), pode ser dividida em três grupos: substituição de grupos hidroxila por pequenas moléculas de ligação; modificação da superfície do polímero com diferentes agentes de acoplamento e modificação da superfície da polimerização radical de abertura de anel (ROP), polimerização de radical de transferência de átomos (ATRP) e polimerização de transferência de elétrons vivos de radical único.

No caso de compósitos à base de PLA, vários pesquisadores relatam a funcionalidade dos NMCs para melhorar sua dispersão e interação com a matriz do PLA. A funcionalização dos NMCs no sistema PLA inclui: enxerto de acetilação (KALE e al., 2018), salinização (QUIAN et al., 2018), glioxalização (LIN et al., 2009), uso do polietilenoglicol (PEG) ou enxerto de glicidil metacrilato (GMA) (TING et al., 2019) e o uso de surfactantes (MAYEKAR et al., 2020). Dependendo do tipo de funcionalização, as propriedades dos compósitos resultantes são aprimoradas para propósitos diferentes. O pré-tratamento das fibras para facilitar a sua dispersão também pode ser empregado como uma estratégia para funcionalizar os NMCs. Por exemplo, o pré-tratamento por oxidação de fibras de celulose introduz grupos carboxílicos na superfície dos nanomateriais de celulose. Em outro estudo, é relatado que o pré-tratamento com carboximetilação e tratamento mecânico prévio resultam em nanofibras com perdas de células carboximetiladas (WANHEE et al., 2019).

Os compósitos poliméricos são formados por dois ou mais materiais de naturezas diferentes, geralmente uma matriz polimérica e pelo menos uma fase de reforço (inorgânico ou orgânico), em uma mistura. O material resultante é desenvolvido para atender às características de aplicação que polímeros puros não conseguem. As misturas podem ser divididas em três categorias:

Imiscível: caracterizado por sua morfologia de separação de fases. Apresentam alta tensão interfacial e baixa adesão entre as fases, resultando em baixas propriedades. Para contornar isso, vários compostos chamados de agentes de compatibilização podem ser usados.

Compatível: são misturas de polímeros imiscíveis que possuem propriedades físicas macroscopicamente uniformes. Isso ocorre devido à forte interação química (mas não reagida) entre os polímeros misturados, proporcionando forte adesão entre as fases.

Miscível: são misturas poliméricas que possuem apenas uma fase em sua estrutura.

A formação de sistemas homogêneos depende de vários fatores, como: temperatura de processamento, cinética do processo de mistura, viscosidade e presença de aditivos. Sendo o fator fundamental, no que se refere à miscibilidade, a natureza termodinâmica das fases. Os agentes compatibilizantes, surfactantes e emulsionantes têm o objetivo de interagir entre as fases, ou mesmo, em somente uma delas de modo a variar a energia livre da mistura ou estabilizar a fase dispersa evitando a sua coalescência ou precipitação.

Em primeiro lugar, a natureza hidrofílica dos nanomateriais celulósicos devido à presença de grupos hidroxila tem sido a principal dificuldade em promover sua dispersão em vários materiais poliméricos hidrofóbicos como o PLA e também, a sua tendência à coalescência quando desidratados independentemente do método de preparação. Segundo Mokhena et al. (2018), os nanomateriais de celulose têm fortes forças de atração emanados dos grupos hidroxila superficiais (-OH) via ligação de hidrogênio causando aglomeração irreversível, reorganização e co-cristalização. Modificações químicas são aplicadas para mascarar esses grupos hidroxila para impedir a sua aglomeração. Como os nanomateriais de celulose são obtidos em suspensão aquosa, a moldagem da solução (*tape casting*) tem sido uma via de preparação preferida para evitar aglomerações irreversíveis durante a secagem e obter estados de dispersão razoáveis em meios aquosos e com o uso de alguns solventes ou dispersantes orgânicos. Além disso, este método é frequentemente usado para preparar o lote mestre quando outras técnicas de processamento, como extrusão e peletização são empregadas para preparar compósitos PLA/NMCs. Para superar as interações NMCs-NMCs esforços consideráveis são dedicados em melhorar a compatibilidade interfacial funcionalizando a

superfície dos nanomateriais de celulose ou usando diferentes compatibilizadores para permitir o uso de outras vias de preparação diretas, como a moldagem por injeção. Especificamente com o PLA, outra característica importante é a sua fragilidade, que limita o seu uso em aplicações que exigem uma certa ductilidade do material ou maior tenacidade. Nesse caso, muitos materiais orgânicos ou não foram utilizados em alguns estudos como agentes plastificantes a fim de se obter no material resultante um aumento na sua deformação plástica, mesmo em detrimento da sua resistência mecânica, como o módulo de elasticidade. Pesquisas recentes indicam o uso de compatibilizadores/plastificantes orgânicos e inorgânicos para melhorar a tenacidade de biocompósitos de PLA/NMCs como glicerol (VALERIO et al., 2016; SHANSHAN et al., 2017), polietilenoglicol (PEG) (ZHAO et al., 2012), caseína (HUNEAULT e LI, 2007), poli(vinil butiral) (PVB) (KHURMA et al., 2005), resinas epóxi (MENG et al., 2018), anidrido maleico (GHASEMI et al., 2017) e poli(acetato de vinila) (PVAc) (LIU, Y. et al., 2018). Segundo Valerio et al. (2016, p. 1284), “Um agente plastificante ideal para o PLA deve ser sintetizado usando rota de síntese econômica e preferencialmente a partir de monômeros de base biológica.”

Plastificantes como o glicerol ($C_3H_8O_3$) atuam incrustando-se entre as cadeias de polímeros espaçando-as e ocupando o “volume livre” do polímero tornando-o mais dúctil e aumentando a sua deformação na zona plástica, o que aumenta a sua tenacidade e faz diminuir a temperatura de transição vítrea. Além disso, o glicerol possui a função de agente dispersante ou surfactante, pois consegue em uma mistura imiscível “envolver” partículas da fase dispersa dentro da fase contínua tornando a mistura estável e homogênea. Essa propriedade é devida à sua constituição, que possui cadeias carbônicas (hidrofóbicas) com um grupo hidrofílico em uma das suas extremidades, o que proporciona a interação tanto com substâncias polares (hidrofílicas) quanto com as apolares (hidrofóbicas). Atualmente, a maior parte da produção de glicerol ainda provém de óleos e gorduras naturais. Segundo Rivaldi, Sarrouh e Silva (2008), o glicerol é um subproduto da produção do biodiesel e a sua disponibilidade no mercado segue o aumento da produção mundial de biodiesel e no seu artigo propõem estratégias biotecnológicas para um novo reaproveitamento deste material, inclusive na indústria de polímeros e biopolímeros.

3.2 Biopolímeros em aplicações avançadas de engenharia

Atualmente, a indústria disponibiliza muitos tipos de polímeros (termoplásticos e termofixos) para produzir componentes mecânicos, que são comercializados em blocos para serem usinados por meio de máquinas-ferramentas ou peletizados para processos de moldagem por injeção ou sopro, nos quais grânulos de polímeros são aquecidos e o derretimento resultante é comprimido através de um parafuso extrusor ou soprado contra a cavidade de um molde, e mantém a forma das paredes após a solidificação. A principal característica dos termoplásticos é exibir fortes reduções na viscosidade durante o aquecimento e manter a propriedade de fluir em altas temperaturas por um tempo relativamente longo. Uma vez interrompida a ação do calor, resfriando abaixo da temperatura de transição vítrea, eles recuperam seu estado rígido e mantêm a forma transmitida. A transformação é reversível mesmo que sempre exista uma certa degradação que limite o número de ciclos possíveis. Por outro lado, polímeros termoendurecíveis ou termofixos, sob condições adequadas de temperatura e/ou na presença de substâncias particulares são transformados em materiais rígidos, insolúveis e infusíveis. Essa transformação ocorre como resultado de reações de reticulação (processo pelo qual as cadeias poliméricas sofrem uma reação que cria ligações entre diferentes cadeias no nível dos grupos funcionais reativos) chamada endurecimento, que ocorre entre as cadeias poliméricas com a formação de ligações fortes (covalentes ou iônicas). Alguns polímeros termoendurecíveis são reticulados apenas por meio de calor ou através de combinações de pressão e calor, enquanto outros podem ser reticulados através de reações químicas à temperatura ambiente (reticulação à frio). É difícil reciclar esses polímeros porque as novas ligações formadas como resultado das operações de reticulação são definitivas. Examinando a tendência da viscosidade com a temperatura, quando a temperatura de transição vítrea é excedida, ocorre uma diminuição inicial na viscosidade, onde existe um estado plástico que permite que o material seja processado. Em algum momento, no entanto, a reticulação assume o controle e há um aumento progressivo da viscosidade, o que leva ao endurecimento do material. Conclui-se que os materiais termoendurecíveis podem ser tratados com as mesmas tecnologias dos materiais termoplásticos, desde que o tratamento seja concluído em condições nas quais os polímeros retenham sua plasticidade e seja tomado o cuidado de que a reticulação ocorra posteriormente, quando houver a moldagem da sua forma final.

Os polímeros de engenharia ou polímeros técnicos, por sua vez, fazem parte de um segmento inovador e promissor para a indústria de transformação de polímeros. São materiais com propriedades superiores a outros polímeros comuns, pois são mais estáveis em aplicações

que exigem maior resistência mecânica e química. Devido às suas propriedades e adequadas às aplicações eles podem substituir, em muitos casos e de forma eficiente materiais metálicos como o aço. Entre suas características pode-se destacar a alta rigidez dielétrica, boa resistência química e ótima resistência específica, ou seja, a relação entre densidade e resistência mecânica, o que significa obter componentes mais leves. Portanto, eles se tornam um verdadeiro precursor da inovação em muitos segmentos. Além disso, devido ao baixo coeficiente de atrito, esses materiais não requerem lubrificação evitando o uso de graxas e óleos, o que reduz os custos operacionais.

Nos polímeros, muitos aspectos precisam ser observados na sua aplicação em comparação com o comportamento dos metais, mas provavelmente o mais importante é a temperatura, porque sua baixa temperatura de transição vítrea influencia fortemente suas propriedades mecânicas. Os efeitos do esforço mecânico e sua estrutura molecular (como peso molecular, orientação das moléculas e densidade) também influenciam. Como exemplo disso, o polipropileno aumentando a temperatura de uso de 20 °C para 60 °C pode causar uma diminuição de até 50% na resistência à tração que o material pode suportar. Devido a essas variações, certas propriedades como o módulo de elasticidade podem ser usadas apenas como padrão de referência e para a condição na qual foi planejada, exigindo avaliações adicionais se o material for usado sob diferentes condições. Além disso, a deformação plástica no estado sólido dos polímeros é diferente em comparação aos metais. Nos metais, a deformação do material ocorre por meio do deslizamento entre os planos atômicos e nos polímeros, ocorre o alongamento das cadeias poliméricas e sua intensidade depende do grau de cristalinidade do material. Essas características também influenciam os processos de fabricação e na sua conformação à frio especialmente nos processos de corte e puncionamento por meio de cunhos e cortantes e na usinagem por meio de ferramentas de corte (MISHRA et al., 2019). Os processos de usinagem alteram a geometria do material através de forças aplicadas pelas ferramentas de corte. Essas ferramentas causam uma ruptura superficial do material que formam os cavacos. A qualidade final da superfície varia de acordo com a matéria-prima utilizada, a composição química e a estrutura cristalina (natureza, tamanho, forma e distribuição das fases) e as condições inerentes ao processo, como as características da ferramenta e parâmetros de corte. As características mecânicas que o material deve ter para obter um resultado final de qualidade são muito semelhantes tanto no processo de usinagem quanto no processo de corte por cunhos e cortantes (PATEL et al., 2018). Nesse caso, deve-se observar o alongamento na ruptura, o módulo de elasticidade, a estabilidade da estrutura durante a usinagem e a temperatura de transição vítrea. Para Azmi e al. (2012), o uso correto dos

parâmetros de usinagem como velocidade do mandril, avanço da ferramenta e profundidade de corte, juntamente com um tipo correto de ferramenta (número de dentes, material, ângulo de ataque e fluido de resfriamento) são importantes para garantir não apenas a vida útil mais longa da ferramenta, mas também a rugosidade da superfície trabalhada e a estabilidade dimensional do componente após o processo.

3.3 Simulação numérica aplicada a esforços mecânicos

A análise computacional por meio da simulação numérica dos esforços mecânicos é uma poderosa ferramenta utilizada em projetos industriais no desenvolvimento de dispositivos, ferramentas, máquinas e outros componentes, especialmente nos que apresentam certa criticidade durante seu uso quando submetidos a cargas mecânicas. Com a sequência de simulações a partir de modelos matemáticos dos componentes ou sistemas é possível prever seu comportamento durante os vários esforços físicos aos quais estarão sujeitos. Dessa forma é possível reduzir o tempo e os riscos durante o processo de desenvolvimento, pois permite definir e redefinir o modelo utilizando cálculos computacionais, reduzindo o número de testes físicos. Como resultado, o tempo menor para o produto entrar no mercado e a possibilidade de otimizar materiais, baixar custos e melhorar o *design*.

O método dos elementos finitos (MEF) substitui um problema complexo por um conjunto de problemas simples com uma estratégia de discretização, pois divide o modelo em vários pequenos pedaços com formas geométricas simples e definidas chamadas elementos. Os elementos usam pontos comuns nos vértices ou linhas chamados nós, que têm o comportamento bem conhecido em vários casos de cargas e tensões, em função das propriedades mecânicas do material e da geometria da peça ou componente. Os deslocamentos desses elementos são descritos pelo deslocamento dos nós por meio de funções de interpolação chamados graus de liberdade (GDL) e geralmente polinomiais. As soluções das equações descrevem estes deslocamentos e ao se determinar os mesmos consegue-se determinar os deslocamentos e as tensões em todo o contínuo. Um grande número de problemas com MEF podem ser resolvidos usando como hipótese a linearização, neste caso as deformações são pequenas e o comportamento dos materiais é considerado linearmente elástico, ou seja, a rigidez é sempre constante. O MEF é melhor entendido a partir da sua aplicação prática chamada análise por elementos finitos (FEA), onde um software estabelece as equações diferenciais que controlam o comportamento de cada nó/elemento levando em consideração as interações com os outros elementos e essas equações, e relacionam às variáveis cuja quantidade é determinada pelo

número de nós criados. Como descrito por Sabau et al. (2017), todos os parâmetros tais como carga, rigidez, deslocamentos nodais, tensões de elementos e deformações de elementos são armazenados na forma de matrizes. No pré-processador, depois que a discretização por meio da criação de uma malha com os elementos e nós é executada com êxito, a matriz de rigidez do elemento, matriz de rigidez global e vetores de força globais são formados no *back-end* do *software* de análise (NAVEEN et al., 2019). Portanto, os deslocamentos referenciados em um sistema de coordenadas local ($u(x, y, z)$), determinado pelo algoritmo do programa dentro de cada elemento são assumidos como uma função dos deslocamentos de cada nó N do mesmo. Assim, para o elemento m , tem-se a Equação 1:

$$\{u^{(m)}\}_{(x,y,z)} = [N^{(m)}]_{(x,y,z)} \{\hat{U}\}, \quad (1)$$

onde $[N^{(m)}]$ é a matriz das funções da forma, às vezes também chamada de matriz de interpolação de deslocamento. O índice m significa elemento m e $\{\hat{U}\}$ é o vetor dos deslocamentos globais do nó com os três componentes ou pontos U_i , V_i e W_i incluindo deslocamentos no conjunto acoplado e com isso, o deslocamento do elemento é determinado pelo deslocamento de seus nós interconectados com os nós dos elementos adjacentes. O programa, então, avalia esta relação de deslocamentos com as cargas aplicadas e como resultado espera-se verificar se o material, na geometria da peça, resistirá analisando os esforços e as deformações para as diferentes cargas às quais está sujeita com o critério de falha escolhido. O tamanho da matriz quadrada é dado pelo produto do número de nós e o número de graus de liberdade por nó. Então, o método emprega elementos interconectados, pois uma função deslocamento encontra-se acoplada a cada elemento finito. Cada elemento encontra-se interconectado através de interfaces comuns, que são os nós, onde cada nó pode ser descrito pela força aplicada $[F]$, Equação 2:

$$[F] = [K]\{U\}, \quad (2)$$

onde $[K]$ representa a matriz de rigidez e $\{U\}$ representa o deslocamento. Cada elemento possui uma matriz de rigidez elementar $[D]$, calculados com base na geometria, nas propriedades do material e nas forças aplicadas. As matrizes de vetores elementares são somadas para serem transferidas até a matriz de rigidez global e ao vetor de forças global. Em seguida, a matriz de rigidez é modificada considerando as condições de contorno $[B]$, ou seja, os impedimentos aos graus de liberdade dos elementos e nós e, com isso, o sistema de equações, com os deslocamentos dos nós $\{U\}$ é montado e resolvido numericamente por um algoritmo. As deformações $\{\varepsilon\}$ são


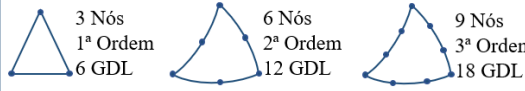
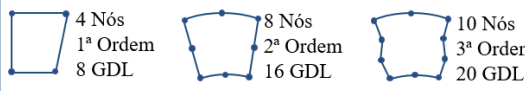



calculadas a partir dos deslocamentos, conforme Equação 3 e as tensões $\{\sigma\}$ são calculadas a partir das deformações, conforme Equação 4:

$$\{\varepsilon\} = [B]\{U\}; \quad (3)$$

$$\{\sigma\} = [D]\{\varepsilon\}. \quad (4)$$

Um fator importante na simulação numérica como reportado por Nurhanizar et al. (2010), que afeta a precisão é a convergência de malha, a qual está relacionada ao tamanho dos elementos ou quantidade de nós mínima necessária para garantir que os resultados de uma análise não sejam afetados por diminuições adicionais do tamanho da malha, porque uma malha mais fina, com maior quantidade de nós, geralmente resulta em uma solução mais precisa. No entanto, à medida que uma malha se torna mais fina o tempo de cálculo aumenta. Portanto, a análise de convergência é necessária para todas as análises por elementos finitos, a fim de se alcançar resultados com desvios menores usando recursos computacionais mais baixos (NAVEEN et al., 2019). Existem outras técnicas que visam reduzir o erro de aproximação de um modelo de elementos finitos, esses procedimentos chamados refinamentos são formas de aumentar os graus de liberdade dos elementos a fim de reduzir o erro de discretização nos cálculos, por meio da aplicação de diferentes formas de elementos, além dos mais simples como lineares e triangulares, se encontram elementos tridimensionais como quadriláteros, tetraédricos e hexaédricos. A Figura 4 apresenta alguns destes elementos e suas aplicações.

Figura 4 – Representação de elementos e as suas aplicações na FEA.

ELEMENTOS		APLICAÇÃO
1D	Linhas e arcos 	Análise de estruturas de treliça com perfis de seção constante.
2D	Triangulares 	Análise de estruturas formadas por chapas, superfícies de espessura muitas vezes menores que as demais dimensões.
	Quadriláteros 	
3D	Tetraédricos 	Análise de estruturas sólidas. Componentes orgânicos de máquinas, tais como eixos, suportes, engrenagens, peças fundidas e forjadas.
	Pentaédricos 	
	Hexaédricos 	

Fonte: Do autor (2020).

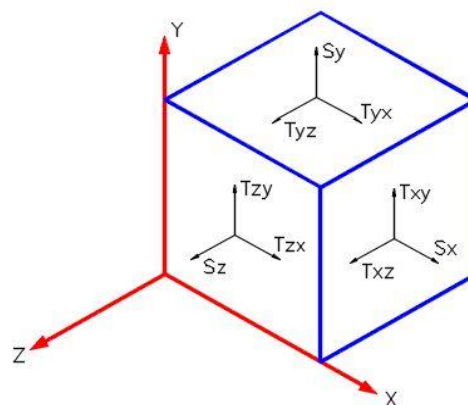
A escolha do material para uma aplicação específica deve, inicialmente, considerar a intensidade dos esforços ativos com o seu fator de segurança. Como cada material tem sua própria capacidade de resistir a um determinado estado de tensão é necessário impor um limite superior a este esforço, a fim de definir, indicar e impedir a falha do material. Normalmente, os materiais de uso comum na engenharia são classificados em dois grupos principais de acordo com sua capacidade de absorver a tensão e transformar em deformação. O primeiro, chamado frágil, abrange materiais com fratura sob níveis de deformação consideravelmente pequenos. O outro grupo, que envolve materiais cujas deformações no tempo de falha são significativamente maiores do que em materiais frágeis é chamado dúctil. Portanto é necessário buscar bases ou critérios que permitam que esse julgamento seja feito. Para isso, pode-se usar critérios de resistência, critérios de ruptura ou critérios de falha para avaliar se o estado de tensão em uma zona excede ou não a resistência do material. Existem vários critérios de falha e seu uso, em grande parte, depende de como o material absorve a tensão de maneira frágil ou dúctil: Mohr, Rankine, von Mises e Tresca. O critério de von Mises, por exemplo, seria uma evolução do critério de Tresca para materiais dúcteis, os quais são baseados na tensão cisalhante como causa da falha do material, fenômeno facilmente observado em ensaios experimentais de tração uniaxiais em barras de aço, onde a falha ocorre com o deslocamento dos planos com uma inclinação de 45° do eixo de aplicação da força, onde a tensão é máxima. O critério de von

Mises considera a variação de forma com volume constante, baseado também em evidências experimentais do ensaio de tração, porém declara que o escoamento de um material ocorre quando a energia de distorção por unidade de volume do material é igual ou superior à energia de distorção por unidade de volume do mesmo material quando este atinge o escoamento em um ensaio de tração, o qual está representado pela Equação 5:

$$\Sigma_{\text{von Mises}} = \sqrt{\frac{(S_x - S_y)^2 + (S_x - S_z)^2 + (S_y - S_z)^2 + 6(T_{xy}^2 + T_{xz}^2 + T_{yz}^2)}{2}}, \quad (5)$$

onde S_x é a força normal na direção x ; S_y é a força normal na direção y ; S_z é a força normal na direção z ; T_{xy} é a força de cisalhamento na direção y (plano YZ); T_{xz} é a resistência ao cisalhamento na direção z (plano YZ); T_{yz} é a resistência ao cisalhamento na direção z (plano XZ). A força que gera a tensão, se positiva, indica um esforço de tração e, se negativa, indica um esforço de compressão e neste caso, as resistências de cisalhamento são substituídas por: T_{yx} , que corresponde à resistência ao cisalhamento na direção x (plano XZ); T_{zy} , que corresponde à resistência ao cisalhamento na direção y (plano XY) e T_{zx} , que corresponde à resistência ao cisalhamento na direção x (plano XY), como nos planos representado na Figura 5.

Figura 5 – Representação das tensões nos planos.



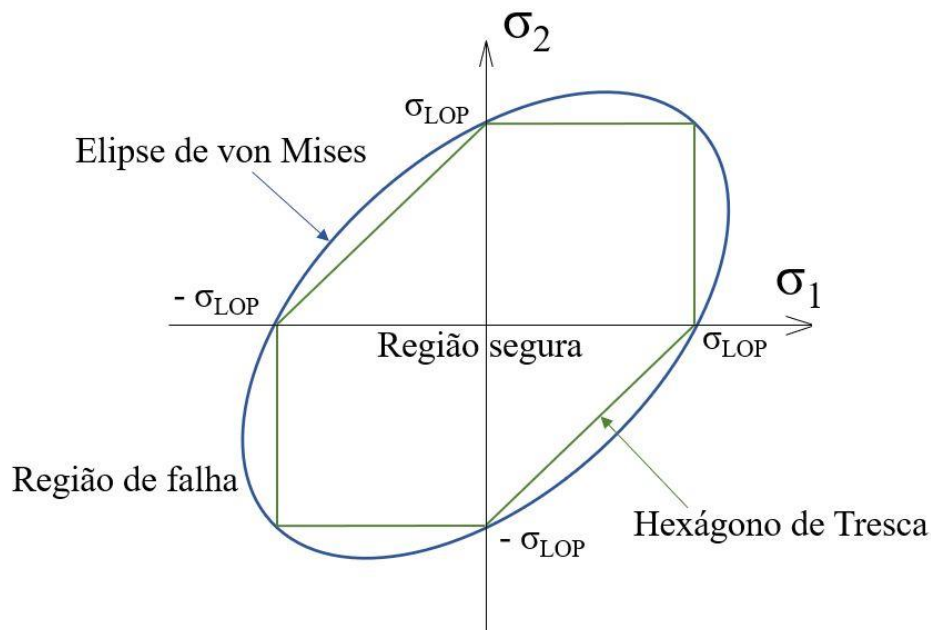
Fonte: Do autor (2020).

As resistências ao cisalhamento, quando nulas, mantêm as forças normais nas direções principais e estas passam a ser chamadas de forças principais, onde a tensão de von Mises é dada pela Equação 6:

$$\Sigma_{\text{von Mises}} = \sqrt{\frac{(P1-P2)^2+(P2-P3)^2+(P3-P1)^2}{2}}, \quad (6)$$

onde P1 é a força normal na primeira direção, projetada no plano XY; P2 é a força normal na segunda direção, projetada no plano YZ e P3 é a força normal na terceira direção, projetada no plano XZ. Na prática, o critério de Tresca é mais conservador do que o de von Mises tendo uma aplicação recomendada em materiais que apresentam uma deformação muito grande durante o escoamento, como o cobre (AKIN, 2009). O critério de von Mises possui uma aplicação mais ampla por ser mais preciso e adequado para materiais dúcteis com deformações menos significativas durante o escoamento. A Figura 6 ilustra a comparação dos dois critérios considerando um plano bidimensional.

Figura 6 – Representação dos limites de escoamento para os critérios de Tresca e von Mises.



Legenda: A Figura apresenta as tensões para os limites de escoamento (LOP) no plano bidimensional e compara o critério de Tresca com o de von Mises, máxima tensão de cisalhamento com máxima energia de deformação.

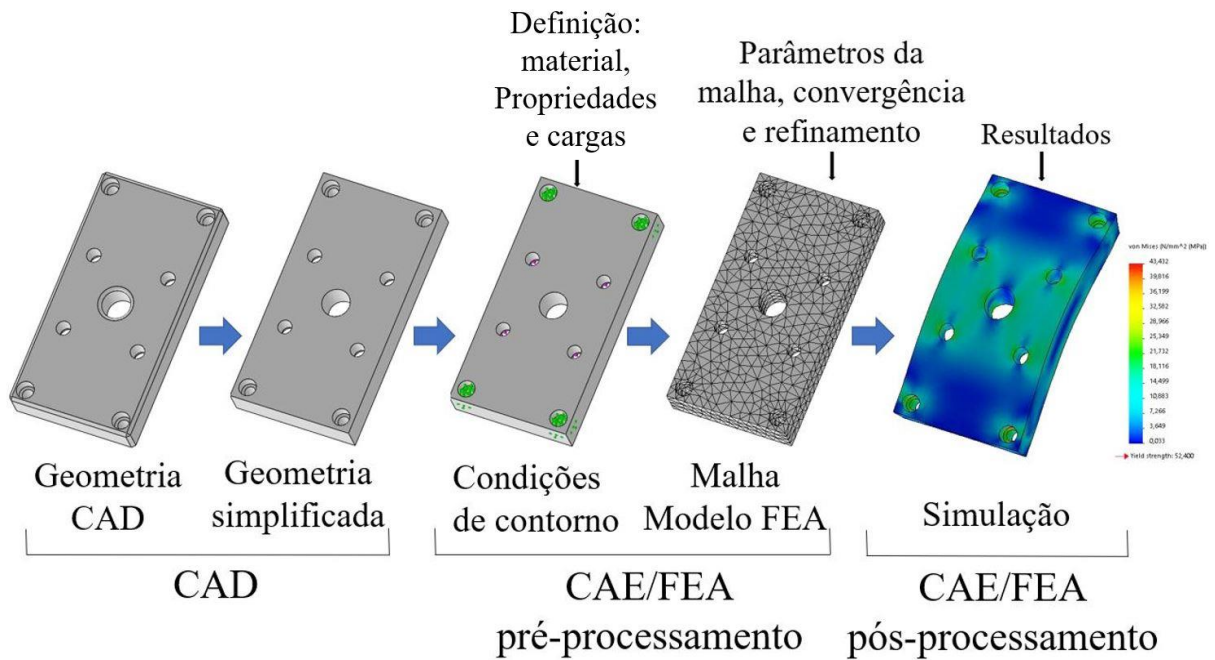
Fonte: Adaptado de Hibbeler (2010).

Para facilitar a visualização dos efeitos e amplitudes das tensões e deformações, os aplicativos de FEA apresentam os resultados por meio de um mapa cromático, que substitui a malha pelas tensões, onde as suas intensidades são representadas pelos vários gradientes de cores, que partem do azul até o vermelho em uma escala crescente. A régua de referência apresenta esta escala com as variações de cores e intensidade e no caso da análise de tensões,

parte do menor até o valor máximo encontrado na análise específica. Logo abaixo da escala, se apresenta o valor limite para o critério de falha. O resultado da simulação se encontra na região segura quando esta tensão limite não se apresenta na escala. Caso contrário, uma seta indica a sua posição na escala de referência do mapa cromático e indica que acima daquela faixa ou gradiente de cores, a região determinada indica falha e possível ruptura.

A sequência para o processo de análise por elementos finitos pode-se tê-lo também como um ciclo, onde as variáveis e parâmetros podem ser modificados ou atualizados em base ao objetivo final da análise e novamente a simulação repetida. A sequência para a análise de tensões pode ser dividida em 3 fases distintas: desenho auxiliado por computador (CAD), pré-processamento e pós-processamento. Na fase de CAD é definida a geometria do componente, ou seja, o modelo matemático e, quando possível, se executa a sua simplificação, porque determinados detalhes ou atributo do componente podem ser reduzidos ou convertidos de modo a diminuir a complexidade da geometria deixando o que efetivamente importa à simulação o que, por consequência, representaria um menor custo computacional para o processamento. Na fase de pré-processamento se define o material, o qual possui as suas propriedades registradas na biblioteca do *software*; as cargas aplicadas, com a definição das faces ou superfícies onde são aplicadas, seguidos das suas respectivas direções e a definição das faces ou superfícies que são fixas ou possuem alguma limitação de movimentação, como zonas engastadas ou de alguma forma guiadas. Logo após, se passa à convergência da malha e consecutivamente aos parâmetros da malha, ou seja, a definição do tipo de elemento de discretização e possibilidade de refinamento da mesma. O pós-processamento representa a aplicação das definições sobre o modelo, isto é, a simulação com a apresentação dos resultados, que são expressos tanto em tensões como em deformações por meio de mapas cromáticos de distribuição das mesmas, que quantificam as regiões. Existem programas específicos e exclusivos de análise por elementos finitos em uma categoria conhecida como engenharia auxiliada por computador (CAE). Com base nessas informações, o analista decide pela modificação da geometria, aplicação de novo material ou modificação do mesmo, redefinição dos parâmetros da malha ou refiná-la ainda mais, em um ciclo que suporta a tomada de decisão. A Figura 7 ilustra essas fases durante o processo FEA para tensões e de análise de esforços mecânicos.

Figura 7 – Sequência para o processo de FEA.



Fonte: Do autor (2020).

3.4 Propriedades mecânicas dos materiais para a análise das tensões

O inserimento das propriedades do material no aplicativo FEA depende do tipo de simulação e das características interessadas, tais informações podem ser obtidas a partir de fichas técnicas de materiais conhecidos ou de vários ensaios experimentais padrões usados para determinar as propriedades mecânicas do material específico e utilizadas para alimentar a biblioteca do material no *software*. Para a análise de tensões, quando um componente é submetido à cargas é obrigatório alimentar o sistema com as seguintes informações do material: resistência à tração, limite de proporcionalidade, módulo de elasticidade, razão ou coeficiente de Poisson e densidade. A maior parte dessas informações podem ser obtidas a partir dos resultados do ensaio de tração de um corpo de prova do material (ISO EN 527, 2012; ASTM D638, 2014), o qual é produzido usando medidas e geometria padrão. O corpo de prova é fixado à máquina de ensaio de tração, a qual mede a deformação do mesmo enquanto a força de tração axial aumenta até a sua ruptura criando um diagrama chamado curva de tensão-deformação (σ - ϵ), no qual a tensão ou resistência nominal é dada pela razão entre a carga aplicada (F) e a seção inicial da amostra (A_0), conforme Equação 7:

$$\sigma = \frac{F}{A_0}, \quad (7)$$

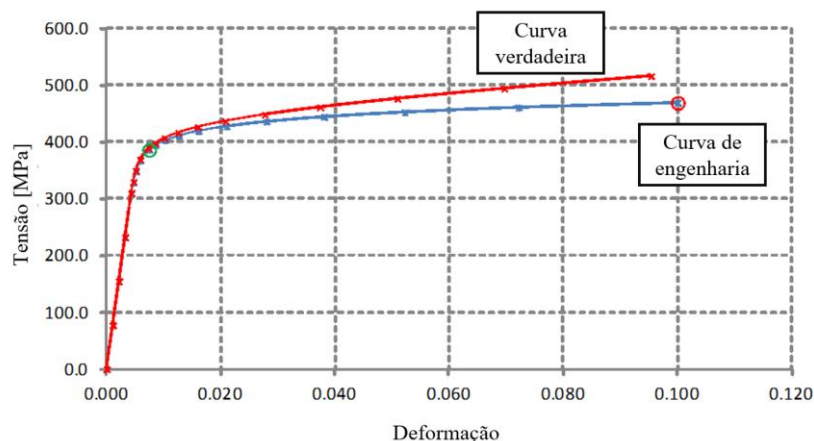
e a deformação nominal é dada pela razão entre o alongamento total (ΔL) e o comprimento da amostra inicial (L_0), como indicado na Equação 8:

$$\varepsilon = \frac{(L-L_0)}{L_0} = \frac{\Delta L}{L_0}. \quad (8)$$

A deformação ou alongamento é uma quantidade adimensional (mm/mm) e, em alguns casos, pode ser conveniente expressa como uma porcentagem. Para isso, basta multiplicar o valor medido por 100 e adicionar o símbolo de %. Desse modo, uma tensão de $\varepsilon = 0,1$ corresponde a um alongamento de 10%.

Nota-se que a tensão nominal não coincide com a que está realmente atuando devido à estrição, na qual o material diminui a sua seção durante o escoamento na mesma zona onde começa a ceder e a seção inicial (A_0) diminui. Conseqüentemente, a tensão efetiva passa a ser maior do que a que ocorre durante o início da aplicação da força, pelo efeito Poisson sendo esta diferença um valor insignificante enquanto o material permanecer na faixa elástica. As tensões e deformações nominais mostradas no diagrama também são chamadas de engenharia. Por outro lado, as tensões e deformações verdadeiras consideram que as dimensões são valores instantâneos e assume que o volume do corpo de prova se conserva e a deformação ocorre uniformemente. Portanto, em um ensaio de tração, a tensão verdadeira é maior que a tensão de engenharia e a deformação verdadeira é menor que a deformação de engenharia. Assim, um ponto que define a verdadeira curva de tensão-deformação é deslocado para cima e à esquerda, se comparada com a curva de tensão e deformação de engenharia, conforme Figura 8.

Figura 8 – Diferença entre as curvas verdadeira ou real e de engenharia.



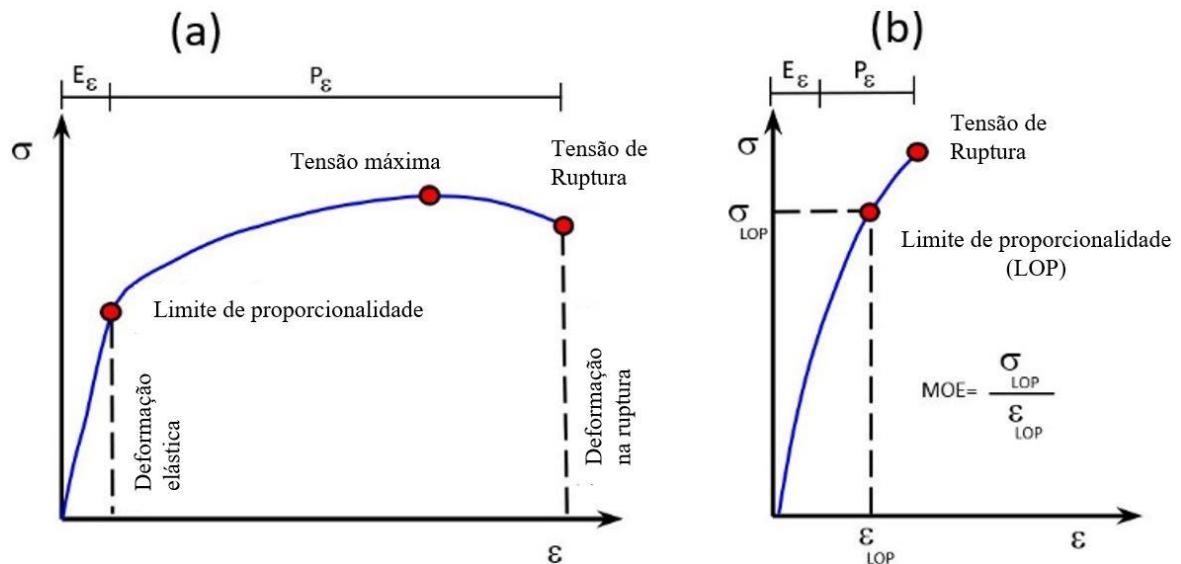
Fonte: Do autor (2020).

A razão ou coeficiente de Poisson (ν) é a relação entre a deformação transversal (ϵ_{transv}) e o alongamento axial (ϵ) onde ocorre a estrição resultando em um valor adimensional, apresentada na Equação 9:

$$\nu = \frac{\epsilon_{transv}}{\epsilon}. \quad (9)$$

O diagrama da tensão-deformação permite distinguir duas categorias de materiais: o dúctil (FIGURA 9a), que se rompe com grandes valores de deformação (aços de baixo carbono, alguns polímeros e alumínio) e o frágil (FIGURA 9b), que se rompe com valores quase nulos de deformação (ferro fundido, materiais cerâmicos e alguns polímeros).

Figura 9 – Curvas típicas para materiais dúcteis e frágeis.



Legenda: A Figura 9a mostra uma grande deformação plástica, o que representa uma curva típica de um material dúctil; a Figura 9b mostra uma pequena deformação plástica, o que representa uma curva típica de um material frágil.

Fonte: Do autor (2020).

O comportamento do material em relação às forças a que está sujeito e às deformações que surgem é definido como elástico ($E\epsilon$) e plástico ($P\epsilon$). A primeira parte do diagrama de tensão-deformação (σ - ϵ) geralmente é aproximada a uma linha reta. Nesse caso, o material possui um comportamento elástico-linear no qual as deformações medidas são diretamente proporcionais às tensões atuantes e as deformações se cancelam quando a carga cessa. A relação entre tensão aplicada e deformação elástica, na zona elástica é uma constante típica do material

chamada módulo de elasticidade (MOE) ou módulo de Young E, e é definida conforme a Equação 10:

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{\Delta\sigma}{\Delta\epsilon}. \quad (10)$$

Outro ensaio mecânico importante é o teste de impacto, que indica a quantidade de energia que um material pode absorver antes da fratura de modo instantâneo, na forma de colisão. Em um ensaio de impacto um pêndulo é liberado de uma posição mais alta e atinge o corpo de prova na parte inferior da sua trajetória. A energia absorvida durante o impacto pode ser deduzida da altura que o pêndulo oscila após o impacto. A principal diferença entre os métodos de ensaio Charpy e Izod está na maneira como o corpo de prova é posicionado. A quantidade de energia que um material é capaz de absorver, antes da fratura em um impacto está diretamente relacionada com a tenacidade deste material. Este valor representa a relação entre o módulo de elasticidade e a deformação plástica do material, a qual corresponde a integral de toda a curva de tensão-deformação. A integral somente da zona elástica do gráfico corresponde à resiliência do material, que é a capacidade de absorver energia sem se deformar de modo permanente.

4 MATERIAL E MÉTODOS

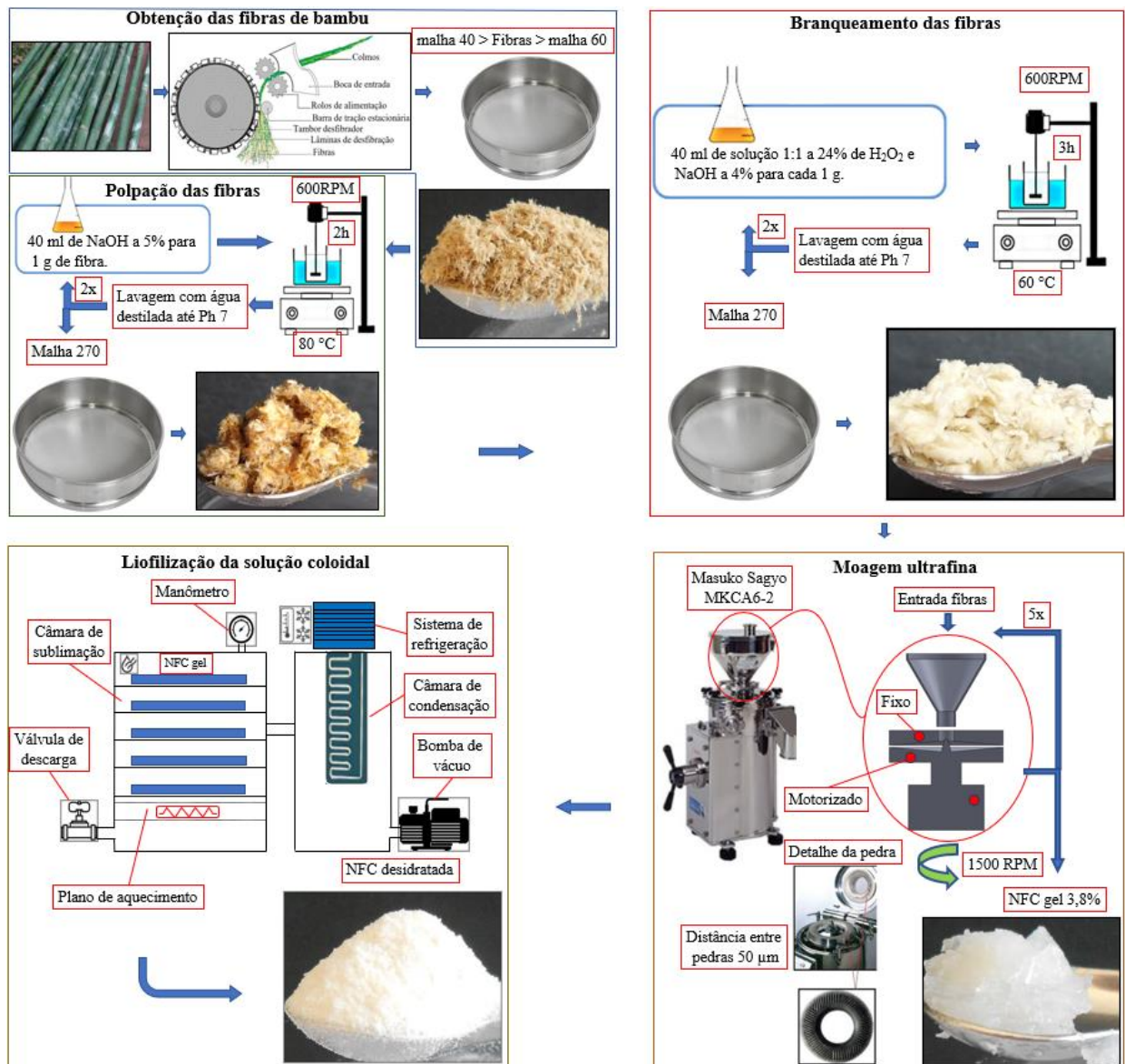
Para o atendimento aos objetivos propostos, o desenvolvimento deste projeto foi dividido em 3 etapas: obtenção da celulose nanofibrilada a partir do bambu, preparação dos corpos de prova e ensaio experimental dos mesmos; análise numérica com o modelo matemático dos corpos de prova de modo a comparar os resultados das simulações com os resultados dos ensaios experimentais e a aplicação da simulação numérica em um componente constituído por um compósito selecionado inserido em um sistema mecânico em um estudo de caso. Todos os processos foram baseados em trabalhos anteriores de modo a obter um compósito com boa tenacidade sem perdas significativas no seu módulo de elasticidade.

4.1 Obtenção da celulose nanofibrilada e dos corpos de prova

O bambu utilizado foi a espécie *Bambusa Vulgaris*, colhida em Lavras, estado de Minas Gerais, Brasil. A região está localizada a 919 m acima do nível do mar e de acordo com a

classificação de Koppen e Geiger, o clima é subtropical úmido (Cwa), com temperatura média anual de 19,9 °C e pluviosidade média anual de 1486 mm. A planta, com aproximadamente 3 anos de idade foi cortada no verão de 2018 e os colmos superiores foram moídos e passados por uma peneira de malha 40 (abertura de 0,420 mm) com uma retenção de malha 60 (abertura de 0,250 mm). O tratamento alcalino de polpação foi realizado em 2 ciclos consecutivos sem secagem. A cada ciclo, o material foi colocado sob agitação mecânica constante a 600 rpm com 40 ml de NaOH a 5% para cada 1 g de fibra por 2 horas a uma temperatura de 80 °C, seguido por lavagem em água destilada até atingir Ph 7 e finalmente passou por uma peneira de malha 270 (abertura de 0,053 mm). O tratamento de branqueamento foi realizado em 2 ciclos consecutivos sem secagem. A cada ciclo, o material foi colocado sob agitação mecânica constante a 600 rpm, com 40 ml de solução 1:1 de H₂O₂ a 24% e NaOH a 4% para cada 1 g de material por 3 horas a uma temperatura de 60 °C, seguido de lavagem em água destilada até atingir Ph 7 e, finalmente, peneirado em malha de 270 (abertura de 0,053 mm). Depois disso, o material foi submetido a 5 passagens na máquina de moagem ultrafina Masuko Sangyo, modelo MKCA6-2, com distância de 50 µm entre as pedras, a 1500 rpm de velocidade e indicação da variação de corrente no amperímetro entre 3,75 A e 4,00 A. O resultado obtido foi uma solução coloidal de NFCs em forma de gel, com uma concentração de 3,8% de sólidos. Segundo R. C. Do Lago (2020), as cinco passagens na máquina de moagem ultrafina corresponderia a um diâmetro médio das nanofibrilas entre 10nm a 40nm. Para facilitar a mistura nas devidas proporções dos lotes mestres, a secagem foi efetuada por meio de liofilização (*freeze drying*) a fim de se evitar aglomerações no material. Para isso foi utilizado uma máquina Buchi modelo L200 com ciclo de liofilização a uma velocidade de congelamento controlada a 50 °C/h até -40 °C. Após o congelamento foi criado um vácuo (P = 0,086 mbar) e um primeiro ciclo de aquecimento com uma velocidade de de 5 °C/h até atingir a temperatura de -5 °C. Logo após, se iniciou um segundo ciclo de aquecimento com uma velocidade de 3 °C/h até atingir a temperatura de 20 °C. A Figura 10 apresenta o fluxograma da obtenção das NFCs como descrito, com os aspectos físicos de cada fase. Na imagem que indica NFC desidratada, esta foi moída somente para o efeito fotográfico.

Figura 10 – Fluxograma da obtenção das NFCs.



Fonte: Do autor (2020).

O PLA escolhido para esta pesquisa, 3251D da NatureWorks, indica uma maior capacidade de fluxo de fusão, o que facilita a moldagem de peças de paredes finas e se comporta de maneira estável quando fundido. Possui alta resistência e rigidez, com uma temperatura de transição vítrea relativamente alta em comparação com outros produtos à base de PLA produzidos pela mesma empresa. O PLA foi fornecido na forma de pó e a sua estrutura amorfa apresenta um grau de cristalinidade muito baixo, porque sua razão de isomeria L/D é de aproximadamente 98%/2%. A Tabela 2 apresenta as principais características do PLA utilizado.

Tabela 2 – Características gerais do PLA 3251D.

Características	Valores típicos
Resistência à tração	62 MPa
Deformação	3,5 %
Transição vítrea	65 °C
Temperatura de fusão	188-210 °C
Densidade	1,26 g/cm ³

Fonte: NatureWorks – 3251D Ficha técnica (2020).

Os compósitos de PLA formaram concentrações de reforço de NFC de 30%, 40% e 50% do seu peso (wt%) e com o uso de glicerol G5516, fornecido pela empresa Sigma-Aldrich, como plastificante na proporção de 4% e 6% do peso total. As quantidades foram pesadas e reservadas utilizando uma balança analítica Sartorius modelo Entris e cada lote foi processado por meio de reatores FKV 3L, vidro duplo, com banho de óleo termostaticado a 60 °C e agitador a 150 rpm de velocidade. Na sequência, o PLA foi colocada no reator com água deionizada na proporção de 5:1 do volume durante 20 minutos para a melhor dispersão do glicerol, o qual foi inserido em uma segunda fase e permaneceu nas mesmas condições de agitação durante outros 20 minutos para a sua completa homogeneização. Em uma terceira etapa foi inserido lentamente o volume de NFC na mistura ainda úmida. Segundo Correia (2015), como as ligações de hidrogênio nas NFCs são formadas entre as nanofibrilas no processo de secagem é comum a formação de aglomerados difíceis de serem separados mecanicamente. Por este motivo a reidratação. Porém, a presença do glicerol funcionando como surfactante tem a função de dispersão da NFC no PLA sem a sua aglomeração, conforme Valerio et al. (2016). O material permaneceu em agitação mecânica nas mesmas condições por mais 80 minutos.

Vários corpos de prova dos compósitos foram criados, incluindo os constituídos por PLA puro utilizados para comparação. Essas proporções e processo de obtenção dos compósitos foram determinadas com base em referenciais teóricos e trabalhos anteriores (TEYMOORZADEH e RODRIGUE; FAZITA et al., 2015; SHANSHAN et al., 2017.; HERVY et al.; XUAN et al.; MENG et al., 2018; YANG et al., 2019; R. C. Do LAGO et al., 2020), de acordo com as propriedades mecânicas desejadas para o objetivo deste trabalho, a fim de se obter um material com o máximo de deformação plástica sem uma grande perda na sua resistência, como consequência o possível aumento da tenacidade. A moldagem por injeção foi usada para obter os corpos de prova na forma e dimensão padrão tipo I, para o ensaio de resistência à tração (ASTM D638, 2014) e na forma e dimensão padrão tipo 1^a, para o ensaio

de impacto IZOD com entalhe (UNI EN ISO 180, 2001; ASTM D256, 2010), na quantidade de 4 unidades para cada ensaio e para cada compósito. Para isso, os lotes mestres de cada compósito foram extrudados e peletizados na forma de grânulos com dimensão máxima de 2 mm, por meio de uma extrusora com peletizadora BPM modelo SB100 com velocidade do parafuso duplo extrusor de 50 rpm. Os grânulos peletizados foram deixados em repouso em ambiente seco durante 24 horas e antes de serem colocados no funil de injeção retornaram na estufa e permaneceram por 10 horas a uma temperatura de 60 °C e, logo após, injetados nos moldes duplos específicos por meio de uma injetora Arburg modelo 370E com velocidade de 10 cm/s. A Tabela 3 apresenta as condições de extrusão e injeção utilizados para os compósitos e PLA puro.

Tabela 3 – Condições de temperatura na extrusão e na injeção.

Extrusão						
Aquecedores	E1	E2	E3	E4	E5	E6
Temperatura (°C)	97	162	190	155	110	48

Injeção					
Aquecedores	I1	I2	I3	I4	Molde
Temperatura (°C)	97	162	180	202	80

Fonte: Do autor (2020).

A pressão e o tempo de recalque durante a injeção foram de 10 bar e 10 segundos. O molde foi pré-aquecido a 80 °C com tempo de resfriamento de 10 minutos. Assim, os corpos de prova foram criados e receberam uma designação, conforme Tabela 4.

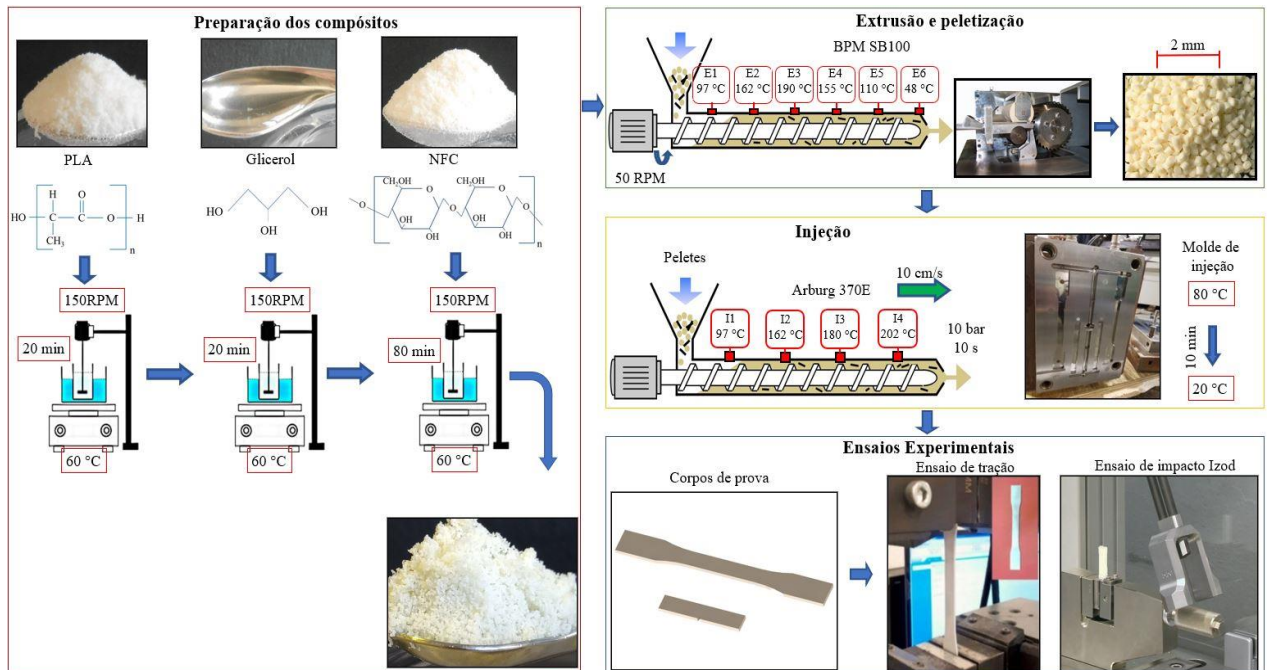
Tabela 4 – Designação dos corpos de prova e proporções em peso (wt%) dos compósitos produzidos.

Corpos de prova	PLA (%)	NFC (%)	Glicerol (%)
PLA Puro	100,0	0,0	0,0
PLANFC30/4	67,2	28,8	4,0
PLANFC30/6	65,8	28,2	6,0
PLANFC40/4	57,6	38,4	4,0
PLANFC40/6	56,4	37,6	6,0
PLANFC50/4	48,0	48,0	4,0
PLANFC50/6	47,0	47,0	6,0

Fonte: Do autor (2020).

As fases para a obtenção dos corpos de prova estão apresentadas na Figura 11. A fase de secagem e as temperaturas durante a extrusão e injeção do material foram importantes para a obtenção de bons resultados. A umidade durante a injeção pode acarretar a formação de bolhas no interior dos componentes e defeitos superficiais. A temperatura correta de processamento melhora a dispersão e evita a degradação das fases.

Figura 11 – Fluxograma da obtenção dos corpos de prova.



Fonte: Do autor (2020).

4.2 Ensaios térmicos, medições e análise das propriedades mecânicas

Após a preparação dos corpos de prova, estes foram medidos e pesados em uma balança analítica Sartorius modelo Entris, a fim de se estabelecer suas densidades e a seção a ser submetida aos ensaios. O primeiro teste realizado foi o ensaio de tração, a fim de se obter as curvas tensão-deformação média de cada compósito. Para isso foi utilizada uma máquina de teste universal Zwick Z010 com fundo de escala de 10 kN. O ensaio foi realizado com 50 mm/min de velocidade da trave, em um ambiente com 21 °C de temperatura e 55% de umidade relativa do ar. O principal objetivo desta etapa foi verificar os resultados e escolher os 3 compósitos que apresentaram a melhor relação entre o módulo de elasticidade com a deformação plástica até a ruptura. As características esperadas para o material são: módulo de elasticidade próximo a 3,0 GPa e deformação na ruptura mínima de 7%. Para os testes de

impacto e medição das temperaturas de transição vítrea foram realizados os ensaios de impacto Izod e a análise por calorimetria exploratória diferencial (DSC). Os testes de DSC, de acordo com a UNI EN ISO 11357:2016 foram efetuados em um instrumento Linseis STA PT-1000, onde amostras de aproximadamente 12 a 15 mg dos compósitos foram aquecidas, individualmente, à taxa de 10 °C/min, na faixa de 25 °C a 250 °C, dentro de uma caixa hermética com o uso do nitrogênio como gás de transporte sob fluxo constante de 50 mL/min, a fim de se medir a quantidade de energia necessária para estabelecer o equilíbrio térmico com um material inerte como referência. O grau de cristalinidade (X_c) dos compósitos foi estimado usando a entalpia de cristalização de cada amostra, onde foi aplicada a Equação 11 (QIAN et al., 2013).

$$X_c(\%) = \frac{\Delta H_c}{\Delta H_0 * X_{PLA}} * 100, \quad (11)$$

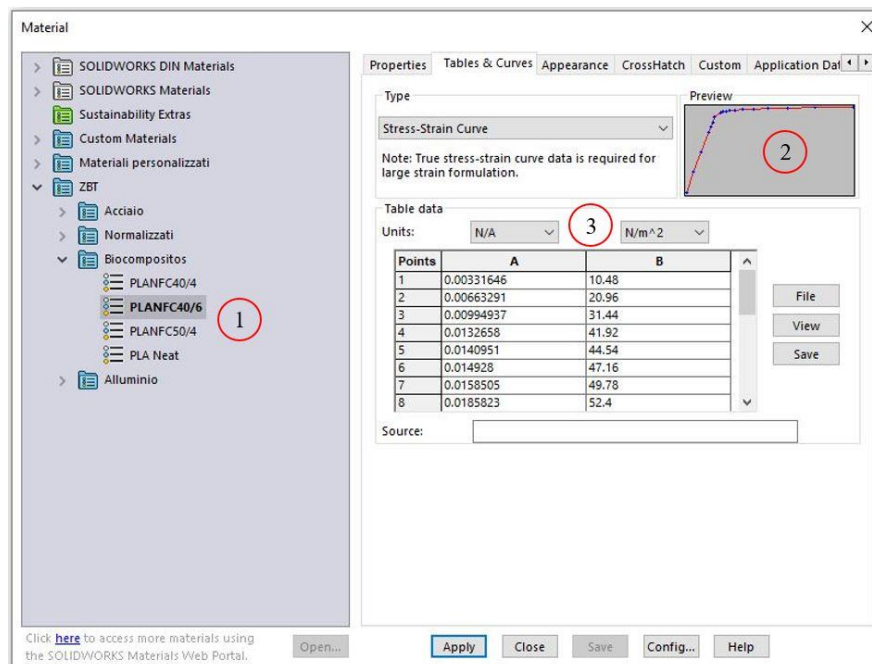
onde ΔH_c corresponde a entalpia de cristalização do compósito PLA/NFC; ΔH_0 corresponde ao valor de entalpia durante 100% de cristalização do PLA, o qual foi considerado 93,6 J/g; X_{PLA} corresponde à proporção em peso do PLA no compósito PLA/NFC.

O teste de impacto Izod foi realizado de acordo com a norma UNI EN ISO 180:2001 por meio do equipamento Zwick modelo HIT25P, fundo de escala 25 J (3,8 m/s) com temperatura ambiente de 22 °C. O entalhe em “V” nos corpos de prova foram usinados após a moldagem para evitar a concentração de tensões durante a injeção e solidificação. Para isso foi utilizado um dispositivo de entalhe JT Tohsi tipo TVH-603.

4.3 Análise por elementos finitos

Para a simulação numérica, a análise por elementos finitos foi aplicada para os 3 compósitos escolhidos juntamente com o PLA puro usado como controle. Previamente foi necessário criar o modelo matemático de cada corpo de prova. O *software* comercial Solidworks foi utilizado para tal, pois é capaz de realizar análise por elementos finitos com certa precisão e com boa aceitação no mercado. Para cada compósito foi inserida na biblioteca do programa a curva tensão-deformação média obtida. Aplicada as demais propriedades do material medidas anteriormente, como densidade e coeficiente de Poisson. A tela utilizada para o inserimento das curvas tensão-deformação de cada compósito está apresentada na Figura 12. A tela de inserimento das demais propriedades está apresentada na Figura 13.

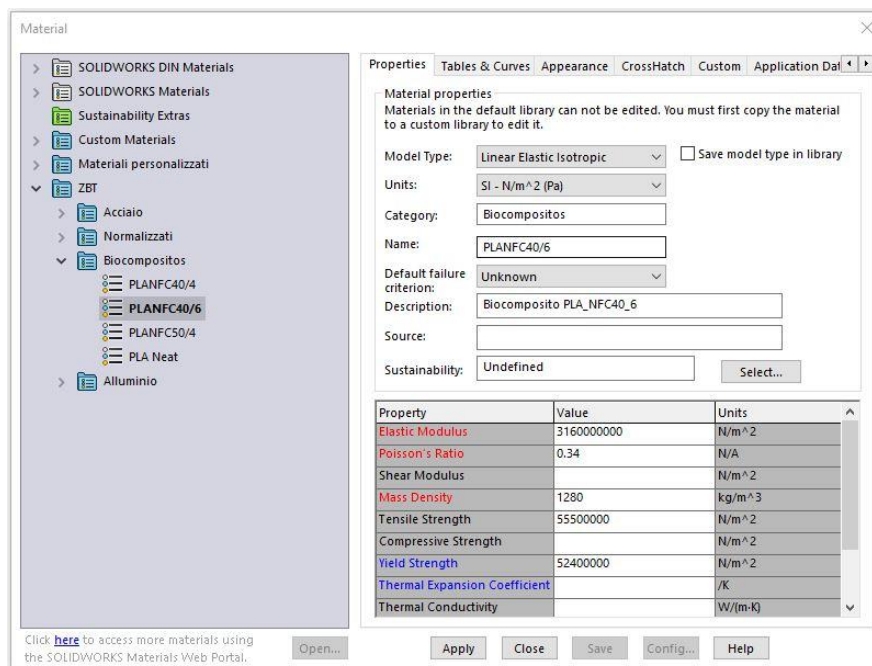
Figura 12 – Tela utilizada para o inserimento da curva tensão-deformação no *software* comercial. Curva do compósito PLANFC40/6.



Legenda: 1) Biblioteca com as propriedades dos compósitos; 2) Pré-visualização da curva; 3) Carregamento dos valores tensão-deformação com as unidades de medida.

Fonte: Do autor (2020).

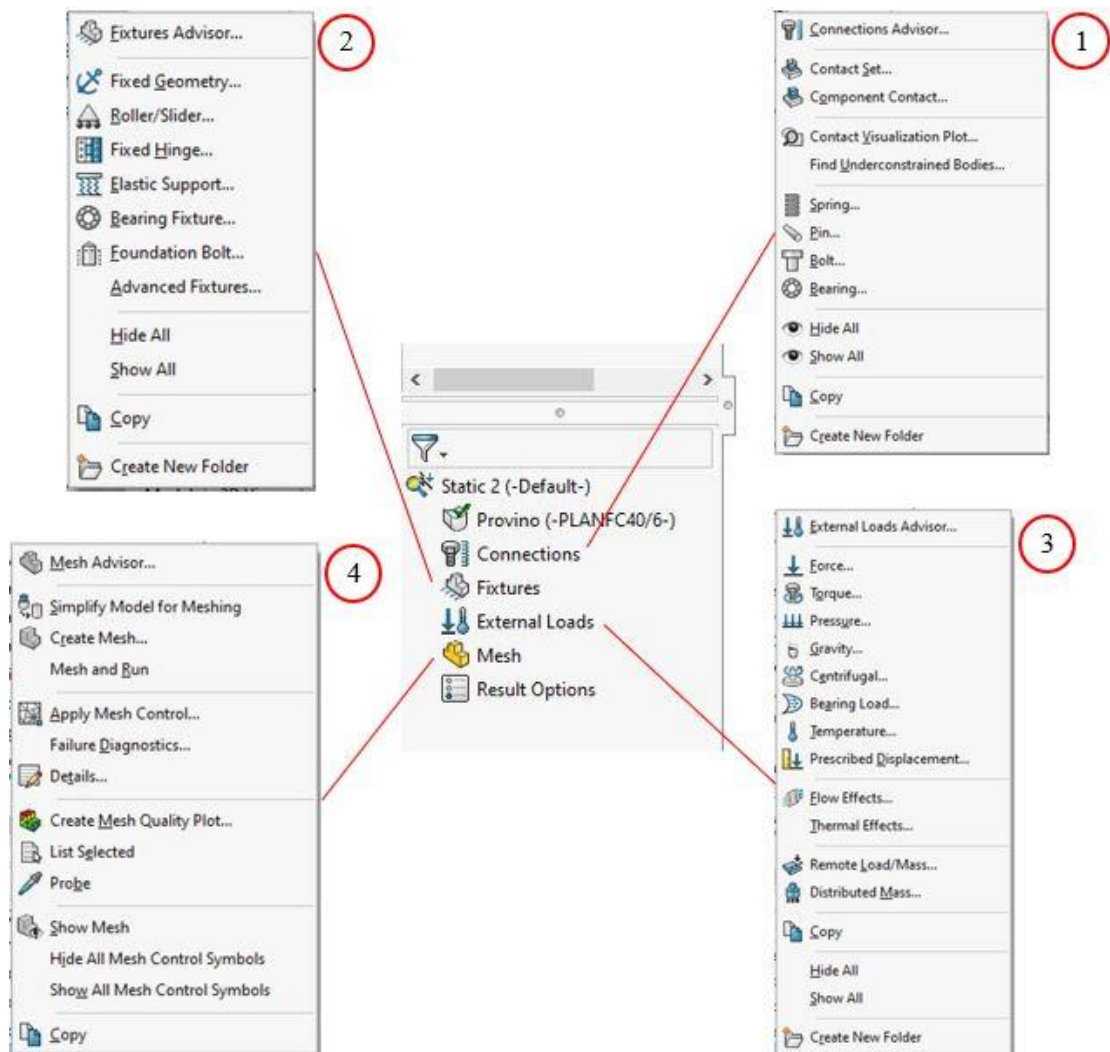
Figura 13 – Tela utilizada para o inserimento das propriedades do material. Propriedades do compósito PLANFC40/6.



Fonte: Do autor (2020).

Uma vez inseridas no programa todas as informações necessárias para a análise por elementos finitos, neste caso específico análise de tensões, se passa ao aplicativo de cálculo: simulações e análises estáticas. O modelo linear elástico é assumido, assim a rigidez permanece constante durante todos os valores da relação tensão-deformação na fase elástica. Como este trabalho se interessa pela falha do material como o seu limite de aplicabilidade, o critério de falha de von Mises foi escolhido como limite superior. As opções necessárias ao pré-processamento estão na ordem que devem ser inseridos os parâmetros. Se começa pela definição do material e com isso, todas as propriedades do material são utilizadas para a formação da matriz de rigidez na parte secundária do programa ou *back-end*. Uma vez confirmado o material, se parte para a segunda opção, para a definição das conexões que são os componentes em contato, quando se trata de sistemas ou desenho de conjuntos, onde se deseja conhecer não somente o comportamento individual de um componente, mas também o resultado da interação com os outros componentes. Durante as provas físicas no ensaio de tração, o corpo de prova é fixo pelas duas extremidades à máquina, mas como este processo não influencia os resultados e para a simplificação da geometria, não foram desenhadas as garras de fixação da máquina (NURHANIZA et al., 2010; SABAU et al., 2017; NAVEEN et al., 2019). Na sequência, a próxima fase é a definição das condições de contorno. A Figura 14 apresenta as opções de pré-processamento em detalhe.

Figura 14 – Opções sequenciais de pré-processamento.



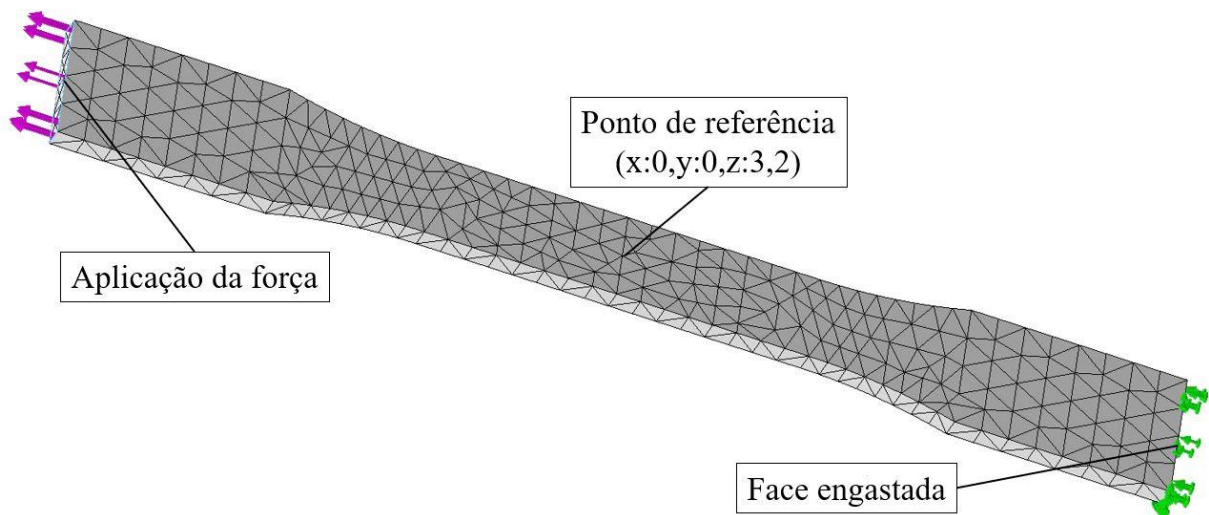
Legenda: 1) Opções de conexões; 2) Condições de contorno ou fixação; 3) Opção de aplicação das cargas; 4) Opção de construção da malha.

Fonte: Do autor (2020).

Condições de contorno é um conjunto de restrições adicionais para um problema que envolve equações diferenciais. O que corresponde na análise por elementos finitos às restrições na matriz deslocamento, que são as limitações de movimento, as quais podem ser fixas, rolantes e deslizantes. As direções podem ser determinadas dentro do modelo pela indicação de um objeto como linha, vértice, face ou superfície. O próximo passo, que pode também ser considerada como uma condição de contorno é a definição das cargas por tipo, quantificação e direção da aplicação. Estas, no *back-end* do programa, para a análise de tensões formam a matriz vetorial de forças. Essas cargas podem ser alocadas em uma única entidade geométrica do modelo, como no caso da limitação de movimentos ou distribuídas em várias entidades. As

condições de contorno de cargas e restrições de movimento passam a submeter o componente às ações de esforços de tração, compressão, torção e cisalhamento conforme são definidas. Finalmente, como a última etapa do pré-processamento se passa à fase de construção da malha. O SolidWorks possui um algoritmo interno que, com base na geometria da peça e no seu volume sugere uma malha de elementos tetraédricos de segunda ordem, com uma determinada distância entre nós dos vértices de modo automático. Mesmo assim é praxe executar o procedimento de convergência da malha, a fim de garantir resultados mais precisos usando um menor recurso computacional. Para isso foram criadas malhas no modelo preenchendo todo o seu volume, com elementos tetraédricos de segunda ordem reduzindo as distâncias entre os nós dos vértices a cada simulação e, portanto, aumentando a quantidade de nós. A tensão de von Mises foi controlada em um nó de referência escolhido ($x: 0; y: 0; z: 3,2$) até a estabilização na variação dos seus valores (FIGURA 15).

Figura 15 – Condições de contorno do modelo matemático com malha tetraédrica.



Legenda: Para a convergência de malha, se utilizou a malha tetraédrica de segunda ordem, aplicou-se as condições de contorno (face engastada ou fixa), carga (aplicação da força de 1000 N) e determinou-se o ponto ou nó para o controle da variação de tensão enquanto se afina a malha em cada ciclo.

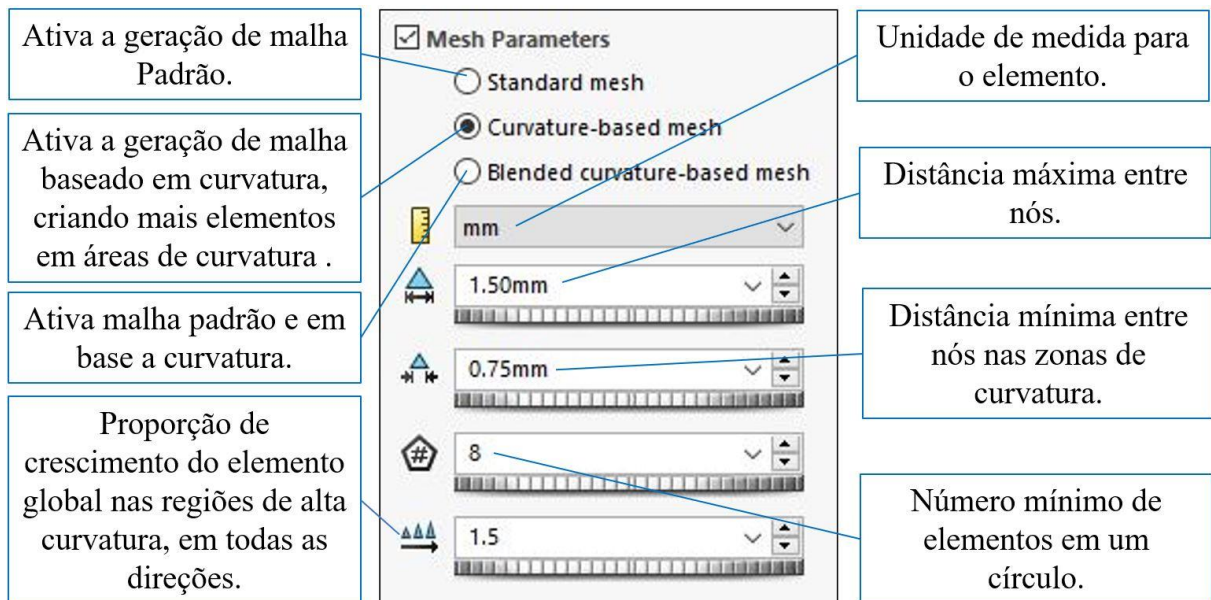
Fonte: Do autor (2020).

Para registrar esses valores foi utilizada uma planilha eletrônica, onde para cada distância entre os nós começando por 10 mm, o respectivo valor da tensão encontrado no ponto de referência era também registrado, com a repetição do ciclo de simulações a cada decréscimo de 0,5 mm na distância. Após a convergência e com o valor definido da malha, se inicia a

simulação com a alteração dos valores de carga para cada compósito, obtendo-se assim, os primeiros resultados para cada análise.

A força ou carga aplicada em cada simulação se encontrava logo abaixo do limite da zona elástica (limite de proporcionalidade ou escoamento - LOP) de cada material, mantendo-o sempre na zona elástica. O elemento de malha tetraédrico é utilizado no Solidworks quase que exclusivamente. Por meio do aplicativo *Plastics management* do Solidworks é possível também a construção de malhas hexaédricas como opção. As malhas hexaédricas possuem maior aplicação na análise de fluidos. O *software* utilizado possui maiores possibilidades de refinamento de malha com o elemento tetraédrico e disponibiliza várias formas de aumentar o grau de liberdade desse elemento, de modo a obter vários e diferentes níveis de refinamento, em base à aplicação. A Figura 16 apresenta estas opções.

Figura 16 – Opções de refinamento da malha tetraédrica no SolidWorks.



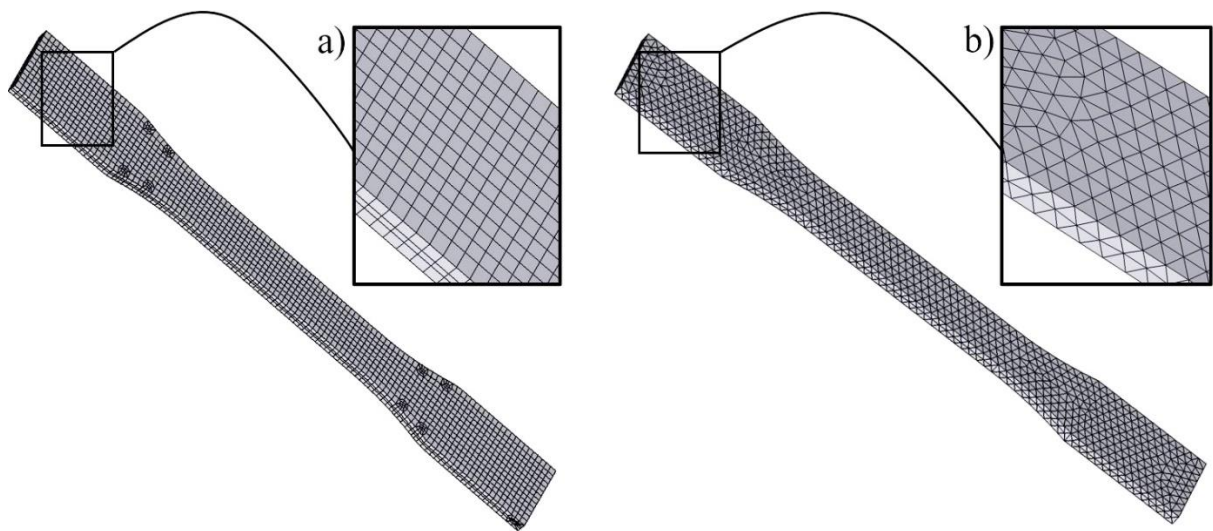
Legenda: No programa é possível aplicar estas propriedades de malha tetraédrica para todo o modelo ou então, aplicar em cada entidade geométrica selecionada, diferentes configurações de malha.

Fonte: Do autor (2020).

Os elementos tetraédricos foram substituído por elementos hexaédricos para verificar possíveis desvios e comparar os efeitos do uso de ambos elementos. Os resultados da tensão de von Mises de cada corpo de prova foi comparado com os resultados dos testes físicos mantendo, para cada corpo de prova, a força aplicada correspondente.

O aplicativo FEA presente no SolidWorks, apesar de não ser um sistema CAE dedicado e não disponibilizar de uma grande quantidade e variedades de opções de elementos para a construção de malhas é capaz de resolver a maior parte dos problemas envolvendo MEF de modo eficiente e com boa precisão (AKIN, 2009). A geração de malha de um modelo sólido consiste em 2 etapas básicas. Na primeira fase, o gerador coloca os nós nos limites e essa fase chama-se geração de malha de superfície. Se a primeira fase for bem sucedida o gerador inicia a segunda fase chamada geração de malha do sólido, que consiste na criação da malha na parte interna preenchendo todo o volume. Para a criação de uma malha de elementos hexaédricos é necessário ativar a opção específica no aplicativo *Plastics management* do programa e transferir o modelo diretamente para a área de simulação. A Figura 17 apresenta a estrutura dos dois tipos de malhas no modelo do corpo de prova utilizado para o ensaio de tração, a Figura 17a malha hexaédrica e a Figura 17b malha tetraédrica.

Figura 17 – Estrutura das malhas hexaédricas e tetraédricas.



Legenda: Apresentação da estrutura dos dois tipos de malhas: a) malha hexaédrica e b) malha tetraédrica.
Fonte: Do autor (2020).

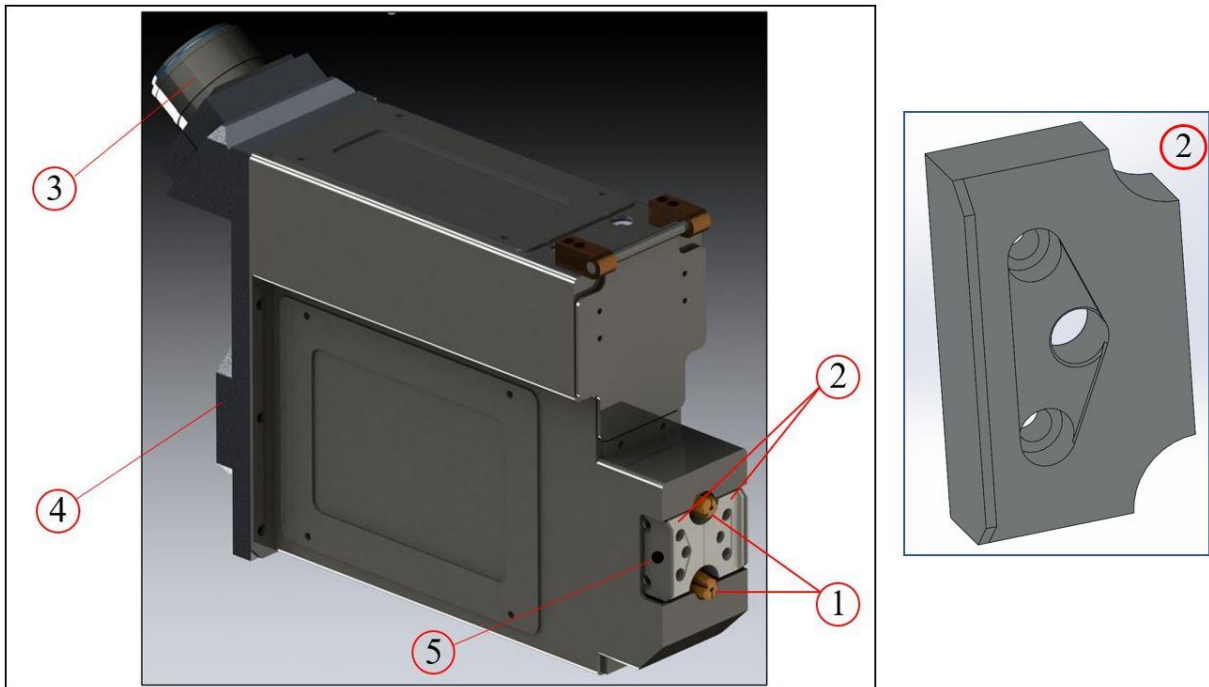
Para o refinamento de malhas com elementos tetraédricos, o modo mais prático é aplicar a malha tetraédrica com a distância entre nós dos vértices definida no processo de convergência da malha e escolher as áreas de maior interesse aplicando a mesma malha, porém com distância menor entre os nós produzindo uma quantidade maior de elementos naquelas áreas. No caso específico do SolidWorks, o programa utiliza, primeiramente, os resultados calculados em pontos especiais dos elementos chamados de pontos gaussianos ou pontos de quadratura, localizados dentro de cada elemento. Portanto, o *solver* de simulação extrapola os resultados

encontrados nos pontos gaussianos para o cálculo das tensões nos nós e após uma execução bem sucedida estes resultados são disponibilizados nas matrizes, com os resultados dos outros nós e, finalmente, dos elementos. Em uma simulação preliminar pode-se gerar uma malha de elementos tetraédricos com qualidade rascunho formada por elementos de primeira ordem, onde se obtém um resultado muito aproximativo, porém em um tempo muito breve. Estes elementos de primeira ordem dispõem somente de um ponto gaussiano no centro do seu volume. Os elementos tetraédricos de segunda ordem têm quatro pontos gaussianos. Como esses elementos são interconectados pelos nós, comumente cada nó pode receber valores ligeiramente diferentes vindos dos outros nós dos elementos aos quais se encontram acoplados. Como exemplo, se um nó é comum a três elementos receberá três valores muito próximos, mas provavelmente distintos. Neste caso, o elemento assume um valor único de tensão como a média aritmética da tensão dos pontos gaussianos. Portanto, as tensões de um elemento e a tensão em seus nós serão sempre diferentes. Uma diferença muito grande indica que a malha não é suficientemente refinada neste local. Sendo a qualidade da malha fundamental na precisão dos resultados, o programa utiliza duas verificações para aferir a qualidade dos elementos dentro da malha: verificação de proporção e pontos jacobianos. No caso de uma malha sólida, se alcança uma melhor precisão com a uniformidade dimensional dos elementos, ou seja, elementos com o mesmo comprimento das arestas, o qual encontra deformações durante a sua formação em áreas com pequenas arestas, geometrias curvadas e cantos pronunciados. A verificação de proporção controla a variação entre arestas dos elementos deformados com aquele teoricamente perfeito. Sendo assim, a proporção é definida como a razão entre a aresta mais longa e a normal mais curta relativa a um vértice oposto à face normalizada de um tetraedro perfeito. A verificação por pontos jacobianos tem como base um número de pontos traçados dentro de cada elemento. O programa atualmente disponibiliza a verificação jacobiana em 4, 16 e 29 pontos gaussianos ou nos nós. Os nós intermediários criados nas arestas de limite de um elemento são colocados na geometria real do modelo. Em limites muito pronunciados ou curvos estes acréscimos de nós podem ocasionar a geração de elementos distorcidos com arestas que se invadem, o que faz retornar um valor negativo da matriz jacobiana para este elemento. Conseqüentemente, o programa indica erro na formação da malha. Quanto maior a quantidade de pontos jacobianos, maior precisão se exigirá na construção da malha. O tempo de cálculo é diretamente proporcional à quantidade de nós e graus de liberdade que foram determinados para a construção da malha e dependem, principalmente, da complexidade da geometria do modelo, do seu volume e das condições de contorno envolvidas. O resultado aparece na forma do modelo

geométrico, onde os elementos são substituídos pelo gradiente cromático de distribuição das tensões em todas as regiões do componente.

Uma vez obtidos bons resultados nas análises por elementos finitos do modelo dos corpos de prova, na avaliação dos desvios entre os resultados dos ensaios físicos e das simulações foi possível buscar pela aplicação prática, tanto dos compósitos produzidos quanto do método de análise de tensões. Neste caso, o objetivo foi avaliar a substituição de um componente construído em liga de alumínio 1060 H12 por um componente construído com o compósito que apresentou as melhores características para a aplicação, ou seja, alto módulo de elasticidade e boa tenacidade. O componente em liga de alumínio 1060 H12 faz parte de uma ferramenta utilizada por um robô para aplicação de etiquetas duplas, por meio de soldagem em barras de aço, com o objetivo de identificá-las. Cada componente é fixado na parte frontal da ferramenta por dois parafusos M6 de cabeça cilíndrica, e os dois montados servem de reação à abertura das garras ou pinças, quando estas mantêm os pinos com as etiquetas inseridas durante o processo de presa, condução e soldagem dos mesmos. A primeira análise para as condições de aplicação do compósito proposto foi a temperatura na qual o componente seria utilizado. Para isso foi inserido próximo a um dos componentes um sensor de temperatura, termopar tipo k e conectado a um *datalog*, por meio do controlador lógico programável (CLP) do sistema, capaz de registrar durante os ciclos de trabalho a temperatura circundante ao componente. A Figura 18 apresenta o desenho da ferramenta de soldagem de etiquetas, os dois componentes em liga de alumínio 1060 H12 e o local onde foi posicionado o sensor termopar tipo k, para a medição de temperatura.

Figura 18 – Visão geral da ferramenta do robô para a soldagem de pinos com as etiquetas.

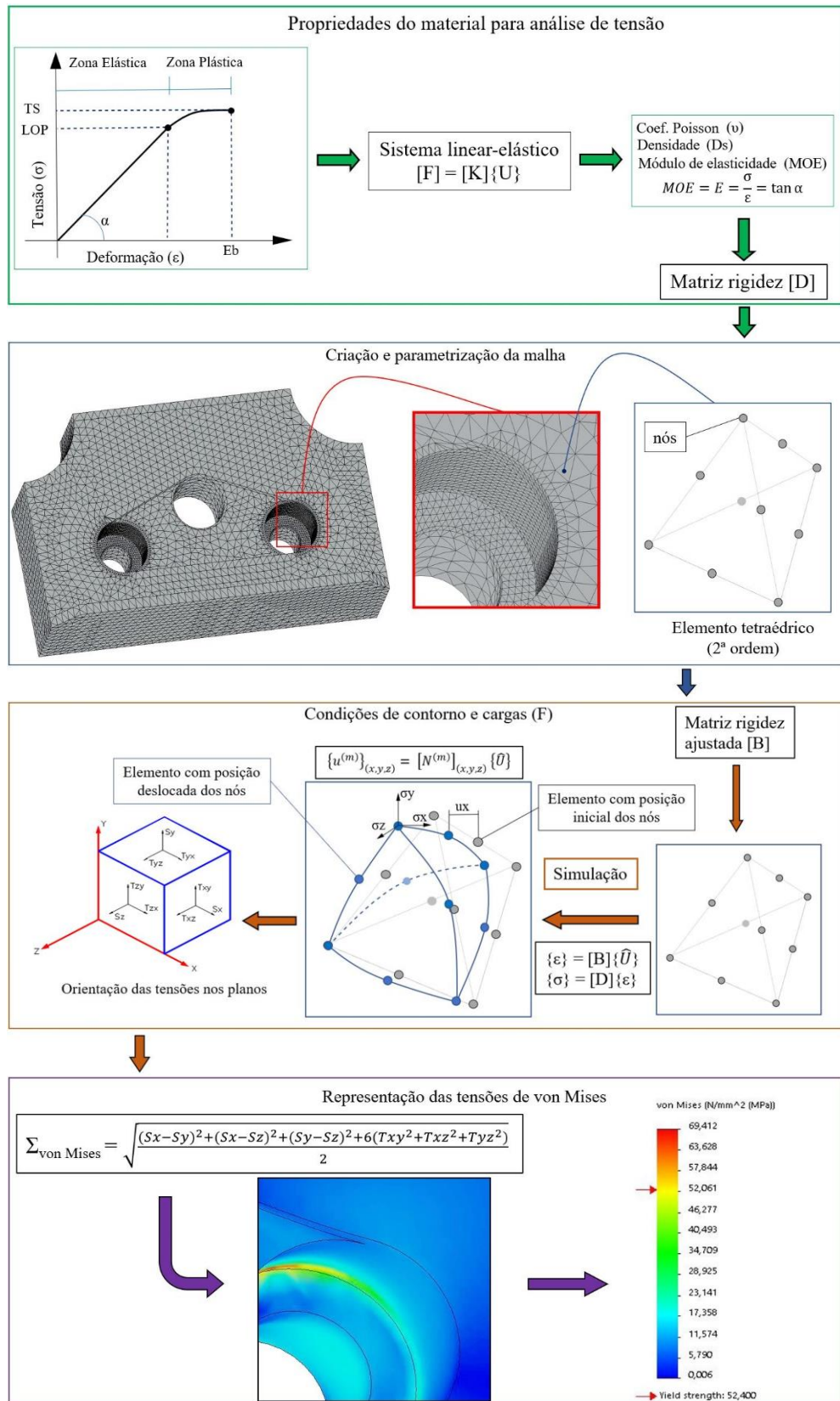


Legenda: 1) Pinças ou garras; 2) Componentes de reação em liga de alumínio 1060 H12 (componente ou peça a ser substituído pelo novo compósito); 3) Suporte para entrada de cabos de energia e sinal; 4) Placa de fixação ao pulso do robô; 5) Indicação do local onde foi fixado o termopar tipo k.

Fonte: Do autor (2020).

Uma vez verificado que as condições de temperatura e ambiente são aceitáveis para o uso do compósito, o modelo matemático do componente foi desenhado no computador e iniciado a sequência de análise por elementos finitos com o processo de convergência de malha, conforme descrito nesta seção. Inicialmente, como primeira simulação utilizou-se como material, no modelo, a própria liga de alumínio 1060 H12 de modo a confirmar por simulação numérica a sua capacidade de resistir às solicitações impostas durante a abertura e fechamento das garras. Logo após foi aplicado o compósito escolhido, como o material base para o mesmo modelo do componente. Com isso foi possível avaliar o seu comportamento, analisar as condições de falha, modificar a geometria do componente e buscar soluções que puderam indicar a viabilidade técnica para a substituição do material atual pelo compósito produzido. Todo o processo de análise e resultados para este caso de estudo estão descritos detalhadamente na seção 5.1 desta tese. A Figura 19 apresenta o fluxograma simplificado com a formação das matrizes de rigidez, deslocamento e vetores de força e fases de cálculo durante a aplicação da FEA, tanto para o componente construído com a liga de alumínio 1060 H12, quanto para o compósito produzido e escolhido para a análise de substituição.

Figura 19 – Fluxograma simplificado de cálculo para a análise de tensões de von Mises com a FEA no estudo de caso apresentado.



Fonte: Do autor (2020).

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os processos chaves para a obtenção de corpos de prova homogêneos, dos compósitos produzidos foram: evitar a aglomeração das NFCs em todo o processo e melhorar a sua dispersão no PLA, e o controle das temperaturas durante a extrusão e injeção dos compósitos. No controle da temperatura buscou-se tê-la alta suficiente para uma baixa viscosidade do PLA melhorando as condições de dispersão das NFCs e para o bom fluxo do compósito durante a extrusão e injeção, porém não tão alta, a ponto de evitar a degradação tanto do PLA como das NFCs. O calor alterou ligeiramente a cor do material para uma tonalidade mais escura, porém o resultado visivo foi homogêneo. O resfriamento lento dentro do molde, à taxa de 6 °C/min teve como objetivo inibir a formação de micro fissuras e o aumento, neste momento não desejado, do grau de cristalinidade do material. Os valores médios de resistência à tração, módulo de elasticidade, alongamento à ruptura, coeficiente de Poisson e densidade para cada compósito estão apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 – Valores médios e de desvio-padrão das propriedades obtidas nos ensaios de tração e nas medições da densidade aparente dos compósitos produzidos.

Corpos de prova	Seção (mm ²)	TS (MPa)	MOE (GPa)	Eb (%)	ν	Ds (g/cm ³)
PLA Puro	39,95	60,9 ±2,2	3,3 ±0,1	3,8 ±0,2	0,31 ±0,01	1,26 ±0,01
PLANFC30/4	39,88	55,2 ±1,8	2,9 ±0,1	6,3 ±0,3	0,32 ±0,01	1,27 ±0,01
PLANFC30/6	39,92	54,8 ±1,9	2,9 ±0,1	6,7 ±0,3	0,33 ±0,01	1,27 ±0,01
PLANFC40/4	39,98	56,1 ±2,3	3,2 ±0,1	7,4 ±0,3	0,33 ±0,01	1,28 ±0,01
PLANFC40/6	39,92	55,5 ±2,1	3,2 ±0,1	7,6 ±0,3	0,34 ±0,01	1,28 ±0,01
PLANFC50/4	39,96	59,5 ±2,8	3,2 ±0,1	6,9 ±0,5	0,33 ±0,01	1,28 ±0,01
PLANFC50/6	39,93	58,9 ±2,9	3,1 ±0,1	6,8 ±0,4	0,33 ±0,01	1,29 ±0,01

TS: Resistência à tração; MOE: Módulo de elasticidade;
Eb: Deformação na ruptura; ν : Coeficiente de Poisson; Ds: Densidade.

Legenda: Destaque para os compósitos que apresentaram o melhor compromisso entre resistência e deformação plástica: PLANFC40/4, PLANFC40/6 e PLANFC50/4.

Fonte: Do autor (2020).

O objetivo desta etapa foi obter materiais compósitos que apresentassem valores para o módulo de elasticidade em torno de 3,0 GPa e deformação na ruptura de 7% como valor mínimo. Portanto, os compósitos que apresentaram essas características foram: PLANFC40/4, PLANFC40/6 e PLANFC50/4.

O PLANFC40/6 apresentou, com os seus valores médios, melhor relação entre deformação na ruptura e módulo de elasticidade, em comparação com o PLA puro e outros compósitos. Essa importância na relação entre resistência e alongamento se explica porque,

além da resistência do material em se deformar elasticamente, sinalizada principalmente pelo alto módulo de elasticidade, se espera que este material também não seja tão frágil e reaja bem a esforços de impacto, no caso de uma colisão. Por isso, o alongamento do material também é importante, pois é um bom indício do aumento da tenacidade, que pode ser confirmado pelo teste de Impacto. Se espera que o material seja capaz de absorver uma grande energia tanto na fase elástica quanto na fase plástica, antes da sua fratura. Portanto, no PLANFC40/6, em comparação com o PLA puro, ocorreu um decréscimo aproximado de 3,1% no MOE, um decréscimo de ~8,9% no limite de resistência à tração (TS) e um acréscimo de ~101,3% na deformação plástica na ruptura (Eb), como indicado na Tabela 5.

Uma redução na resistência com um aumento no teor do reforço não é um resultado esperado ou preferível em compósitos. Esse fenômeno ocorre devido à diminuição das interconexões de transmissão de carga na matriz polimérica ou saturação da mesma, neste caso, agravadas principalmente pelo agente plastificante utilizado, com o objetivo de aumentar a deformação plástica do material e conseqüentemente o aumento na sua tenacidade. Como resultado, o compósito pode não ter características de dureza superiores às que seus componentes possuem individualmente, porém é um modo de adequar as propriedades do material quanto à funcionalidade e às características desejadas para o componente mecânico final. Padrões americanos ASTM 6400:2004, europeia ISO EN 13432:2002 e a brasileira ABNT NBR 15448:2008 permitem que o PLA e outros polímeros biodegradáveis agreguem outros polímeros/copolímeros ou mesmo material não biodegradável como agentes estabilizantes/plastificantes para melhorar sua qualidade em até 10% do seu peso final, sem que este perca a sua qualidade e classificação como material biodegradável. De qualquer forma, o objetivo do uso do plastificante era tornar o compósito menos frágil. Portanto, o aumento da deformação na ruptura deveria corresponder a um aumento da tenacidade do mesmo. A tabela 6 apresenta os principais valores para os testes de impacto Izod e DSC.

Tabela 6 – Valores médios e de desvio-padrão dos testes de impacto e DSC dos compósitos produzidos.

Corpos de prova	IS (kJ/m ²)	T _g (°C)	T _m (°C)	X _c (%)
PLA puro	6,4 ± 0,8	61,1	189,2	3,6
PLANFC30/4	10,0 ± 1,3	64,3	168,5	11,3
PLANFC30/6	10,1 ± 1,2	63,4	162,8	10,2
PLANFC40/4	11,2 ± 1,4	63,1	166,3	13,4
PLANFC40/6	11,6 ± 1,6	62,5	163,8	12,7
PLANFC50/4	10,1 ± 1,8	64,3	166,0	11,9
PLANFC50/6	10,0 ± 1,9	63,8	165,4	13,3

IS: Resistência ao impacto; T_g: Temperatura de transição vítrea;
T_m: Temperatura de fusão; X_c: Grau de cristalinidade.

Legenda: Destaque para os compósitos que apresentaram o melhor compromisso entre resistência e deformação plástica: PLANFC40/4, PLANFC40/6 e PLANFC50/4. Neste caso obtiveram os maiores valores para a tenacidade.

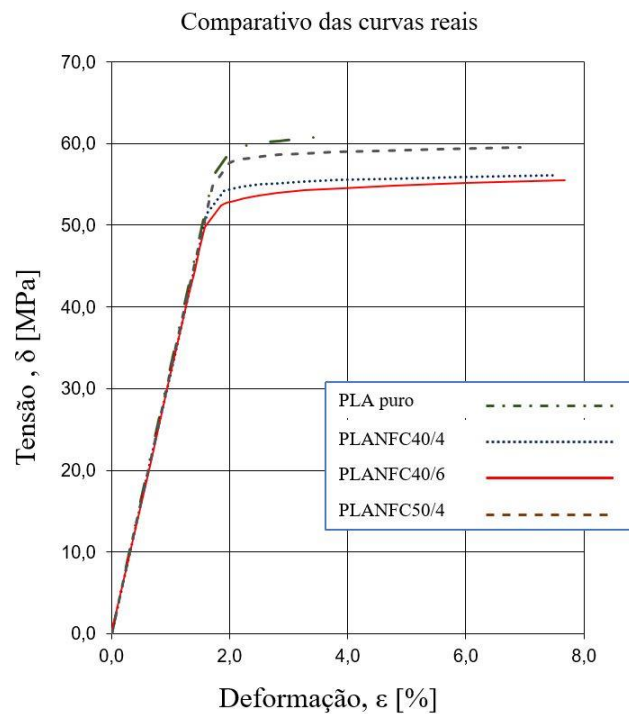
Fonte: Do autor (2020).

Outro efeito no uso de plastificantes em compósitos é a diminuição da temperatura de transição vítrea e do ponto de fusão. Sendo esta uma característica que limita o uso destes materiais em algumas aplicações, se esperava uma variação mínima desses valores. Na Tabela 6, se observam estas variações para cada amostra dos corpos de prova, que seguem a mesma relação entre reforço e o agente plastificante. A maior proporção do reforço aumenta ligeiramente a temperatura de transição vítrea e a maior proporção do agente plastificante tende a baixá-la. No entanto, esses valores são mais altos do que os encontrados para o PLA puro utilizado neste trabalho, resultado das interações do NFC dentro da matriz PLA. Por outro lado, a temperatura de fusão sofre um decréscimo, que chegou a uma diferença de 26,4 °C para o compósito PLANFC30/6 se comparada à temperatura de fusão encontrada para o PLA puro. Ainda na Tabela 6, se observa o aumento dos valores de resistência ao impacto (IS) com base na proporção do reforço e do agente plastificante, este aumento atingiu o seu valor máximo no compósito PLANFC40/6 apresentando uma variação de ~81,2% se comparado ao PLA puro. O aumento no grau de cristalinidade dos compósitos está ligada ao aumento da fase de reforço, pois o PLA utilizado neste trabalho formado basicamente pelo enantiômero L- (PLLA), o qual se traduz em um material considerado amorfo. Além disso, o resfriamento lento dos corpos de prova no interior do molde minimizaram o aumento do grau de cristalinidade do material durante a solidificação (CHEN et al., 2014).

As curvas tensão-deformação dos materiais PLANFC40/4, PLANFC40/6, PLANFC50/4 e também PLA puro (referência) foram inseridas no programa Solidworks como novos materiais e vinculadas aos seus respectivos modelos 3D. Além disso, foram carregadas as informações de densidade e coeficiente de Poisson para cada material, obtidas a partir dos ensaios e medições.

As curvas obtidas e inseridas no software são apresentadas sobrepostas na Figura 20. Depois disso foi possível começar com a definição das condições de contorno e as construções das malhas com a definição das estratégias de simulação por meio dos parâmetros das malhas.

Figura 20 – Curvas tensão-deformação dos ensaios de tração dos compósitos produzidos.



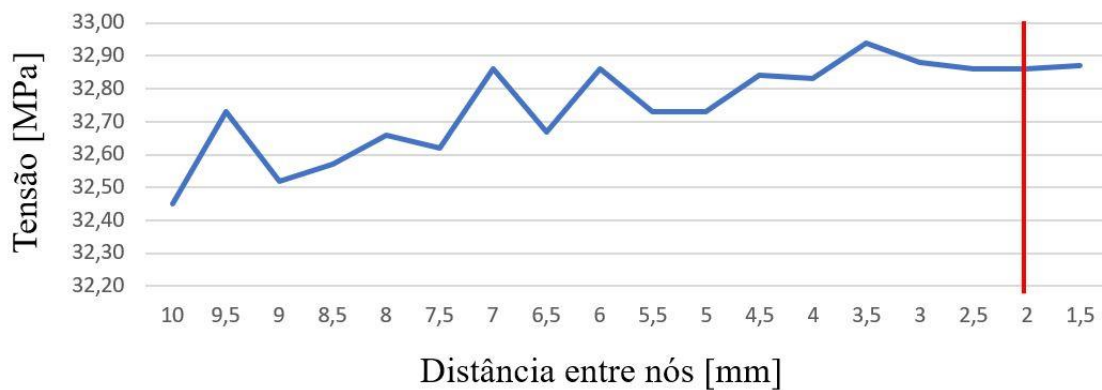
Legenda: Curvas dos ensaios de tração realizados nos compósitos PLANFC40/4, PLANFC40/6 e PLANFC50/4, além do PLA puro.

Fonte: Do autor (2020).

O *software* comercial SolidWorks possui um algoritmo interno que, com base na geometria e volume do componente a ser analisado, apresenta valores iniciais para os parâmetros de malha de modo automático. No entanto, o método de convergência de malha foi seguido utilizando a distância entre nós dos vértices como processo progressivo de afinamento de malha para se obter a convergência da mesma. Uma vez definido o ponto de referência na geometria (x: 0; y: 0; z: 3,2), seguiram-se para cada simulação valores de distância entre os nós cada vez menores, partindo de 10 mm com decréscimos de 0,5 mm, com os valores

correspondentes de tensão registrados em uma planilha eletrônica. Se percebe que, nas várias simulações os valores para a tensão sofrem grandes variações, ora para mais e ora para menos, mesmo mantendo os valores das condições de contorno sem alteração, até que, com o afinamento progressivo, esta se aproxima a um desvio aceitável para esses valores. Neste processo, as condições de contorno ou material não alteram os resultados de convergência de malha, pois a sua relação existe com a geometria e o volume do modelo e em como os elementos preenchem o mesmo. Para formas mais complexas esta convergência exige uma menor distância entre nós dos vértices e, portanto, maior quantidade de elementos e nós. Nesta fase foram utilizados somente elementos tetraédricos de segunda ordem. Os valores durante a convergência da malha são apresentadas na Figura 21, onde observou-se que a convergência se seguiu com a distância entre nós dos vértices em torno de 2 mm.

Figura 21 – Valores obtidos durante convergência de malha do corpo de prova de tração em função da distância entre nós dos vértices.



Fonte: Do autor (2020).

Alguns programas de análise por elementos finitos executam este processo tendo como entrada a quantidade de nós. Neste caso é compreensivo que a quantidade de nós sofrerá variação não somente com base na geometria do modelo, mas também com o seu volume. Na Figura 22 se apresenta as mesmas informações da convergência de malha da Figura 20, porém com a quantidade de nós correspondentes às distâncias, para a análise específica.

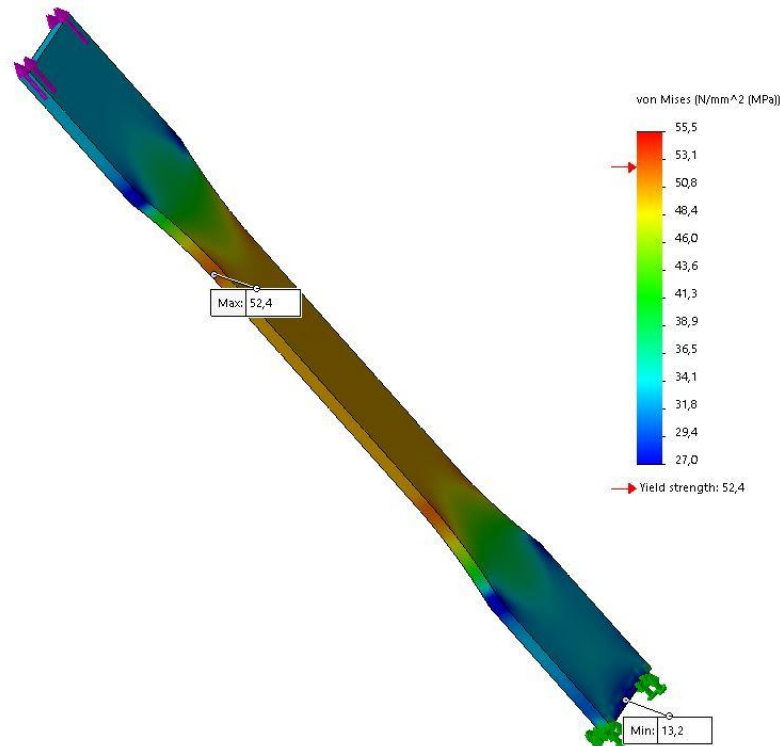
Figura 22 – Valores obtidos durante convergência de malha do corpo de prova de tração em função da quantidade de nós.



Fonte: Do autor (2020).

Observou-se que, para materiais pouco dúcteis a condição de von Mises de intensidade constante de tensão de cisalhamento em simulações estáticas, de modo geral é o mais próximo dos dados experimentais. Há outros casos, no entanto, que as condições de Tresca parecem estar em melhor concordância, quando por exemplo, o material sofre escoamento mesmo com um valor constante para a carga, no limite do mesmo. Assim, os dois métodos podem ser considerados como formulações igualmente aplicáveis. Para os estados de tensão uniaxial, os dois critérios são equivalentes e nos casos onde as condições de cargas são iguais em estados de tensão multiaxiais, o critério de Tresca prevê maior deformação plástica em comparação com o critério de von Mises, por ser mais conservador. O desvio máximo entre os dois modelos ocorre para o estado de cisalhamento puro. Nesse estado de tensão, com base no critério de Tresca, a falha ocorre a 87% do valor de tensão de von Mises. A Figura 23 apresenta a simulação no corpo de provas para o compósito PLANFC40/6, com a tensão na zona indicada, no limite do escoamento do material (LOP), ou seja, 52,4 MPa. Neste caso, para melhor visualização da distribuição das tensões no material a faixa de tensão de von Mises foi limitada entre 27 MPa, como a mínima até a tensão de ruptura do material (55,5 MPa). A Figura 24 seguinte, apresenta o ponto de fratura de um dos corpos de prova do mesmo compósito durante o ensaio de tração, onde a maior força aplicada atingiu a tensão de ruptura naquele ponto.

Figura 23 – Distribuição das tensões de von Mises na simulação para o corpo de prova PLANFC40/6.



Legenda: Distribuição das tensões, quando o valor do limite de escoamento (LOP) é atingido na zona indicada (Max: 52,4MPa). O aumento da tensão faz com que o material se deforme plasticamente até atingir a ruptura.

Fonte: Do autor (2020).

Figura 24 – Imagem da ruptura de um corpo de prova do compósito PLANFC40/6 durante o ensaio de tração.

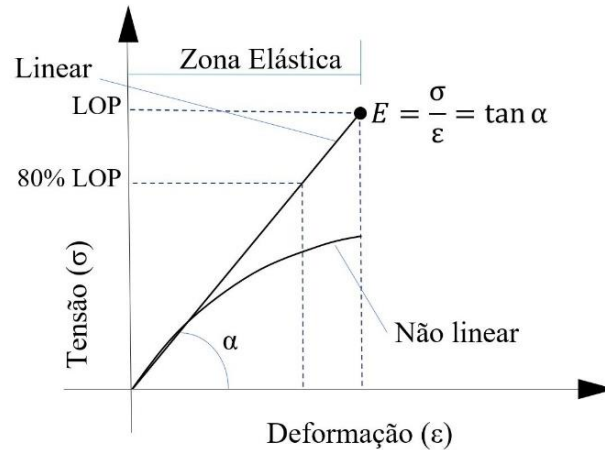


Fonte: Do autor (2020).

Nos parâmetros de malha foram utilizados dois tipos de elementos: tetraédrico e hexaédrico comparativamente, com a distância máxima entre os nós dos vértices definidos durante o processo de convergência de malha. O objetivo foi simular a aplicação de uma carga na zona elástica, correspondente a 80% do LOP (FIGURA 25), a fim de verificar os valores para as tensões de von Mises e comparar com os ensaios experimentais (Real) e entender os desvios entre ambos. Os valores obtidos usando malhas com elementos tetraédricos de segunda ordem (FEA (T)) e hexaédricos de segunda ordem (FEA (H)) são apresentados na Figura 26.

Todos esses são valores médios e apresentaram, entre amostras com a mesma concentração, um desvio não superior a 5%.

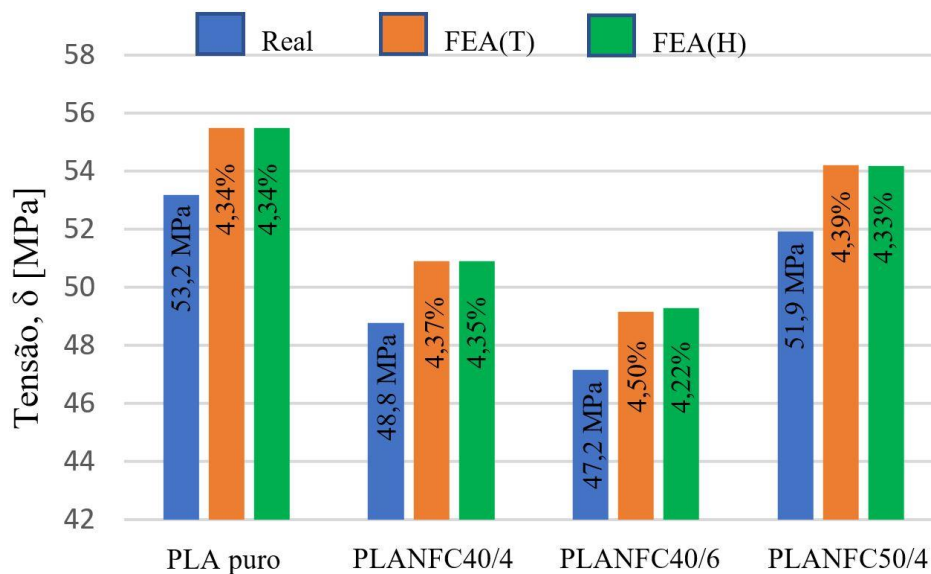
Figura 25 – Diferença entre a deformação elástica linear e a não linear.



Legenda: O limite de proporcionalidade ou escoamento (LOP) é o limite da zona elástica do material. O módulo de elasticidade (MOE) é a relação entre a tensão e a deformação (E) nesta zona e pode também ser representada pela sua inclinação média determinada pelo ângulo α .

Fonte: Do autor (2020).

Figura 26 – Valor médio da tensão em 80% do LOP dos ensaios experimentais (Real) e desvios destes valores obtidos nas simulações utilizando elementos tetraédricos (FEA(T)) e elementos hexaédricos (FEA(H)).



Legenda: Os desvios apresentados em valores percentuais são em relação aos valores reais obtidos nos ensaios físicos (Real). Nas simulações foram utilizados tanto elementos tetraédricos de segunda ordem (FEA(T)) quanto elementos hexaédricos de segunda ordem (FEA(H)) na formação das malhas e se manteve a distância entre nós dos vértices de 2,0 mm obtida no processo de convergência da malha.

Fonte: Do autor (2020).

Não foram observados desvios significativos entre os resultados dos elementos tetraédrico e hexaédrico, isso pode ser explicado devido à aplicação da força ser uniaxial e as tensões seguirem sempre um eixo principal, não ocorrendo forças de cisalhamento e à geometria simples do modelo. Portanto, não se verificou a necessidade de refinamento da malha e novas simulações. Segundo Sadrehaghghi (2020), não se pode afirmar que os elementos hexaédricos sejam mais precisos do que os elementos tetraédricos, mesmo tendo maior GDL, o que determina a melhor eficiência de um ou de outro elemento está no tipo de análise e na geometria do componente. Os elementos hexaédricos são utilizados como refinamento da malha quando há aplicação e distribuição de cargas em três dimensões, em sistemas não lineares e no caso da análise no comportamento de fluidos. Em muitos casos, continua Sadrehaghghi (2020), o simples refinamento da malha tetraédrica, em áreas específicas onde o problema se apresenta, pode dar uma resposta mais rápida e precisa. Os desvios encontrados entre as simulações e os ensaios experimentais podem ser considerados dentro de uma tolerância aceitável, pois, para os cálculos da força aplicada ao componente final, é adicionado um fator de segurança que pode variar entre 1,5 e 2,0, dependendo da geometria do componente e da sua função no sistema. Por outro lado, o desenho do componente 3D apresenta um modelo com uma estrutura ideal sem as imperfeições dimensionais e estruturais que poderiam advir do processo de injeção ou moldagem e na contração durante a solidificação.

Um material é definido como isotrópico, quando as suas propriedades são as mesmas em todas as direções. Deve-se notar que, em materiais cristalinos e semicristalinos, um único cristal da estrutura do material é tipicamente anisotrópico, no entanto, os materiais compostos de agregados de cristais podem ser isotrópicos, uma vez que os últimos são dispostos em uma orientação aleatória (praticamente em todas as direções). Os materiais amorfos são geralmente isotrópicos porque o distúrbio molecular se reproduz estatisticamente em todas as direções. Processos como rolagem, trefilação e forjamento podem tornar um material anisotrópico, porque causam uma orientação preferencial dos grãos da linha de cristal. Os materiais compósitos são frequentemente anisotrópicos, graças às diferentes propriedades mecânicas da matriz (agente aglutinante) e do reforço. Os compósitos utilizados nesta pesquisa apresentaram um baixo grau de cristalinidade e todos os materiais foram considerados, neste trabalho, homogêneos, isotrópicos e com comportamento elástico-linear (NURHANIZAR et al., 2010; NAVEE et al., 2019; SADREHAGHIGHI, 2020).

As propriedades finais de um compósito biopolimérico utilizando celulose nanofibrilada de biomassa apresentam uma grande variabilidade na resistência, o qual é influenciada pelas

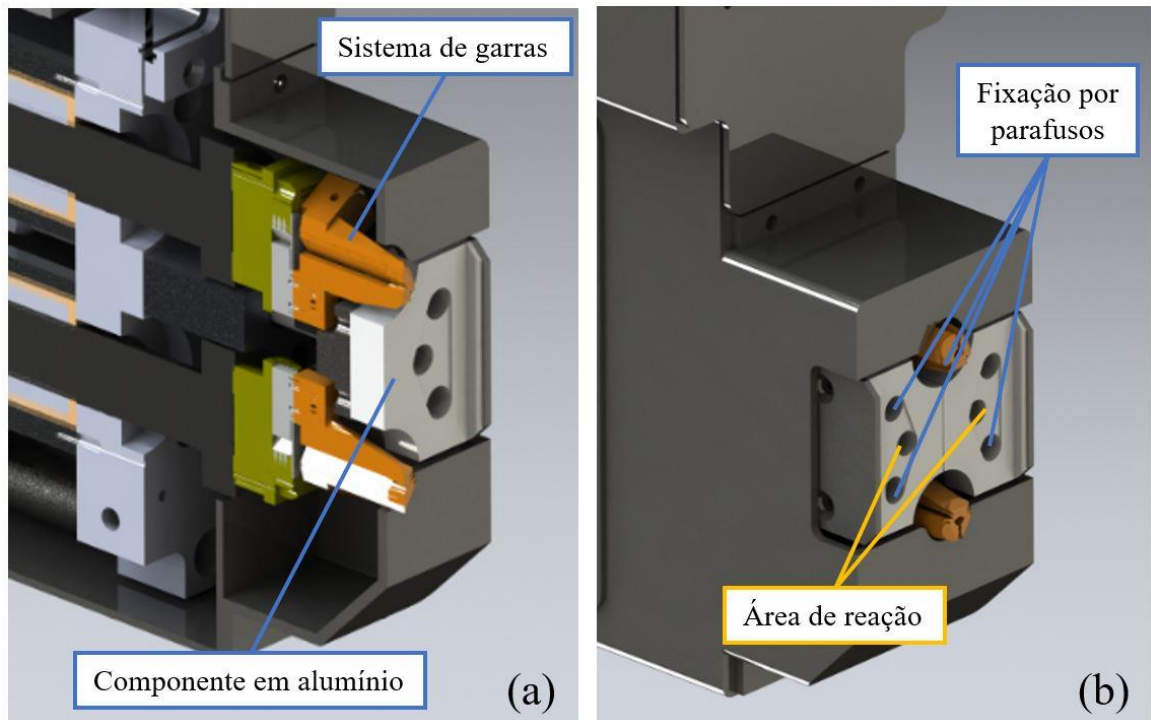
espécies de plantas, período de colheita, a que distância a fibra está dos nós nos colmos da planta e, principalmente, o modo como as fibras são preparadas e processadas. Outro procedimento que causa grande impacto no resultado final está na metodologia aplicada para a obtenção do bloco de material ou componente mecânico: moldagem por injeção, moldagem por sopro e *tape casting* (OKSMAN et al., 2016). No entanto, esta pesquisa buscou aplicar todas as técnicas de fácil disponibilidade que pudessem produzir componentes que mantivessem um bom equilíbrio entre módulo de elasticidade e alongamento da fase plástica, ou seja, dureza e tenacidade.

5.1 Comparação do compósito PLA/NFC em substituição à liga de alumínio: um estudo de caso na indústria

O objetivo deste estudo de caso foi avaliar e verificar a aplicação prática de um compósito PLA/NFC em substituição de um componente mecânico, produzido em liga de alumínio 1060 H12, com base em simulações utilizando a análise por elementos finitos.

Neste caso, dois componentes mecânicos iguais, produzidos em liga de alumínio 1060 H12, servem de reação à abertura de um sistema de garras duplas de uma pinça que é fixada ao pulso de um robô (FIGURA 27). Se espera que o material possa resistir a 1500 N de força (valor acrescido do fator de segurança de 1,5) em cada operação de aganchar e apoiar dois pinos, inseridos em duas etiquetas contra uma barra de aço, enquanto estes se soldam em um processo de dupla etiquetagem. O estudo visa avaliar a capacidade de substituição da liga de alumínio 1060 H12 pelo compósito PLA/NFC.

Figura 27 – Ferramenta do robô com o sistema de garras.

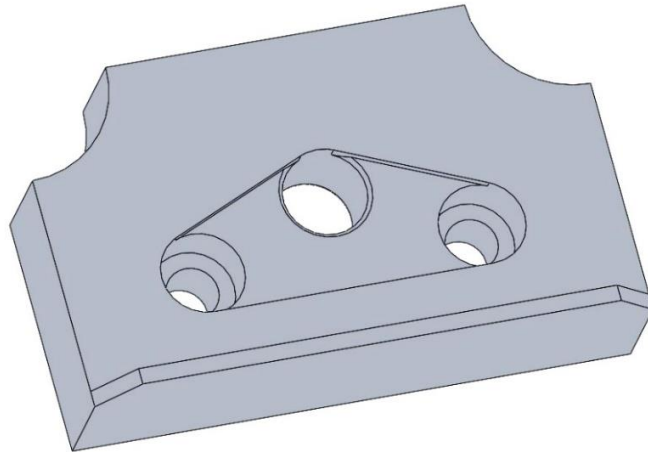


Legenda: Posicionamento dos componentes: (27a) vista em seção do Sistema de garras; (27b) componentes de reação construídos em liga de alumínio 1060 H12 (peça a ser substituída pelo compósito desenvolvido nesta tese), com indicação da área de reação e dos dois parafusos M6 de cabeça cilíndrica para a fixação.

Fonte: Do autor (2020).

A primeira análise realizada teve o objetivo de compreender a temperatura de trabalho na qual o componente seria submetido, uma vez que os polímeros têm uma temperatura de fusão muito menor que os metais e mostram um comportamento viscoelástico a partir da temperatura de transição vítrea, alterando de modo acentuado a sua resistência mecânica. Para esse fim, um termopar tipo k foi colocado próximo ao componente para registrar as temperaturas durante as operações, que puderam ser estabelecidas em uma faixa entre 10 °C e 50 °C. Além disso, verificou-se que o componente não possui contato com substâncias ou ambiente que possam modificar suas propriedades ou acelerar sua degradação. Logo após, iniciou-se o procedimento para simulação numérica com um modelo 3D do componente, como o atualmente em uso, construído em liga alumínio 1060 H12. Para isso foi utilizado o sistema CAD da Solidworks, conforme Figura 28.

Figura 28 – Modelo sólido do componente na posição frontal, com os alojamentos para parafusos M6 de cabeça cilíndrica.



Legenda: Na figura, com o componente visto na posição frontal, se observa os alojamentos para as cabeças cilíndricas dos parafusos M6 utilizados na fixação do componente à ferramenta do robô.

Fonte: Do autor (2020).

No aplicativo FEA do SolidWorks foi definido para o modelo matemático do componente o material liga de alumínio 1060 H12, o qual, com todas as suas propriedades mecânicas já consta na biblioteca de materiais do referido programa. A Tabela 7 apresenta algumas propriedades mecânicas comparativas entre o compósito PLANFC40/6 e a liga de alumínio 1060 H12.

Tabela 7 - Valores médios comparativos do material PLANFC40/6 e a liga de alumínio 1060 H12.

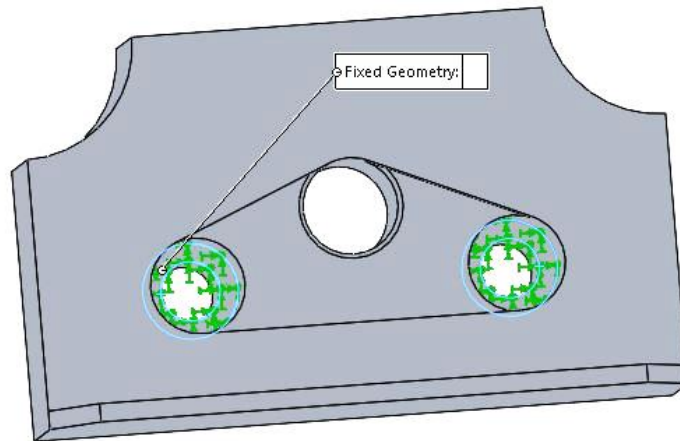
Materiais	TS (MPa)	MOE (GPa)	LOP (MPa)	Eb (%)	ν	Ds (g/cm ³)
PLANFC40/6	55,5	3,2	52,4	7,6	0,34	1,28
Alumínio 1060 H12	85,0	69,0	75,0	12,0	0,33	2,71

TS: Resistência à tração; MOE: Módulo de elasticidade; LOP: Limite de proporcionalidade
Eb: Deformação na ruptura; ν : Coeficiente de Poisson; Ds: Densidade.

Fonte: Do autor (2020).

Logo após foram definidas as condições de contorno. Neste caso, o que mantém o componente fixo e se contrapõe à força da pinça são os dois parafusos, onde a superfície de contato foi definida como as entidades fixas, conforme Figura 29.

Figura 29 – Modelo sólido na posição frontal com a aplicação das áreas fixas nos apoios dos parafusos de cabeça cilíndrica.

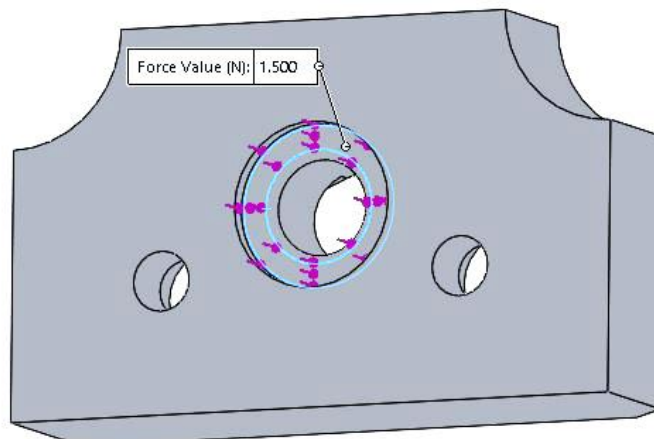


Legenda: As faces inferiores onde apoiam os parafusos foram selecionadas como zonas engastadas na condição de contorno, durante o pré-processamento para a simulação.

Fonte: Do autor (2020).

Na parte posterior do componente foi indicado a área onde a força de reação de 1500 N é aplicada, entre os dois pontos de fixação do componente, conforme Figura 30.

Figura 30 – Modelo sólido na posição traseira com a aplicação da força correspondente à reação de abertura das garras.



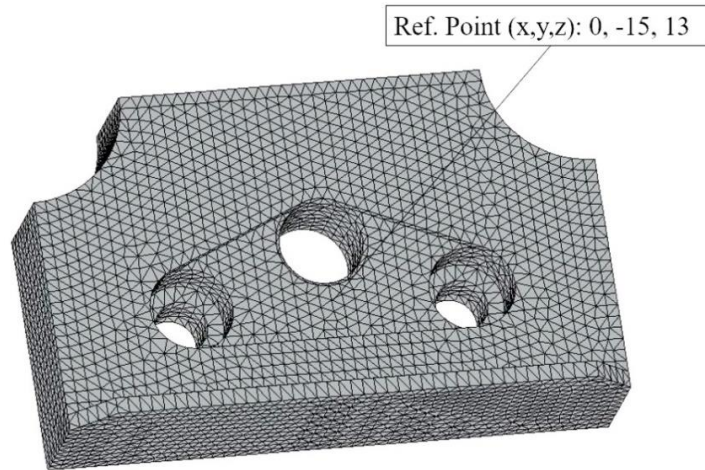
Legenda: Na zona indicada, parte traseira do componente foi aplicada a força máxima de reação à aberturas das garras. Nesta força foi acrescida um fator de segurança de 1,5.

Fonte: Do autor (2020).

Em seguida, efetuou-se a configuração dos parâmetros de malha com elementos tetraédricos de segunda ordem e executou-se os procedimentos de convergência de malha, com simulações contínuas a partir da distância de nós de 10 mm e com decréscimo de 0,5 mm a cada

simulação, até se obter uma convergência do valor de tensão de von Mises no ponto escolhido como referência ($x: 0; y: -15; z: 13$), conforme indicado na Figura 31.

Figura 31 – Modelo sólido com malha tetraédrica de segunda ordem com 1,5 mm de distância entre nós dos vértices.

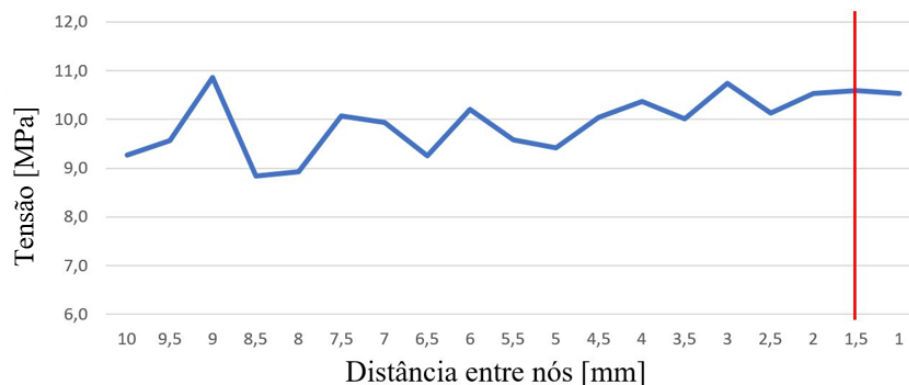


Legenda: O modelo, na posição frontal, se apresenta com o seu volume dividido pela malha tetraédrica de segunda ordem, onde aparece indicado o nó de referência para a coleta da tensão durante cada ciclo de afinamento da malha para obtenção da convergência na distância entre nós dos vértices.

Fonte: Do autor (2020).

Em uma planilha eletrônica foram registrados os valores da tensão para cada distância entre nós dos vértices até a convergência da mesma para valores com desvios mínimos, o que foi alcançado com a distância entre nós dos vértices de 1,5 mm, o que corresponde a um total de 103516 nós. As informações recolhidas são apresentadas na Figura 32.

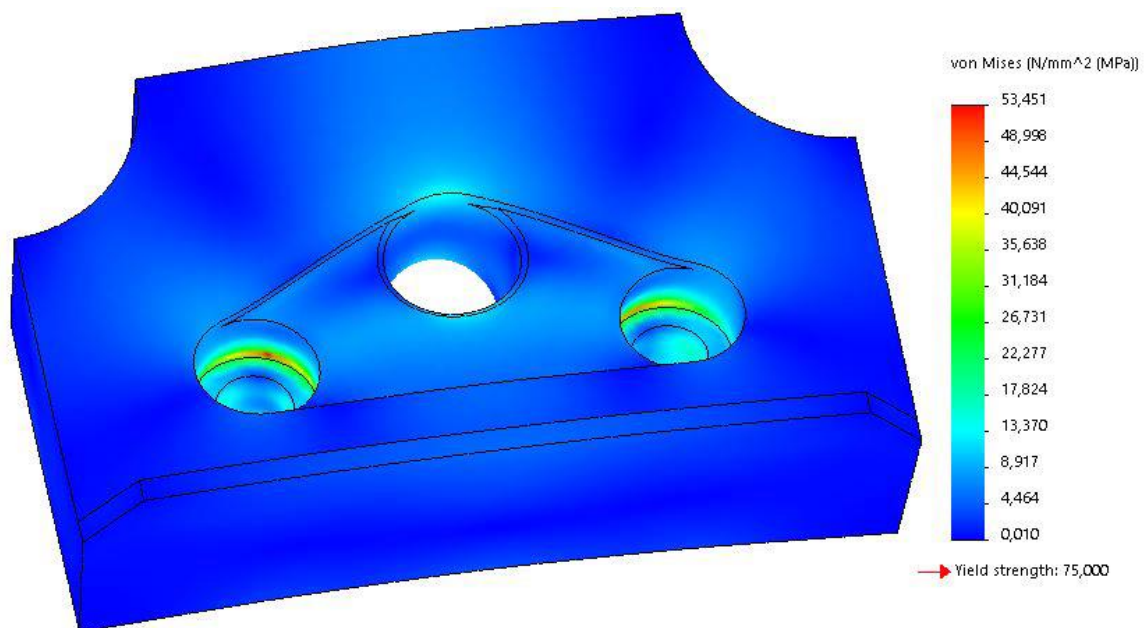
Figura 32 – Valores obtidos na convergência da malha em função da distância entre nós dos vértices.



Fonte: Do autor (2020).

Antes da simulação com o compósito que apresentou o melhor compromisso entre módulo de elasticidade e tenacidade, PLANCF40/6 foi realizada uma simulação com a liga de alumínio atualmente em uso. Com os parâmetros de malha definidos com o elemento tetraédrico de segunda ordem e a distância entre nós dos vértices de 1,5 mm, conforme determinado pelo procedimento de convergência de malha. Os valores obtidos por meio da simulação numérica estão apresentados na Figura 33 confirmando a capacidade do material em suportar o carregamento de 1500 N. Em razão da tensão de escoamento (75 MPa) ser superior à tensão máxima encontrada nas simulações (~53,4 MPa).

Figura 33 – Valores obtidos na simulação com a liga de alumínio 1060 H12 utilizando malha tetraédrica de segunda ordem, com distância entre nós dos vértices de 1,5 mm.



Legenda: O mapa cromático de distribuição das tensões, na posição frontal do componente, indica a sua maior intensidade na zona de rebaixo cilíndrico dos parafusos M6 de fixação, porém a tensão máxima (~53,4 MPa) se encontra abaixo da tensão limite de von Mises (75 MPa), não indicando deformação permanente.

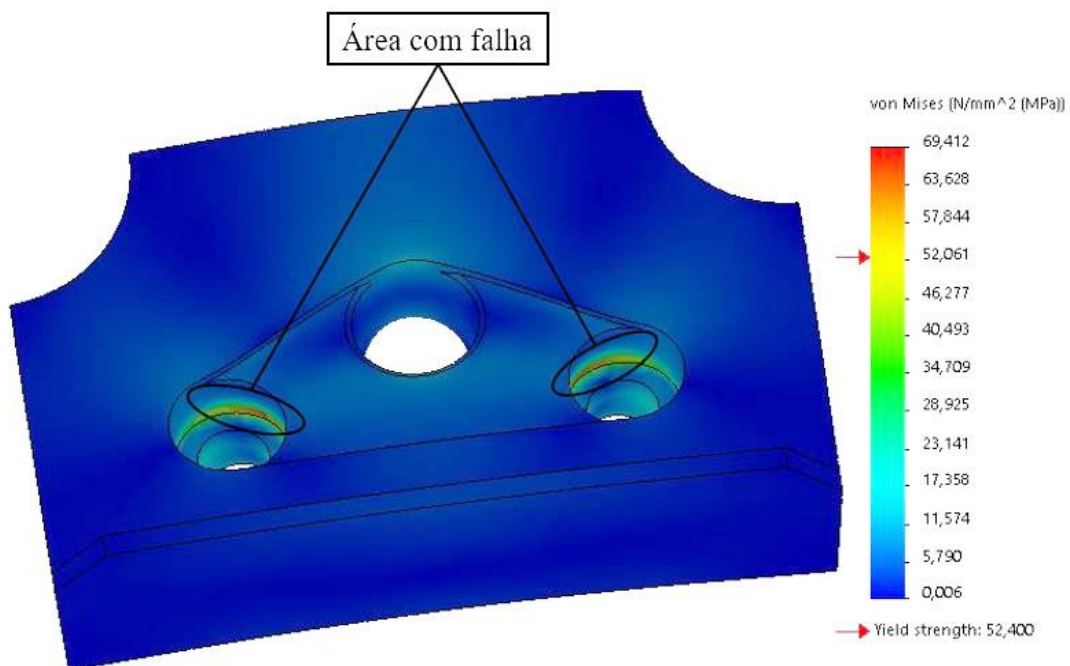
Fonte: Do autor (2020).

Com isso, o esforço máximo ao qual o material foi submetido, já considerado o fator de segurança ficou dentro da zona elástica do material, evitando-se assim a falha, que seria a deformação permanente do componente em análise. O fator de segurança é um número maior que 1 e que multiplicado pela carga de trabalho determina a força máxima admissível em um componente submetido a esforços de tensão, o qual permite que o sistema ou componente seja intencionalmente construído muito mais resistente do que o necessário para o seu uso normal.

Isto permite situações de emergência, cargas inesperadas, mau uso ou degradação, o que acarreta um maior grau de confiabilidade ao componente ou sistema.

Em uma segunda etapa, o material do modelo foi alterado para o compósito PLANFC40/6. Como os dados de entrada da simulação prévia foram mantidos, não foi necessário refazer todo o procedimento. Os valores obtidos por meio da simulação estão apresentados na Figura 34, onde pode-se notar duas regiões de falha. De fato, a simulação com a mesma carga induz no modelo, onde foram aplicadas as propriedades do compósito produzido, PLANFC40/6, uma região de tensão máxima de ~69,4 MPa, a qual indica uma deformação plástica, ou seja, o limite superior da tensão de von Mises encontrada nas simulações foi superior ao limite de proporcionalidade de 52,4 MPa do material, ocasionando o escoamento do material e a falha teórica do mesmo. Apesar de outros compósitos apresentarem valores superiores para o módulo de elasticidade, O PLANFC40/6 foi escolhido devido ao valor encontrado para a sua tenacidade, pois significa ter um material menos frágil, o qual poderia suportar melhor possíveis colisões.

Figura 34 – Valores obtidos na simulação com o compósito PLANFC40/6 utilizando malha tetraédrica e 1,5 mm de distância entre nós dos vértices (parafusos de cabeça cilíndrica).

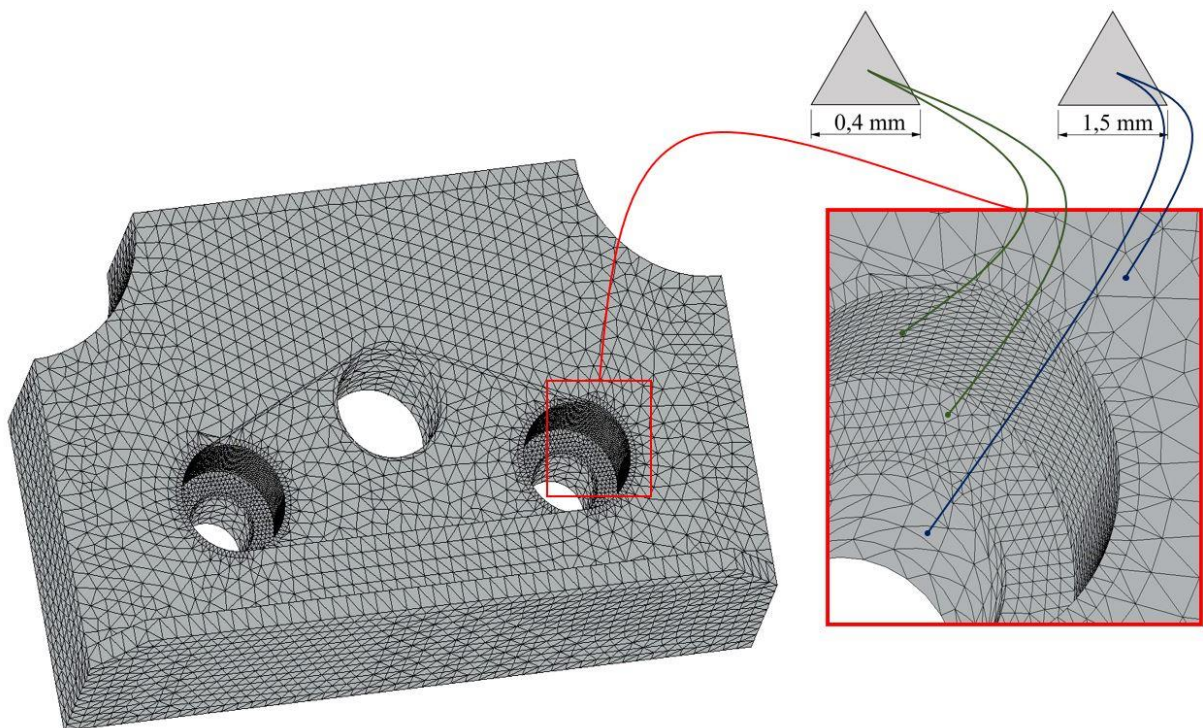


Legenda: Observa-se a seta na escala dos gradientes de tensões, a qual indica que acima deste valor o material sofreu escoamento e, portanto, deformação plástica. As áreas indicadas de maior tensão são nos alojamentos dos parafusos M6 de cabeça cilíndrica.

Fonte: Do autor (2020).

A área ou região de falha apareceu nos rebaixos para as cabeças cilíndricas dos parafusos M6, posicionados com a zona de reação ao centro, submetidos à tensões de cisalhamento. Para uma melhor verificação dos efeitos dos esforços nessas áreas foram efetuadas outras duas simulações para comparar as diferenças dos valores de tensão. Uma utilizando os mesmos elementos tetraédricos de segunda ordem, mas com o refinamento da malha nas áreas de interesse, ou seja, nos rebaixos das cabeças dos parafusos. Nestas foram criados elementos tetraédricos também de segunda ordem com a distância entre nós dos vértices de 0,4 mm mantendo a distância entre nós dos vértices de 1,5 mm nas outras regiões, conforme a Figura 35. Outra com elementos hexaédricos de segunda ordem utilizando 1,5 mm como distância entre nós dos vértices.

Figura 35 – Malha tetraédrica com refinamento nos rebaixos dos parafusos e indicação da distância entre nós dos vértices em cada zona.



Legenda: Observa-se que, em todo o rebaixo da cabeça dos parafusos a malha foi refinada apresentando uma quantidade maior de nós.

Fonte: Do autor (2020).

A comparação dos valores máximos para a tensão de von Mises utilizando a malha hexaédrica de segunda ordem, com distância entre nós dos vértices de 1,5 mm; malha tetraédrica de segunda ordem, com distância entre nós dos vértices de 1,5 mm e malha tetraédrica de segunda ordem, com distância entre nós dos vértices de 1,5 mm e refinamento de

malha de 0,4 mm, nos rebaiços dos parafusos está apresentada na Tabela 8.

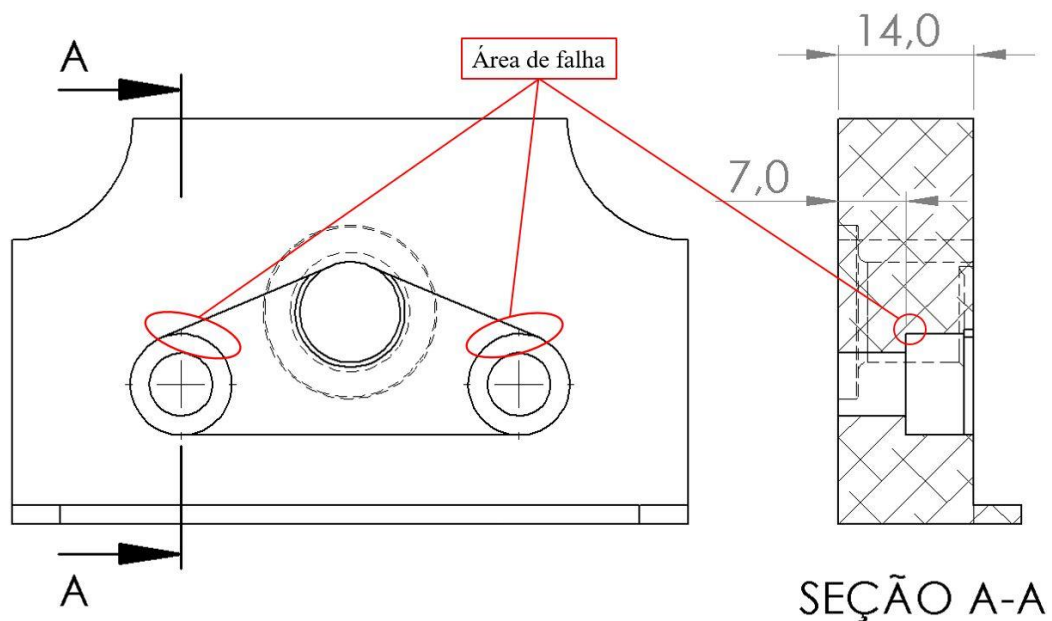
Tabela 8 – Valores para a tensão obtidos nas várias simulações e diferentes configurações para a malha.

Elementos	Distâncias entre nós (mm)	Tensão Máxima (MPa)
Hexaédricos	1,5	69,412
Tetraédricos	1,5	68,985
Tetraédricos	1,5 / 0,4	69,226

Fonte: Do autor (2020).

Os cantos vivos no fundo dos rebaiços dos parafusos são considerados regiões de concentração de tensões, até porque, a espessura do material é muito menor. No desenho de seção do componente, essa redução na espessura pode ser verificada na Figura 36.

Figura 36 – Vista ortogonal frontal do componente com a vista em seção (A-A) no rebaixo para um dos parafusos de cabeça cilíndrica.



Legenda: A espessura do componente de 14 mm possui na zona com o rebaixo cilíndrico para o alojamento das cabeças dos parafusos M6, uma espessura de 7 mm, o que contribui para a concentração de tensão máxima naquela área.

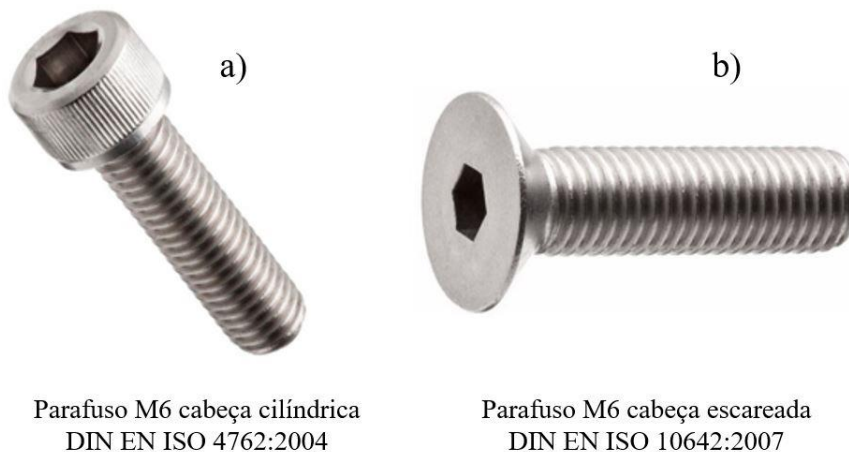
Fonte: Do autor (2020).

No caso de cantos vivos é muito comum o aparecimento de zonas de singularidade. Isso ocorre quando os elementos de uma malha durante o refinamento da mesma, para tentar se

adaptar ao canto vivo têm o seu volume próximo a zero, o qual, com a aplicação das cargas, devolvem valores muito altos de tensão. Portanto, o comportamento característico de uma singularidade de tensão é que o valor da tensão continua aumentando com o refinamento da malha naquela área, para valores que tendem ao infinito. Se as tensões nestes pontos tendem a convergir para um valor finito, durante o refinamento da malha, significa que existe uma concentração de tensões legítima.

Uma possível troca de parafusos foi avaliada como uma solução alternativa, ou seja, alterar o tipo de parafusos para obter um rebaixo que não provoque uma concentração de tensões nessas áreas. O componente de alumínio precedente usava parafusos M6 com cabeça cilíndrica (DIN EN ISO 4762:2004) e a alternativa seria substituí-los por um parafuso escareado M6 (DIN EN ISO 10642:2007). A diferença das cabeças entre os dois tipos de parafusos se apresenta na Figura 37.

Figura 37 – Parafusos M6 com cabeça cilíndrica e escareada, com sextavado interno.

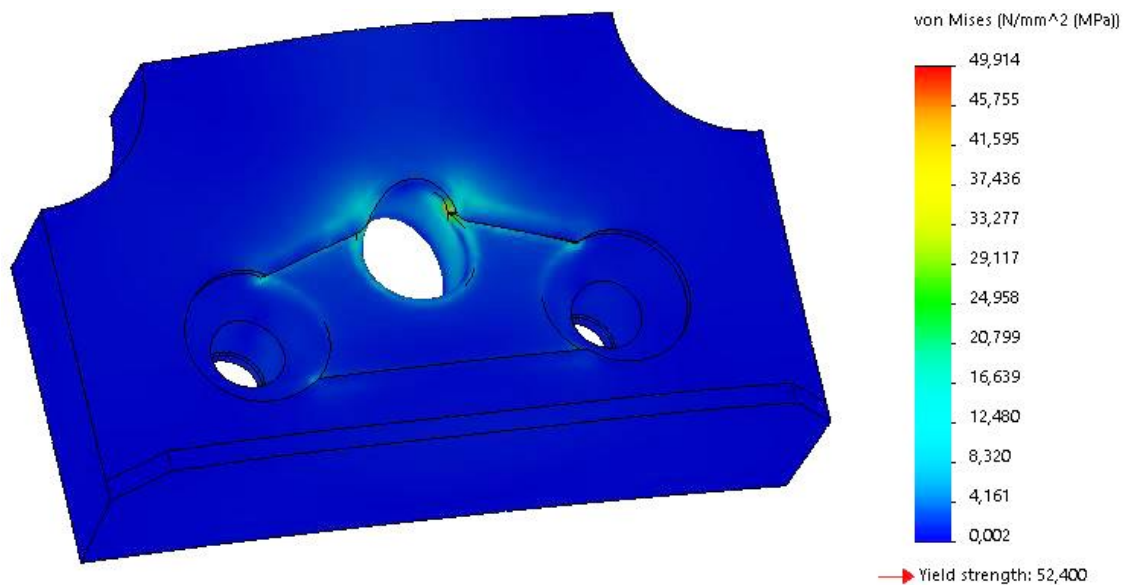


Legenda: A cabeça do parafuso escareado (37b) apresenta um ângulo de 90° em vez do formato cilíndrico do parafuso (37a). Ambos utilizam a mesma rosca métrica M6.

Fonte: Adaptado de RS Components (2020).

Assim, o modelo 3D foi modificado e todo o procedimento foi repetido para a nova simulação utilizando elementos tetraédricos de segunda ordem, com 1,5 mm de distância entre nós dos vértices. Os valores de tensão de von Mises obtidos por meio de simulação estão apresentados na Figura 38.

Figura 38 – Valores obtidos na simulação com o compósito PLANFC40/6 utilizando malha tetraédrica e 1,5 mm de distância entre nós dos vértices (parafusos de cabeça escareada).

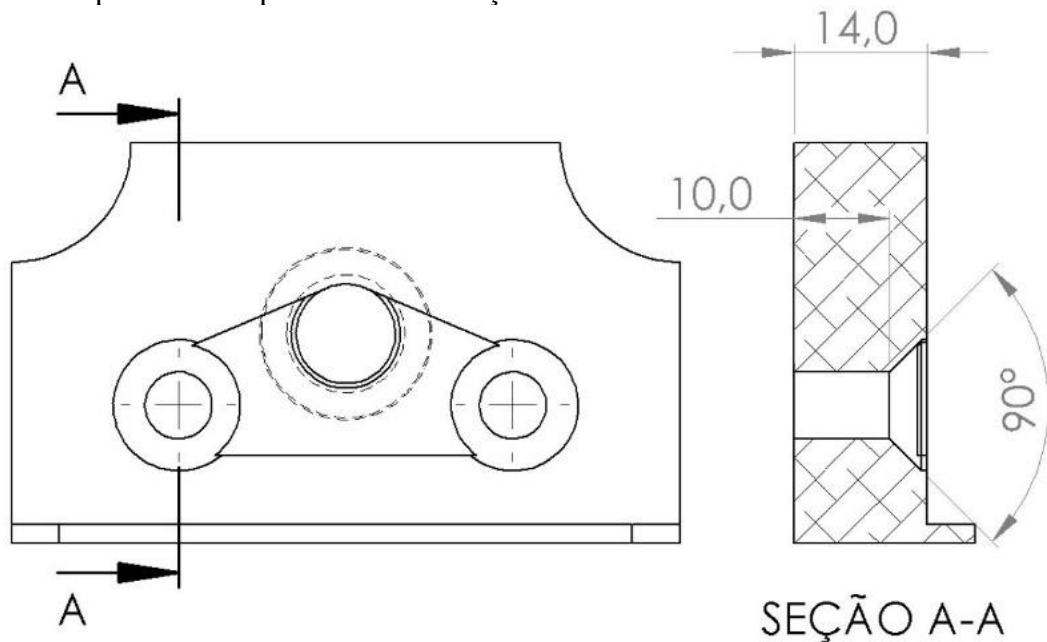


Legenda: Com a modificação introduzida, a concentração de tensões se transferiu do alojamento dos parafusos para a área de aplicação da força. Mesmo assim, o gradiente de tensões de von Mises indica valores de tensões bem abaixo do limite de proporcionalidade.

Fonte: Do autor (2020).

A modificação proposta no componente não implica em nenhum tipo de adaptação ou modificação do sistema original. A simulação numérica apresentou viabilidade no uso deste modelo, com as modificações aplicadas no alojamento dos parafusos M6 de cabeça escareada e utilizando as propriedades encontradas para o compósito PLANFC40/6. Uma vez que, a tensão de von Mises máxima encontrada (~49,9 MPa) foi menor que a tensão de escoamento do compósito (52,4 MPa). Uma seção do desenho contemplando o alojamento da cabeça escareada do parafuso se apresenta na Figura 39.

Figura 39 – Vista ortogonal frontal do componente com a vista em seção (A-A) no rebaixo para um dos parafusos de cabeça escareada.



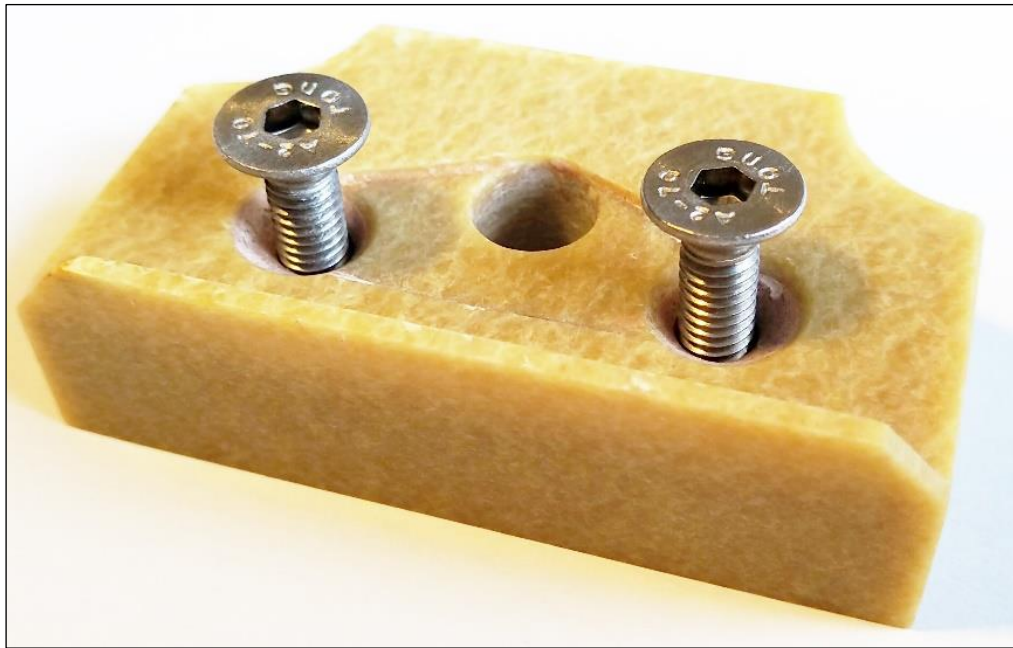
Legenda: A espessura do componente de 14 mm possui na zona com o rebaixo escareado, para o alojamento das cabeças dos parafusos M6, uma espessura de 10 mm, o que permite maior espessura de material sem cantos vivos como no caso dos parafusos de cabeça cilíndrica.

Fonte: Do autor (2020).

Observa-se na Figura 36, que com o uso de parafusos de cabeça cilíndrica, resta uma espessura de material para absorver os esforços de 7 mm, enquanto com o uso dos parafusos de cabeça escareada, essa espessura passa a 10 mm (FIGURA 39). Além disso, o rebaixo possui um ângulo inclinado de 45° , em vez do canto vivo provocado pelo rebaixo cilíndrico.

Com base nas simulações, um componente foi usinado a partir de um bloco bruto do compósito PLANFC40/6 utilizando os rebaixos escareados como alojamento das cabeças dos parafusos M6. No processo de usinagem foram utilizados os parâmetros de corte próximos ao cloreto de polivinil (PVC): velocidade do mandril de 6000 rpm, taxa de avanço de 2200 mm/min, fresa helicoidal dupla em HSS (aço rápido), com uso de líquido refrigerante, resultando em componente mecânico com bom acabamento superficial. Depois disso, o componente foi montado na ferramenta do robô no lugar de um dos componentes de alumínio, mantendo o outro componente no mesmo local. O sistema foi submetido a aproximadamente 650 ciclos de trabalho sem apresentar nenhum tipo de alteração. O componente construído com o compósito produzido PLANFC40/6 foi desmontado após os ciclos de trabalho para uma avaliação visual, está apresentado na Figura 40.

Figura 40 – Imagem do componente após vários ciclos de trabalho com os parafusos de cabeça escareada.



Fonte: Do autor (2020).

Uma questão fundamental na aplicação dos robôs é a relação entre a capacidade de carga e o seu raio de ação, ou seja, um maior raio de ação compromete o peso máximo que o robô dispõe para a ferramenta, no seu pulso. Portanto, esta carga útil é influenciada não somente pelo peso total da ferramenta, mas também pela distância do seu baricentro ao pulso do robô. Quanto maior essa distância menor a capacidade de carga útil, a qual é facilmente verificada nas fichas técnicas de cada modelo de robô. Sendo assim é muito importante usar componentes leves nas ferramentas de trabalho. As peças de alumínio, que pesam 160,6 g podem ser substituídas pelas do compósito PLANFC40/6, que pesam 76,2 g, o que pode ser considerado uma vantagem significativa em termos de redução de peso devendo-se levar em consideração que, a densidade do compósito PLANFC40/6 é de $1,28 \text{ g/cm}^3$ e da liga de alumínio 1060 H12 é de $2,71 \text{ g/cm}^3$. Uma outra vantagem não indiferente nesta substituição, tendo em vista a corrente elétrica que passa na pinça e transmite ao pino durante a soldagem, corresponde à rigidez dielétrica do compósito PLANFC40/6, considerado isolante evitando-se assim, o isolamento elétrico entre a pinça e o componente, o qual é necessário no caso do componente em liga de alumínio, por ser um material considerado como bom condutor elétrico.

6 CONCLUSÃO

Este trabalho limitou-se a considerar os compósitos desenvolvidos como materiais isotrópicos, inferidos pelo baixo grau de cristalinidade, que deve ser aprofundado através de novos testes utilizando corpos de prova, pelo menos, nas outras duas direções ortogonais. Além disso, este trabalho se limitou a avaliar as propriedades do material sob uma temperatura de trabalho abaixo da temperatura de transição vítrea e sem um teste de fadiga, que determinaria o limite do material com base em tensões cíclicas. Algumas das conclusões associadas a este estudo são as seguintes:

- O método apresentado resultou em compósitos com maior tenacidade sem, no entanto, mostrar uma grande perda na resistência mecânica.

- Os biocompósitos representam uma boa alternativa, não apenas na substituição de polímeros de origem fóssil, mas também em algumas aplicações na substituição de materiais metálicos.

- Uma redução na resistência mecânica com um aumento no conteúdo do reforço não é um resultado esperado ou preferível para os compósitos. No entanto, todos os materiais obtidos resultaram em uma boa relação entre módulo de elasticidade e deformação plástica. Fator importante em componentes que possam sofrer colisões e ao mesmo tempo esforços mecânicos sem se deformar ou romper-se.

- Nas análises por elementos finitos dos corpos de prova foram utilizados tanto elementos tetraédricos de segunda ordem como hexaédricos de segunda ordem, não indicando diferenças significativas para a tensão de von Mises entre os respectivos compósitos. Os desvios encontrados entre estes resultados e os resultados dos ensaios experimentais, para os corpos de prova de cada compósito simulado indicaram um desvio inferior a 5%.

- As propriedades mecânicas obtidas nos compósitos também resultaram em um bom comportamento durante a usinagem dos componentes, mostrando uma boa superfície de acabamento e estabilidade dimensional, fatores importantes na produção de componentes mecânicos e, conseqüentemente, no uso de outros processos de conformação à frio, como por meio de cunhos e cortantes.

- O compósito apresentou ótimo módulo específico, que é a relação entre o seu módulo de elasticidade e a sua densidade.

- Por meio de simulações numéricas foi possível, não somente avaliar o componente submetido à esforços, mas também, de modo rápido e simples encontrar alternativas na geometria do componente, o que viabilizou tecnicamente o uso do biocompósito PLANFC40/6,

na substituição do componente em liga de alumínio 1060 H12: um material biodegradável, com origem em fontes renováveis e com aproximadamente metade do peso.

6.1 Trabalhos futuros

Como sugestões para trabalhos futuros destacam-se:

- a) desenvolvimento do compósito com maior percentual de deformação plástica de modo que possa ser dobrado e embutido a partir de lâminas;
- b) aplicação de novos testes, como: análise das tensões pelo menos nos três eixos ortonormais, análise da influência da temperatura nas propriedades mecânicas e teste de fadiga;
- c) desenvolvimento de tratamentos superficiais específicos para passivação dos componentes mecânicos sem comprometer a biodegradabilidade;
- d) desenvolvimento de novas aplicações.

REFERÊNCIAS

- ABDULKHAMI, A. et al. **A study of morphological, Thermal, mechanical and barrier properties of PLA based biocomposites prepared with micro and nano sized cellulosic fibers.** Cellulose chemistry and technology, 2015, v. 49 (7-8), p. 597-605.
- AKIN, J. E. **Finite element analysis concepts via SolidWorks.** World Scientific. Rice University – Houston, Texas – USA, 2009.
- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM D256:** Plastics – Determination of Izod impact strength. USA, 2010.
- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM D638:** Standard test method for tensile properties of plastics. USA, 2014.
- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM D3418:** Standard test method for glass transition temperature of polymers by differential scanning calorimetry. USA, 1999.
- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM D6400:** Standard specification for compostable plastics. USA, 2004.
- ARANTES, A.C.C. et al. **Bio-based thin films of cellulose nanofibrils and magnetite for potential application in green electronics.** Carbohydrate Polymers, 2019, v. 207, p. 100-107.
- ASHIK, K. P.; SHARMA, R. **A review on mechanical properties of natural fiber reinforced hybrid polymer composites.** Journal of Minerals and materials Characterization and Engineering, 2015, n. 3, p. 420-426.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 15448-2:** Biodegradação e compostagem – Requisitos e métodos de ensaio. Rio de Janeiro, 2008.
- AZMI, A. I. et al. **Experimental study of machinability of GFRP composites by end milling.** Materials and manufacturing processes, 2012, v. 27, p. 1045-1050.
- BELGACEM, M. N.; GANDINI, A. **The State of the Art.** In: Belgacem, M. N.; Gandini, A. Monomers, Polymers and Composites from Renewable Resources. Oxford: Elsevier, 2008.
- BOROWICZ, M. et al. **Glycerolysis of poly(lactic acid) as a way to extend the “life cycle” of this material.** Polymers, 2019, v. 11 (1963).
- BRITO, G. F. et al. **Biopolímeros biodegradáveis e polímeros verdes.** Revista eletrônica de materiais e processos, 2011, v. 62, p. 127-139.
- BRUN, V. et al. **Agenda 2020 Cellulose nanomaterials:** Research Roadmap. Technical Report, 2016. Disponível em: < https://www.researchgate.net/publication/305720842_Agenda_2020_Cellulose_Nanomaterials_Research_Roadmap>. Acesso em: 10/04/2020.
- CHAKRABARTY, A. e TERRAMOTO, Y. **Recent advances in nanocellulose composites with polymers:** a guide for choosing partners and how to incorporate them. Polymers, 2018, v. 10(5), 517.
- CHEN, R. et al. **Injection-moulded biocomposites from polylactic acid (PLA) and recycled carbon fibre:** Evaluation of mechanical and thermal properties. J. Thermoplast., ED. Campos. Mater., 2014, v. 27, p. 1286-1300.

- FARAH, S.; ANDERSON, D. G.; LANGER, R. **Physical and mechanical properties of PLA, and their functions in widespread applications**: A comprehensive review. *Advanced Drug Delivery Reviews.*, 2016, *Adv. Drug Deliv. Rev.*
- FAZITA, M. R. N. et al. **Disposal options of bamboo fabric-reinforced poly(lactic) acid composites for sustainable packaging**: biodegradability and recyclability, 2015, v. 67, p. 1476-1496.
- FIALHO, A. B. **SolidWorks® Premium 2013**: Plataforma CAD/CAM/CAE para projeto, desenvolvimento e validação de produtos industriais, 1 ed. São Paulo: Érica, 2013.
- GHASEMI, S. et al. **Development of nanocellulose reinforced PLA nanocomposite by using maleated PLA (PLA-g-MA)**. *Journal of thermoplastic composite materials*, 2017, p. 1-12.
- GREMARE, A. et al. **Characterization of printed PLA scaffolds for bone tissue engineering**. *J Biomed Mater Res Part A*, 2017.
- HERVY, M. et al. **Mechanical response of multi-layer bacterial cellulose nanopaper reinforced polylactide laminated composites**. *Composites: Part A*, 2018, v. 107, p. 155–163.
- HIBBELER, R. C. **Resistência dos materiais**. 7ª Ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2010.
- HONEY, B. et al. **Fabrication and Study of mechanical properties of bamboo fibre reinforced bio-composites**. *Innovative systems design and engineering*, 2015, v. 6, n. 1.
- HUNEAULT, M. A.; Li, H. **Morphology and properties of compatibilized polylactide/thermoplastic starch blends**. *Polymers*, 2007, v. 48, n. 1.
- INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **ISO EN 180**: Plastics – Determination of Izod impact strength. Switzerland, 2001.
- INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **ISO EN 527**: Plastics – Determination of tensile properties. Switzerland, 2012.
- INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **ISO EN 4762**: Parafusos de cabeça cilíndrica com sextavado interno. Switzerland, 2004.
- INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **ISO EN 10642**: Parafusos escareados com sextavado interno. Switzerland, 2007.
- INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. **ISO EN 11357**: Plastics – Determination of glass transition temperature. Switzerland, 2016.
- JERWEI, C. et al. **White in organic electronics**, SPIE, Optics East, 2006, Conference Proceedings, Vol.: Published online. DOI: 10.1117/2.1201203.004149.
- JUNG, Y.H. et al. **High-performance green flexible electronics based on biodegradable cellulose nanofibril paper**. *Nature communications*, 2015. DOI: 10.1038/ncomms8170m 2015.
- KALE, R. D. et al. **Preparation and characterization of biocomposite packaging film from poly (lactic acid) and acylated microcrystalline cellulose using rice bran oil**. *Int. J. Biol. Macromol.* 2018, v. 118, p. 1090–1102.
- KHURMA, J. et al. **Miscibility study of solution cast blends of poly(lactic acid) and poly(vinyl butyral)**. *The south pacific journal of natural science*, 2005, v. 23 (1).

- KOLOLUOMA et al. **Gravure printed sol–gel derived AlOOH hybrid nanocomposite thin films for printed electronics**, Ed. J. Mater. Chem. C, 2015,3, p.1776-1786.
- KOWALCZYK, M. et al. **Mechanical and thermal properties of PLA composites with cellulose nanofibers and standard size fibers**. Composites: Part A, 2011, v. 42, p. 1509-1519.
- LAHIJI, R. R. et al. **Atomic force microscopy characterization of cellulose nanocrystal**. Langmuir: the ACS Journal of surfaces and colloids, 2010, v. 26, n. 6, p. 4480-4488.
- LIM, L.T. et al. **Processing technologies for poly(lactic acid)**. Progress in Polymer science, 2008, v. 33, n. 8.
- LIN, N. et al. **Effects of polymer-grafted natural nanocrystals on the structure and mechanical properties of poly (lactic acid): A case of cellulose whisker-graft-polycaprolactone**. J. Appl. Polym. Sci. 2009, v. 113, p. 3417–3425.
- LIU, H. et al. **Interaction of microstructure and interfacial adhesion on impact performance of polylactide (PLA) ternary blends**. Macromolecules, 2011, v. 44, n. 6.
- LIU, Y. et al. **Simultaneous enhancement of strength and toughness of PLA induced by miscibility variation with PVA**. Polymers, 2018, v. 10(1178), p. 1-13.
- MAYEKAR, P. et al. **Effect of nano-clay and surfactant on the biodegradation of poly(Lactic Acid) films**. Polymers, 2020, v. 12(2), 311.
- MENG, X. et al. **Toughening of nanocellulose/PLA composites via bio-epoxy interaction: Mechanistic study**. Materials and design, 2018, v. 139, p. 188-197.
- MOKHENA, T. C. et al. **Thermoplastic processing of PLA/cellulose nanomaterials composites**. Polymers, 2018, v. 10 (1363), p. 1-29.
- MORALES A. et al. **Bamboo-Polylactic acid (PLA) composite material for structural applications**. Materials, 2017.
- MOON, R. J. et al. **Cellulose nanomaterials review: structure, properties and nanocomposites**. Chemical Society Reviews, 2011, v. 40, n. 7, p. 3941-3994.
- MISHRA, V. et al. **Precision machining of biopolymers: a brief review of the literature and case study on diamond turning**. Journal of thermoplastic composite materials, 2019, p. 1-22.
- NAGARAJAN, V. et al. **Perspective on polylactic acid (PLA) based sustainable material for durable applications: focus on toughness and heat resistance**. ACS Sustainable chemistry and engineering, 2016, v. 4, p. 2899-2916.
- NAJIHAH, J. et al. **Characterization and preparation of Polyvinyl Alcohol (PVA) as Inhibitor in formation of hydrates**. International Journal of Current Science, Engineering and Technology, 2018, v. 1, p. 578-584.
- NAVEEN, J. et al. **Modelling of damage processes in biocomposites, fibre-reinforced composites and hybrid composites**. Woodhead publishing series in composites science and engineering, 2019, p. 153-170.
- NURHANIZAR, M. et al. **Finite element analysis of composites material for aerospace applications**. IOP conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., 2010, n. 11 (012010).

OCHI, S. **Flexural properties of long bamboo fiber/PLA composites**: Open Journal of Composite Material, 2015, v. 5, p. 70-78.

OKSMAN, K. et al. **Review of the recent developments in cellulose nanocomposite processing**. Composites: Part A, 2016, v. 83, p. 2-18.

OKUBO, K.; FUJII, T.; THOSTENSON, E. T. **Multi-scale hybrid biocomposite**: processing and mechanical characterization of bamboo fiber reinforced PLA with microfibrillated cellulose. Composites: Part A, 2009, v. 40, p. 469-475.

PATEL, P. et al. **Milling of polymer matrix composites**: A review. International Journal of applied engineering research, 2018, v. 13, n. 10, p. 7455-7465.

PEGORETTI, A. et al. **Finite element analysis of a glass fibre reinforced composite endodontic post**. Biomaterials, 2002, n. 23, p. 2667-2682.

PIRAS, C. C.; PRIETO, S. F.; BORGGRAEVE, W. M. **Ball milling**: a green technology for the preparation and functionalization of nanocellulose derivatives. NanoscaleAdvances, 2019, v. 1, p. 937-947.

QIAN, S. et al. **Effect of low-concentration alkali solution pretreatment on the properties of bamboo particles reinforced poly(lactic acid) composites**. Journal of Applied Polymer Science, 2013, 130(3), 1667–1674.

QIAN, S. et al. **Improved properties of PLA biocomposites toughened with bamboo cellulose nanowhiskers through silane modification**. J. Mater. Sci. 2018, v. 53, p. 10920–10932.

QUINTERO, V. et al. **Printing and encapsulation of electrical conductors on polylactic acid (PLA) for sensing applications**, in: Proceedings of the 27th IEEE Conference on MEMS, 2014, p. 532–535.

RAMACHANDRAN, M. et al. **Effect of nanotechnology in enhancing mechanical properties of composites materials**. International journal on textile engineering and processes, 2016, v. 2, p. 59-63.

R. C. do LAGO et al. **Obtaining cellulosic nanofibrils from oat straw for biocomposite reinforcement**: Mechanical and barrier properties. Industrial Crops & Products, 2020, v. 128, 112264.

REBOUILLAT, S.; Pla, F. **State of the art manufacturing and engineering of nanocellulose**: a review of available data and industrial applications. Journal of biomaterials and nanobiotechnology, 2013, v. 4, p. 165-188.

RIVALDI, J. D.; SARROUH, B.; SILVA, S. S. da. **Glicerol de biodiesel**: estratégias biotecnológicas para o aproveitamento do glicerol gerado da produção de biodiesel. Biotecnologia, Ciência e Desenvolvimento, 2008, n. 37, p. 44-51.

ROYSE, S. **Fabrication and characterization of biocomposites from polylactic acid and bamboo fibers** [Tese]. Nebraska (USA): University of Nebraska; 2012.

RUDNIK, E. **Compostable Polymer Materials**: definitions, structures and methods of separation. Compostable polymer materials. [S.I.]. Oxford: Elsevier, 2016.

SABA, N.; JAWAID, M. **Recent advances in nanocellulose - based polymer nanocomposites cellulose – Reinforced nanofibre**. Composites, 2017, p. 89-112.

- SABAU, E. et al. **Mechanical behavior of composite materials using the finite element analysis.** MATEC Web of conferences, 2017, n. 137 (08006).
- SADREHAGHIGHI, I. **Assessment of meshing types & mesh quality:** technical report. CFD Open Series, 2020, DOI: 10.13140/RG.2.2.25026.94404, 139 p.
- SHARMA, A. et al. **Commercial application of cellulose nano-composites:** A review, Biotechnology Reports, 2019, v. 21.
- SIEBERT-RATHS, A. et al. **Modifications of polylactide for technical applications.** Kunststoffe, 2011, v. 5, p. 99-104.
- SILVA, R. et al. **Aplicações de fibras lignocelulósicas na química de polímeros e compósitos.** Química Nova, 2009, Vol. 32, Número 3, p. 661-671.
- TEYMOORZADEH, H.; RODRIGUE, D. **Biocomposites of wood flour and polylactic acid:** processing and properties. Journal of biobased materials and bioenergy, 2015, v. 9, p. 1-6.
- TING, G. et al. **Effect of PLA-g-GMA on the thermal, rheological and physical behavior of PLA/PBAT blends.** Polymers Science series A, 2019, v. 61, p. 317-324.
- TSAI, T. D. et al. **The origins in the transformation of ambipolar to n-type pentacene-based organic field-effect transistors.** Organic Electronics, 2014, v.15(8), p.1759-1766.
- UNIVERSIDADE FEDERAL DE LAVRAS. Biblioteca Universitária. **Manual de normalização e estrutura de trabalhos acadêmicos:** TCCs, monografias, dissertações e teses. 2. ed. rev., atual. e ampl. Lavras, 2016. Disponível em: <<http://repositorio.ufla.br/jspui/handle/1/11017>>. Acesso em: 10/02/2020.
- WANG, X. et al. **Influence of the lignin content on the properties of poly(lactic acid)/lignin-containing cellulose nanofibrils composite films,** Polymers, 2018, v. 10 (9).
- VALERIO, O. et al. **Synthesis of glycerol-based biopolyesters as toughness enhancers for polylactic acid bioplastic through reactive extrusion.** ACS Omega, 2016, v. 1, p. 1284-1295.
- WANHEE, I. et al. **Recycling of isopropanol for cost-effective, environmentally friendly production of carboxymethylated cellulose nanofibrils.** Carbohydrate Polymers, 2019, v. 208, p. 365-371.
- YANG, J. et al. **Applications of Lignocellulosic Fibers and Lignin in Bioplastics:** A review, Polymers, 2019, v. 11 (5).
- YANG, Z. et al. **Morphological, mechanical and thermal properties of poly(lactic acid) (PLA) cellulose nanofibrils (CNF) composites nanofiber for tissue engineering.** Journal of Wuhan University of Technology-Mater, 2019, p. 207-215.
- YUNZI, H. et al. **Newly Developed Techniques on Polycondensation, Ring-Opening Polymerization and Polymer Modification:** Focus on Poly(Lactic Acid). Materials, 2016, v. 9, n. 133.
- ZHAO, Y. et al. **Novel mechanical models of tensile strength and elastic property of FDM AM PLA.** Materials and design, 2019, n. 181.
- ZHOU, Y. et al. **Efficient recyclable organic solar cells on cellulose nanocrystal substrates with a conducting polymer top electrode deposited by film-transfer lamination.** Org. Electron., 2014, v. 15, p. 661-666.

ZHANG, L.; TSUZUKI, T.; WANG, X. **Preparation of cellulose nanofiber from softwood pulp by ball milling.** Cellulose, 2015, v. 22, p. 1729-1741.

APÊNDICES

SEGUNDA PARTE - Artigo

COMPOSITES OF NANOFIBRILLATED CELLULOSE AND POLY(LACTIC ACID) APPLICATIONS BASED ON NUMERICAL SIMULATIONS

Edimilson Zambaldi^{*a}, Ricardo R. Magalhães^b, Gustavo H. D. Tonoli^c

^{*} Via Crosera, 14 Tre Ville (TN) 38095 - Italia Phone +39 345 9263281

^a DSc Biomaterial Engineering - University of Lavras – zambaldibt@gmail.com

^b Department of Engineering – University of Lavras - ricardorm@deg.ufla.br^c

^c Department of Engineering - University of Lavras - gustavotonoli@ufla.br

Abstract

The advancement of biodegradable polymers application is increasingly growing through various combinations with other materials. There is great expectation on how the use of those new materials can be expanded and they are not only a replacement for polymers of fossil origin, but they also in the replacement of even metallic materials. Thus, this work presents the use of numerical simulations as a tool to evaluate and reengineer the application of a biodegradable composite constituted by nanofibrillated cellulose (NFC) and poly(lactic acid) (PLA), in the construction of mechanical components. The academic and industrial interest of this work led to a case study in which, using the finite element analysis (FEA) and the composites produced was evaluated the technical feasibility of replacing the material of a mechanical component, constructed of 1060 H12 aluminum alloy.

Keywords: biopolymers, nanofibrils of cellulose, poly(lactic acid), finite element analysis.

1. Introduction

The great interest in composite materials is because of their physical and mechanical properties, since it is possible to develop new materials that combine and leverage each component's properties in a synergetic way. Because of environmental pollution, caused mainly by the growing use of non-biodegradable polymers from carbon fossil resources, new composite materials are expected to have lower impact on the environment throughout their lifecycle [1,2].

PLA is a biopolymer-based thermoplastic obtained from 100% renewable sources, such as corn sugar and beet sugar and thanks to its biocompatibility qualities, many studies indicate its application as scaffolding for bone tissues, through 3D printers [3]. However, the main limiting factors for the use of PLA are its fragility and its hydrophobia, when part of a composite with hydrophilic materials [4]. The fracture in this material occurs with a very low elongation, which means low ductility and low toughness, so necessary in various applications. Much research has been carried out with the objective of increasing the toughness of the material with the use of plasticizers or other polymers and copolymers forming blends and composites, resulting in large losses in mechanical resistance [4,5,6]. Other works aim to minimize this effect by inserting nanomaterials as reinforcement in the PLA matrix. Good results were obtained with the use of nanofibrillated cellulose [7,8,9,10,11]; however, its hydrophilic nature creates an immiscible composite with PLA and, consequently, results in feeble interface, which limits the transmission of loads in the material macrostructure.

The main sources of cellulose are vegetables. In this case, bamboo is an excellent option to obtain sustainable natural fibrils, because, since it is a plant of rapid growth, rich in cellulose, it completes its cycle in a few months and reaches maximum strength in a few years. Interest in those materials arises from a desire to create electronic and mechanical components that are sustainable, biodegradable, biocompatible, or even metabolizable.

Evaluating the use of PLA and NFC in the formation of biocomposite materials, with characteristics of mechanical resistance that allow the application in mechanical systems, is of industrial and academic interest, since industrial components are subjected to stress efforts, considering the possibility of replacing both polymers of fossil origin and non-renewable matrices commonly used, as well as metallic materials, in advanced engineering applications. In applications where a component is subjected to mechanical stresses, the industry has computational methods capable of simulating these stresses before its construction, thus predicting its behavior and possible failures. Through numerical simulation it is possible to apply the mechanical properties, boundary conditions and application of loads to the mathematical model of the component, in addition to modifying it geometrically or even comparing it, when applying other materials with different characteristics. This phase shortens the time to market and avoids other more expensive testing methods.

1.1. Specifications (background)

1.1.1. Poly(Lactic Acid) (PLA) and Nanofibrillated Cellulose (NFC) Composites

PLA is a thermoplastic aliphatic polyester, which can have a semicrystalline or amorphous structure, synthesized from lactic acid [12]. PLA molecular structure is schematically illustrated in Figure 1 [8].

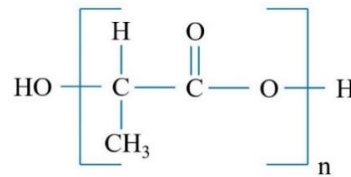


Figure 1 Schematic representation of PLA molecular structure

PLA consists basically of two stereoisomers, L- and D- lactic acid, and, as a chiral molecule, it can be biologically or chemically synthesized. When biologically synthesized, it produces L-lactic acid almost exclusively, leading to the production of L- poly(lactic acid) – PLLA, with low molecular weight [12,13]. However, during the chemical process, different levels of L-and D-lactic acid are obtained. In that case, during the chemical reaction a cyclic diester, lactide, is produced, as illustrated in Figure 2, as part of PLA production process [13], and allowing for the control of PLA final properties by adjusting proportions and sequences of L- and D- lactic acid units [14].

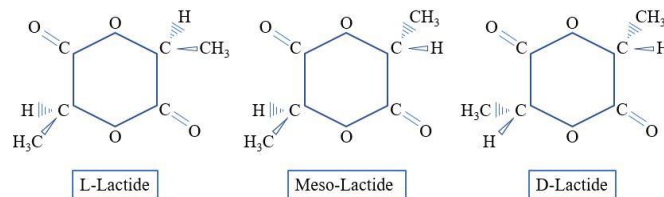


Figure 2 Representation of chemical structures for L-, meso- and D-Lactides

PLA mechanical properties are similar to those of polymers derived from fossil resources, especially high modulus of elasticity, stiffness, transparency, thermoplastic behavior and good molding ability [12,15]. Also, PLA is in many ways similar to polyethylene terephthalate – PET. Its thermal and mechanical properties are superior when compared to other biodegradable aliphatic polyesters, such as polybutylene succinate – PBS, polyhydroxybutyrate – PHB, and polycaprolactone – PCL [16, 17, 18]. Its structure, consisting of asymmetric carbon atoms, may feature high transparency with relatively low crystallization rate [5,12,13]. Thus, PLA has significant characteristics to produce biaxially oriented films and blow-molded components. It can even be used to manufacture fibers, for the textile industry, as well as to produce plastic bags and packages. Since PLA is biocompatible, its application can be extended to healthcare, as material for surgical implants, drug delivery systems and suture fibers [3,20,21,22,23,24].

It is a quite rigid thermoplastic, which results in low toughness when compared to other thermoplastics [25,26,27,28,29]. Its high fluidity during the extrusion and compression processes presents low contraction, which allows for the production of components with accurate dimensions and

great surface finish. However, as it has a low friction coefficient, it may suffer severe deformation and high wear at temperatures above 120 °C [30,31]. The characteristics of PLA used in this research, 3251D from Nature Works, are shown in Table 1.

Table 1 General characteristics showing values for PLA
Source: NatureWorks – 3251D Datasheet.

Characteristics	Typical Values
Tensile Strength	62 MPa
Elongation	3.5%
Glass Transition	60-65 °C
Melting Temperature	188-210 °C
Density	1.26 g/cm ³

Cellulose is the most abundant semicrystalline polysaccharide polymer on our planet. It can be obtained from various plant sources, including bacterial origin and marine species such as algae and tunicates. Cellulose monomers are formed by two glucose molecules, known as cellobiose, and contain six hydroxyl groups that establish intra and intermolecular hydrogen bonds [6,15]. Its degree of crystallinity depends on its origin and the processing to which it was submitted for hemicellulose and lignin isolation. There are several processes for obtaining cellulose, which basically break down the lignin-hemicellulose-cellulose complex by chemical, physical, thermal, biological processes or combinations thereof, with the purpose of delignification without destruction of cellulosic fibrils. The separation between cellulose, hemicellulose and lignin is known as pulping, and the degree of removal of these elements and the process employed depends on their intended purpose and the characteristics of the resulting material.

For a perfect connection between matrix and reinforcement, the surface properties in cellulose nanomaterials (NMCs) are fundamental, as these are the characteristics that enable fiber and matrix adhesion, which in turn determines the resulting properties of the composite, so that the charges can be transferred macroscale for all material. Several techniques have been reported by researchers to increase dispersion and interaction of nanocellulose with the PLA matrix, which include: silylation, glyoxalization, acetylation [9,12,14,16,22,27,28].

Firstly, the hydrophilic nature of cellulose nanomaterials because of the presence of hydroxyl groups should be emphasized and this has been one of the difficulties in promoting their dispersion in various polymeric materials due to their hydrophobic nature. Cellulose nanomaterials have strong forces of attraction emanating from the surface hydroxyl groups (–OH) via hydrogen bonding, causing irreversible agglomeration, reorganization and co-crystallization [6,11,14,15]. Since cellulose nanomaterials are obtained in aqueous suspension, casting of the solution has been a preferred route of preparation to avoid irreversible agglomerations during drying and to obtain reasonable dispersion states in aqueous media and some organic solvents. Specifically, with PLA, another difficulty due to material brittleness prevents it from being used in some applications that require a certain material ductility. Recent research indicates the use of both organic and inorganic compatibilizers/plasticizers to improve the final qualities of PLA/NMC biocomposites increasing in toughness, even to the detriment of its modulus of elasticity, such as glycerol, polyethylene glycol (PEG), casein, glycidyl methacrylate (GMA), poly(vinyl butyral) (PVB), epoxy Resins, maleic Anhydride, poly(vinyl acetate) (PVAc) [9,16,28,32,33,34,35].

1.1.2. Biopolymers on Advanced Engineering Applications

Currently, the industry uses many types of polymers (thermoplastics and thermosets) to produce mechanical components using plastic injection or blowing processes, in which polymer granules are heated and the resulting melt is compressed by an extruder screw or blown against the cavity of a mold, and takes up the contour shape after solidification.

Engineering polymers or technical polymers, in turn, are part of an innovative and promising segment for the polymer transformation industry. They are materials with properties superior to other common

polymers, as they are more stable materials in applications that require greater mechanical and chemical resistance. Because of their properties and applications, they can replace, in many cases and efficiently, materials such as steel or metals. Their main characteristics are: high dielectric strength, good chemical resistance, and good ratio of weight to mechanical resistance, which means lightweight components. In addition to that, thanks to a low friction coefficient, these materials do not require lubrication, avoiding the use of greases and reducing operating costs.

In polymers, many aspects need to be observed, in comparison with the behavior of metals, but probably the most important one is temperature, because their low glass transition temperature strongly influences their mechanical properties. Due to these variations, certain properties such as the modulus of elasticity can only be used as a reference standard and for a given condition, requiring further evaluations if the material is to be used under different conditions. Furthermore, plastic deformation in the solid state of polymers is different compared to metals. In metals, plastic deformation occurs through sliding between atomic planes, whereas in polymers there is stretching of polymer chains and the intensity depends on the material degree of crystallinity.

1.1.3. Finite Element Analysis Applied to Mechanical Stress

Computational analysis of mechanical stress is a powerful tool used in the development of devices, tools, machines and other components, especially those that present some criticality during use, when subjected to mechanical loads. Using simulations and mathematical models of the components or systems makes it possible to predict their behavior during the various physical efforts to which they are subjected. Thereby, it is possible to reduce the time and risks during the development process, as it allows to approximate the model, using computational calculations, reducing the number of tests. Consequently, the time to market is reduced, and it is possible to optimize materials and design.

The finite element method (FEM) replaces a complex problem with a set of simple problems, with a discretization strategy, as it divides the model into several small pieces with simple and defined geometric shapes called elements. The elements use common points at the vertices or lines called nodes, which have a well-known behavior in several cases of loads and stresses, in function of the material mechanical properties and the part or component geometry. The internal displacements of these elements are described by the node displacement using interpolation functions, called degrees of freedom (DOF), generally polynomials. The solutions of the equations describe these displacements and when determining them it is possible to determine the displacements and stresses in the entire continuum. A large number of problems with FEM can be solved using the linearization hypothesis, in this case the deformations are small and the behavior of the materials is considered linearly elastic, that is, the stiffness is always constant. The FEM is best understood from its practical application called finite element analysis (FEA), where a software establishes the differential equations that control the behavior of each node/element, taking into account the interactions with the other elements and these equations, and relate to variables whose quantity is determined by the number of nodes created. All parameters such as load, stiffness matrix, nodal displacements, element stresses, and element strains are stored in a matrix form. In the preprocessor, after meshing has been successfully performed, the element stiffness matrix, global stiffness matrix, and global force vectors are formed in the back end of the analysis software [41]. Steps to follow the FEA are presented in Figure 3.

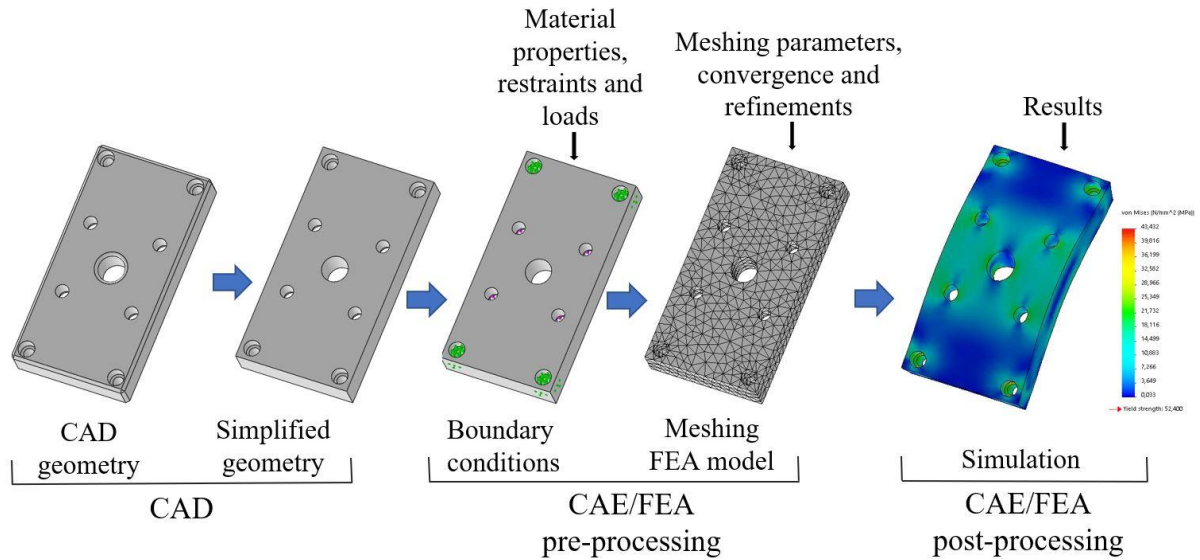


Figure 3 Diagram of FEA application.

1.1.4. Mechanical Properties of Materials for Stress Analysis

Feeding of material properties in FEA software depends on the type of simulation and expected results. It can be taken from datasheets of known materials or from the various standard tests used to determine material properties. In the specific case of analysis of stress when a part is submitted to loads, it is mandatory to feed the software with the following material's information: tensile strength, limit of proportionality (yield strength), modulus of elasticity, elongation at break, Poisson's ratio and density. Most of this information can be obtained from the material tensile strength testing results (EN ISO 527/ASTM D638); therefore, a specimen of the material is made using standard measures and geometry. This specimen is fixed to the tensile testing machine, which measures the specimen deformation while the axial tensile force is increased until it breaks, creating a curve called the stress-strain diagram (σ - ϵ), in which the nominal stress or strength is given by the ratio of the load applied (F) to the initial section of the specimen (A_0), according to Equation 1.

$$\sigma = \frac{F}{A_0}, \quad (1)$$

and the nominal strain is given by the ratio between total elongation (ΔL) and initial specimen's length (L_0), according to Equation 2.

$$\epsilon = \frac{(L-L_0)}{L_0} = \frac{\Delta L}{L_0}. \quad (2)$$

The strain or elongation is a dimensionless quantity and, in some cases, it may be convenient to express it as a percentage: then, multiply the value measured by 100 and add the % symbol, thereby, a strain of $\epsilon = 0.1$ corresponds to an elongation of 10%.

The Poisson's ratio (ν) is the relation between the transversal strain (ϵ_{transv}) and the axial elongation (ϵ), resulting in a dimensionless value, according to Equation 3.

$$\nu = \frac{\epsilon_{transv}}{\epsilon}. \quad (3)$$

The behavior of the material with regard to the relationship between the strengths to which it is subject to and the deformations that arise is defined as elastic and plastic. The first part of the stress-strain diagram (σ - ϵ) is often approximal to a straight line. In this case the material has a linear-elastic behavior in which the measured deformations are directly proportional to the tensions acting and the deformations cancel one another when the load is removed. The relationship between applied tension and deformation

is a typical constant of the material which is called modulus of elasticity (MOE) or Young's modulus (E) and is defined by Equation 4.

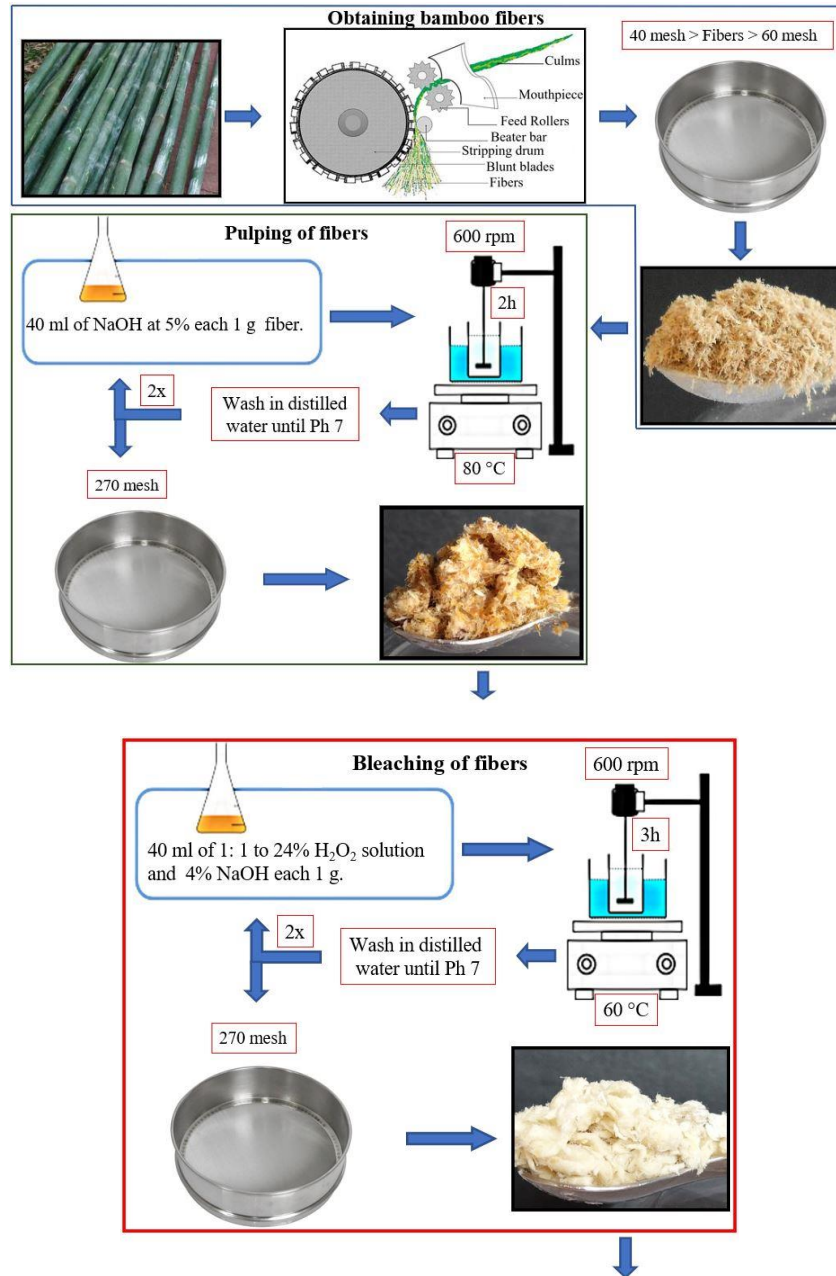
$$E = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{\Delta\sigma}{\Delta\epsilon}. \quad (4)$$

Another important mechanical test to be carried out is the impact test, which indicates the amount of energy that a material can absorb before fracture. In an impact test, a pendulum is dropped from a specific height and strikes the specimen at the bottom of its balance. The energy absorbed during the impact can be inferred from the height when the pendulum oscillates after the impact. The main difference between the Charpy and Izod tests is in the way the specimen is positioned. This is because, in many applications, it is not enough for the material to withstand loads without deforming plastically, it is necessary to know whether the material will resist possible collisions or instantaneous loads, which, in most cases, leads to the material breaking under loads lighter than those applied gradually.

2. Materials and Method

2.1. Obtaining Nanofibrillated Cellulose and Specimens

The bamboo used was the *Bambusa Vulgaris* species, from Lavras, Minas Gerais State, Brazil. The region is located at 919 m above sea level and, according to the Koppen and Geiger classification, the climate is humid sub-tropical (Cwa), with an average annual temperature of 19.9 °C and precipitation averages of 1,486 mm. The plant, approximately 3 years old, was cut in the Summer of 2018 and the upper culms were used, which were grinded and passed through a 40 mesh sieve (0.420 mm aperture) with a 60 mesh retention (0.250 mm aperture). Alkaline treatment was performed in 2 consecutive cycles without drying. At each cycle, the material was placed under constant mechanical stirring at 600 rpm with 40 ml of 5% NaOH for each 1 g of fiber for 2 hours at a temperature of 80 °C, followed by washing in distilled water to Ph 7 and finally passed through a 270 mesh sieve (0.053 mm aperture). The bleaching treatment was performed in 2 consecutive cycles without drying. At each cycle, the material was placed under constant mechanical stirring at 600 rpm, with 40 ml of 1:1 24% H₂O₂ solution and 4% NaOH for each 1 g of material for 3 hours at a temperature of 60 °C followed by washing in distilled water to Ph 7 and finally sieving 270 mesh (0.053mm aperture). After that, the material was subjected to 5 passes in the ultra-fine grinding machine Masuko Sangyo, model MKCA6-2, with a distance of 50 µm from the stones, at 1500 rpm speed and current variation in the ammeter between 3.75 A and 4.00 A. The result obtained was a colloidal solution of NFCs in gel form. To facilitate mixing in the proper proportions of the master batches, drying was carried out by freeze drying in order to avoid agglomerations in the material. For this, a Buchi machine model L200 was used with a freeze-drying cycle at a controlled freezing speed at 50 °C/h to -40 °C. After freezing, a vacuum was created (P = 0.086 mbar) and a first heating cycle with a speed of 5 °C/h until reaching the temperature of -5 °C. Soon after, a second heating cycle started with a speed of 3 °C/h until reaching a temperature of 20 °C. Figure 4 shows the flowchart to obtain dehydrated NFCs as described, with the physical aspects of each step. The images where the dehydrated NFC appears, it was ground only for the purpose of photography due to the difficulty of obtaining the image of the material after lyophilization.



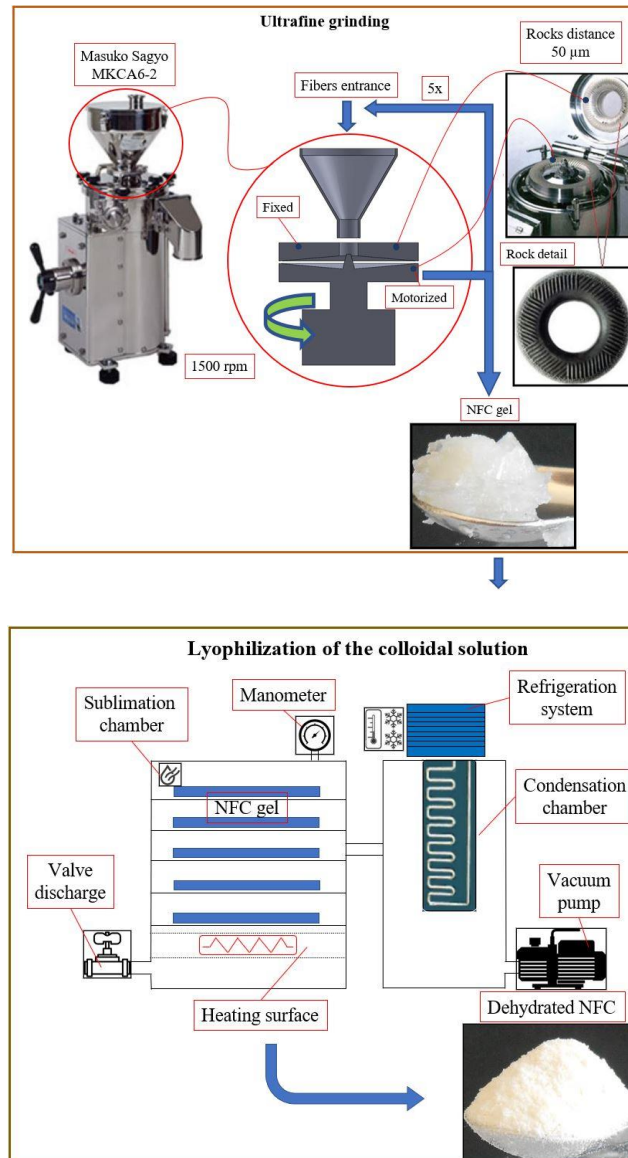


Figure 4 Flowchart to obtain NFC.

The PLA chosen for this research, 3251D from NatureWorks, presents a higher melt flow capability, which allows for easier molding of thin-walled parts and behaves in a stable way in the molten state. It has high resistance and stiffness, with a relative high glass transition temperature. Its amorphous structure presents a low degree of crystallinity because its L/D isomer ratio is about 98%/2%.

PLA composites formed NFC reinforcement concentrations of 30%, 40% and 50% of their weight (wt%) and with the use of glycerol G5516, supplied by the company Sigma-Aldrich, as a plasticizer, in the proportion of 4% and 6% of the total weight. The quantities were weighed and reserved using a Sartorius Analytical model Entris and each master batch was processed using FKV 3L reactors, double glazed, with an oil bath thermostated at 60 °C and mechanical stirring at 150 rpm. Then, the PLA was placed in the reactor with deionized water in the proportion of 5:1 of the volume for 20 minutes for the best dispersion of the glycerol, which was inserted in a second phase and remained in the same stirring conditions for additional 20 minutes for complete homogenization. In a third step, the volume of NFC was slowly inserted into the still moist mixture. As hydrogen bonds in NFCs are formed between nanofibrils in the drying process, it is common to form agglomerates that are difficult to separate mechanically. For this reason, rehydration was applied. However, the presence of glycerol functioning as a surfactant caused the dispersion of NFC in the PLA without its agglomeration. The material remained under mechanical stirring in the same conditions for additional 80 minutes.

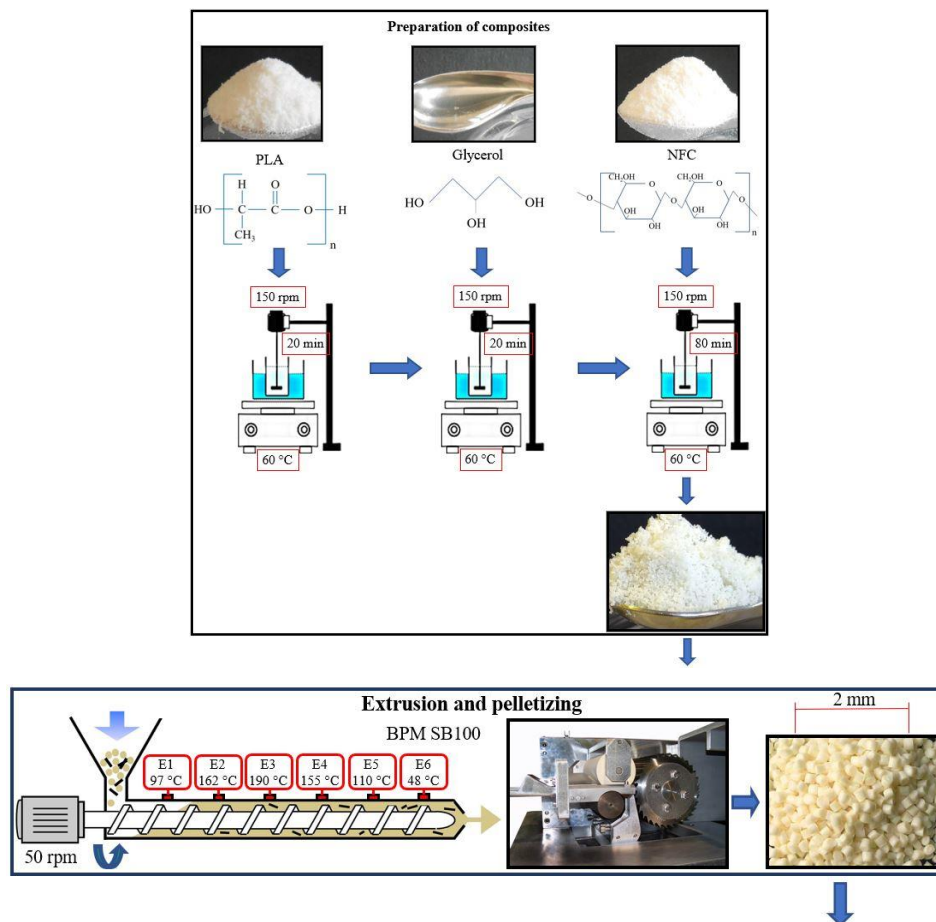
Several specimens of composites were created, including those made of neat PLA used for comparison. These proportions were determined based on theoretical references and previous works [18,27,31,32,33], according to the desired mechanical properties for the purpose of this work, in order to obtain a material with the maximum plastic deformation without great loss in strength, as a

consequence of the increase in toughness. The molding was used to obtain the specimens in type I standard shape and dimension, for the tensile strength test (ASTM D638, 2014) and in type 1A standard shape and dimension for the notched IZOD impact test (UNI EN ISO 180, 2001; ASTM D256, 2010), in the quantity of 4 units per test and per composite. For this, the master batches of each composite were extruded and pelletized in the form of granules with maximum dimension of 2 mm, using an extruder with BPM pelletizer model SB100 with 50 rpm double screw extruder speed. The pelleted granules were left to rest in a dry room for 24 hours and, before being placed in the injection funnel, returned to the oven and remained for 10 hours at a temperature of 60 °C and, right afterwards, injected in specific double molds using an Arburg model 370E injector with a speed of 10 cm/s. Pressure and settlement time during injection were 10 bar and 10 seconds. The mold was preheated to 80 °C with cooling time of 10 minutes. Thus, the specimens were created and received a designation as shown in Table 2.

Table 2 Designation and the proportions (wt%) of composites per specimen.

Specimens	PLA (%)	NFC (%)	Glycerol (%)
Neat PLA	100.0	0.0	0.0
PLANFC30/4	67.2	28.8	4.0
PLANFC30/6	65.8	28.2	6.0
PLANFC40/4	57.6	38.4	4.0
PLANFC40/6	56.4	37.6	6.0
PLANFC50/4	48.0	48.0	4.0
PLANFC50/6	47.0	47.0	6.0

The steps for obtaining the specimens are shown in Figure 5. The drying phase and the temperatures during extrusion and injection of the material were important to obtain good results. Humidity during injection can cause bubbles to form inside the components and surface defects. The correct processing temperature improves dispersion and prevents degradation of the phases.



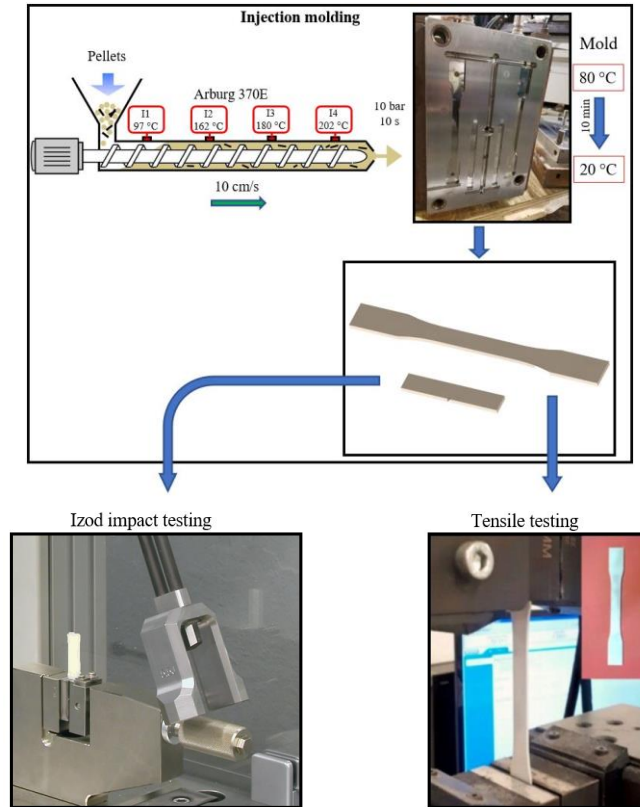


Figure 5 Flowchart of how specimens were obtained.

2.2. Thermal Tests, Measurements and Analysis of Mechanical Properties

After specimens were prepared, they were measured and weighed in order to establish their densities and the section to be submitted to tests. The first test performed was the tensile strength test, in order to provide the stress-strain curves from each material. For this, a universal testing machine Zwick Z010 with a full scale of 10 kN was used. The test was performed with 50 mm/min of traverse movement speed in a room with the temperature set at 21 °C and 55% of relative humidity. The main goal of this step is to verify the preliminary results and choose the 3 composites that showed the best ratio of modulus of elasticity to elongation at break. The minimum characteristics expected for the material are: modulus of elasticity about 3.0 GPa and minimum elongation at break of 7%. In order to verify the variations of toughness and glass transition temperature, Izod impact test and differential scanning calorimetry (DSC) test were performed. The DSC test, according to UNI EN ISO 11357-32 (ASTM D3418), was performed in a Linseis STA PT-1000 instrument, with a specimen between 12 and 15 mg, heated at 10 °C/min of velocity in a range from 25 °C to 250 °C in a hermetic box with nitrogen as carrier gas in constant flow of 50 mL/min, in order to measure the amount of energy needed to establish the thermal balance using inert material as reference. The degree of crystallinity (X_c) of materials was estimated using the specimen enthalpy of fusion [18]. The Izod impact (IS) test was performed according to UNI EN ISO 180 (ASTM D256) standard using Zwick equipment, model HIT25P, 25J (3.8 m/s) of full scale with room temperature at 22 °C. The “V” notch in the specimens must be performed after molding to avoid the stress concentrations during injection and solidification. For this purpose, a JT Tohsi notching tool type TVH 603 was used.

2.3. Finite Element Analysis for Mechanical Stress

To evaluate the material properties in the mathematical model, FEA was performed for the 3 composites chosen, with higher elongation at break without great loss of resistance, along with the neat PLA used for control. First of all, it was necessary to create a 3D model of the specimens before applying the material properties. Thus, the drawing of specimen models and their respective simulations were carried in the commercial software SolidWorks, which is capable of performing finite elements analysis with certain precision and with good market acceptance. For each material, the stress-strain curve was loaded, and the material properties were applied, according to previous tests and measurements. This procedure was necessary to verify if the 3D model simulation results matched the values obtained in the

physical tests. Previously, a 3D model mesh analysis convergence was performed. For this, meshes were created on the model, reducing the distance among nodes, and the strength of material was controlled on a reference node, one at a time for each simulation, until stabilization was achieved. By applying this procedure, it was possible to use the same meshing parameters, reproduce the test for each material and compare results from simulations and physical tests. In this case, the boundary conditions were replicated in the model as found in the experimental tests, the load applied accounted for 80% of strength yield (limit of proportionality - LOP strength) for each material, and the strength values (von Mises stress) were registered at a reference point (x:0; y:0; z:3.2). This procedure was performed decreasing the distance between nodes until the convergence of the strength values was reached.

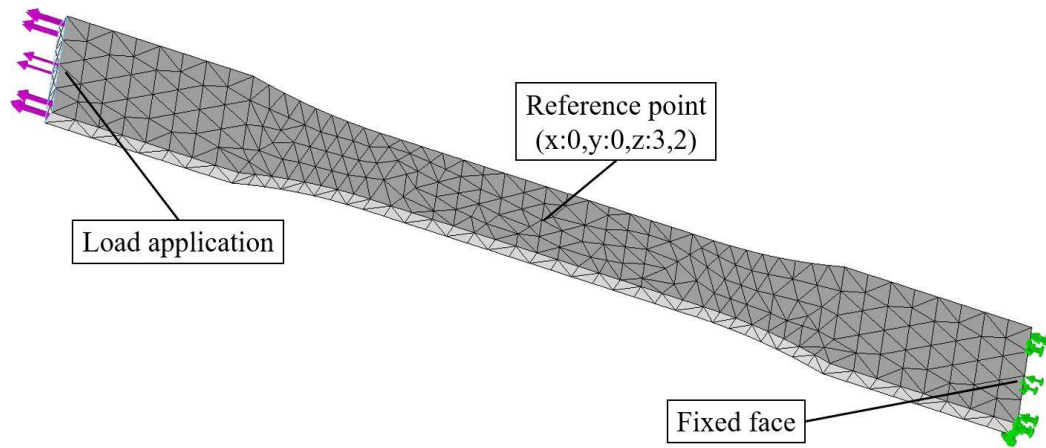


Figure 6 Specimen boundary conditions.

The convergence analysis of mesh is an important point in computational simulation that affects accuracy in the FEA results. This is related to the size of elements required to ensure that the results of an analysis are not affected by further decreases in mesh size, because a thinner mesh usually results in a more accurate solution. However, as a mesh becomes thinner, the calculation time increases. Therefore, the convergence analysis is required for all finite element analyses in order to reach accurate results using minimal computation resource. There are other techniques that aim to reduce error of approximation of a finite element model. These procedures, called refinements, are ways of increasing the degrees of freedom of the elements in a model, in order to reduce error of discretization in subsequent mesh convergences, applying different forms of elements, other than triangular, such as: quadrilateral, tetrahedral, hexahedral [42,43].

Additionally, the choice of material for a specific application must, initially, consider the intensity of the active stresses. Therefore, it is necessary to seek bases or criteria that allow such a judgment to be made. There are several failure criteria and their use relies largely on how the material absorbs deformation in a fragile or ductile way, i.e.; Mohr, Rankine, von Mises and Tresca. The von Mises criterion, for example, would be an evolution of the Tresca criterion for ductile materials, which are based on the shear stress as the cause of the material failure, a phenomenon easily observed in experimental uniaxial tensile tests on steel bars, where the failure occurs with plane displacement with a 45° inclination of the axis of force application, where the tension is maximum. The von Mises criteria consider the shape variation with constant volume, also based on experimental evidence from the tensile test, but declare that the flow of a material occurs when the distortion energy per unit volume of the material is equal to or greater than the energy of distortion per unit volume of the same material when it reaches the flow in a tensile test, which is represented by Equation 5 [41,42].

$$\sigma_{\text{von Mises}} = \sqrt{\frac{(S_x - S_y)^2 + (S_x - S_z)^2 + (S_y - S_z)^2 + 6(T_{xy}^2 + T_{xz}^2 + T_{yz}^2)}{2}}, \quad (5)$$

where: S_x is the normal strength on x direction; S_y is the normal strength on y direction; S_z is the normal strength on z direction; T_{xy} is the shear strength in y direction (YZ plane); T_{xz} is the shear strength in z direction (YZ plane); T_{yz} is the shear strength in z direction (XZ plane), T_{yx} is the shear strength in x direction (XZ plane), T_{zy} is the shear strength in y direction (XY plane) and T_{zx} is the shear strength in x direction (XY plane). A positive strength indicates tensile, and a negative one indicates compression. In practice, the Tresca criterion is more conservative than von Mises, having a recommended application in materials that present a very large plastic deformation, such as copper. The von Mises criteria have a broader application, as they are more accurate and suitable for ductile materials with less significant plastic deformation.

For the refinement of meshes with tetrahedral elements, the most practical way is to apply the tetrahedral mesh with the distance between nodes of the vertices defined in the convergence mesh process and choose the areas of greatest interest applying the same mesh, but with a shorter distance between the nodes producing a greater amount of elements in those areas. In the specific case of SolidWorks, the software application first uses the results calculated at special points of the elements, called Gaussian points or quadrature points, located within each element. Therefore, the simulation solver extrapolates the results found in the Gaussian points to calculate the stresses in the nodes and after a successful execution, these results are made available in the matrices with the results of the other nodes and, finally, of the elements. In a preliminary simulation, a mesh of tetrahedral elements with draft quality can be generated, formed by first order elements, where a very approximate result is obtained, but in a very short time. These first order elements have only one Gaussian point at the center of their volume. The second-order tetrahedral elements have four Gaussian points. As these elements are interconnected by the nodes, commonly each node can receive slightly different values from the other nodes of the elements to which they are attached. As an example, if a node is common to three elements, it will receive three values that are very close, but probably different. In this case, the element assumes a single stress value as the arithmetic average of the Gaussian points stress. Therefore, the stresses of an element and the tension in its nodes will always be different; however, a very large difference indicates that the mesh is not sufficiently refined at this location. Since the mesh quality is fundamental to the result accuracy, the software application uses two checks to assess the quality of the elements within the mesh: checking of proportion and Jacobian points. In case of a solid mesh, better precision is achieved with the dimensional uniformity of the elements, that is, elements with the same length as the edges, which find deformations during their formation in areas with small edges, curved geometries and pronounced corners. The proportion check controls the variation between edges of the deformed elements with the variation that in theory is perfect; therefore, the proportion is defined as the ratio between the longest and the shortest normal relative to a vertex opposite the normalized face of a perfect tetrahedron. The Jacobian point verification is based on a number of points drawn within each element. The software application currently provides Jacobian verification at 4, 16 and 29 Gaussian points or at nodes. The intermediate nodes created at the boundary edges of an element are placed in the real geometry of the model. At very pronounced or curved limits, these additions of nodes can cause the generation of distorted elements with invading edges, which returns a negative Jacobian matrix value for this element and, consequently, the software application indicates an error in the mesh formation. The greater the number of Jacobian points, the greater precision will be required in the construction of the mesh. The calculation time is directly proportional to the number of nodes and degrees of freedom that were determined for the mesh construction and depends mainly on the complexity of the model geometry, its volume and the boundary conditions involved. The result appears in the form of the geometric model, where the elements are replaced with the chromatic gradient of stress distribution in all regions of the component.

2.4. Method to Apply in the Case Study

Once good results were obtained in the specimen model finite element analysis and in the evaluation of the deviations between physical test and simulation results, it was possible to seek practical application, both of the produced composites and the stress analysis method. In this case, the objective was to evaluate the replacement of a component constructed in aluminum alloy 1060 H12 with a component constructed with the composite that presented the best characteristics for the application, that is, high modulus of elasticity and good toughness. The 1060 H12 aluminum alloy component is part of a tool used by a robot, for the application of double labels by pins welded on steel bars, in order to identify them. Each component is fixed in the frontal zone of the tool by two cylindrical M6 screws, and both assembled components serve as a reaction to the opening of the claws or clamps, while they keep the pins with the inserted labels, during the process of picking and placing, moving and welding the pins. The first analysis for the application conditions of the proposed composite was the temperature around the tool. For this, a temperature sensor, type k thermocouple was inserted next to one of the components and connected to a datalog, using the system programmable logic controller (PLC), capable of registering the temperature surrounding the component during the work cycles. Figure 7 shows the label welding tool design, the two 1060 H12 aluminum alloy components and the location where the type k thermocouple sensor for temperature measurement was placed.

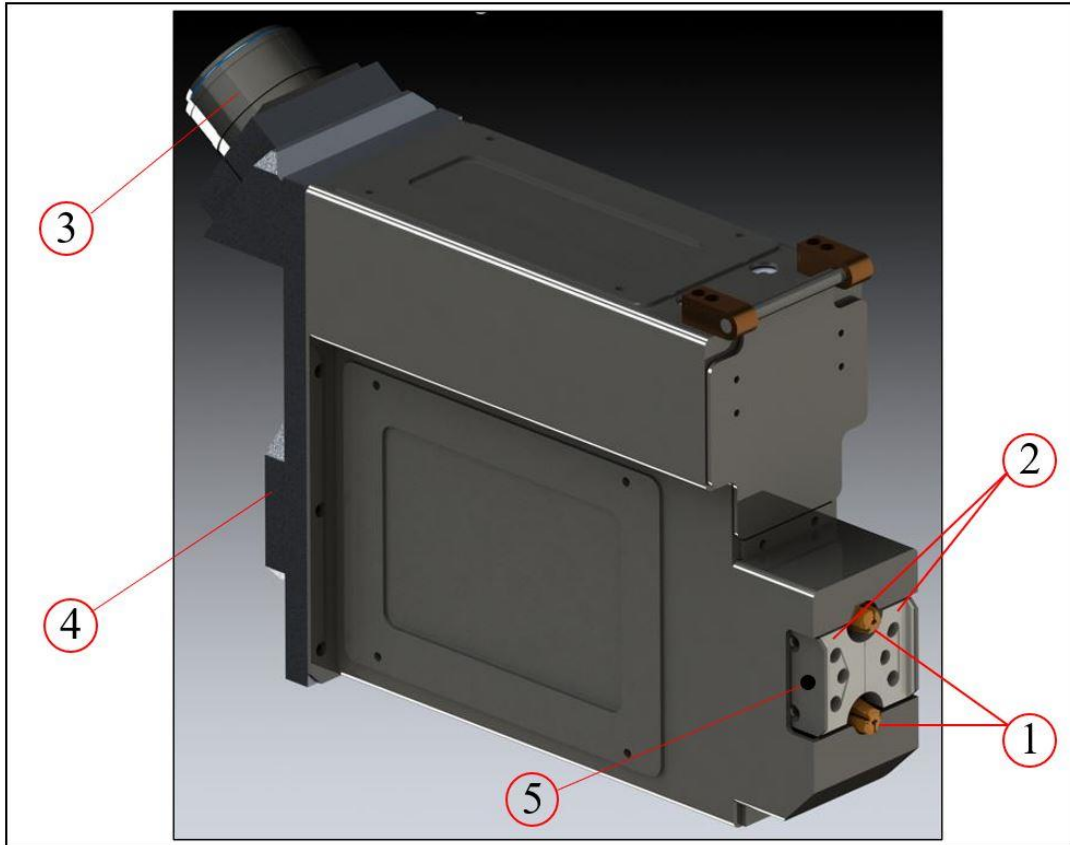


Figure 7 Overview of the robot tool for welding pins with tags. 1) tweezers or claws; 2) reaction components in aluminum alloy 1060 H12; 3) support for input of power and signal cables; 4) fixing plate to the robot's wrist; 5) indication of the place where the type k thermocouple was fixed.

Once it was confirmed that the temperature and ambient conditions were acceptable to use the composite, the mathematical model of the component was designed on the computer and the sequence of finite element analysis started with the mesh convergence process, as described in this section. Initially, as a first simulation, the aluminum alloy 1060 H12 was used as material in the model in order to confirm by numerical simulation its ability to meet the requirements for opening and closing the claws. Right afterwards the selected composite was applied, as the base material for the same component model. Hence, it was possible to evaluate its behavior, analyze failure conditions, modify the component geometry and search for solutions that could indicate technical feasibility for the replacement of the current material with the produced composite. The entire analysis process and results for this case study are described in detail in Section 3.1 of this paper. Figure 8 presents the simplified flowchart with the formation of stiffness, displacement and force vector matrices and calculation phases during the application of FEA, both for the component constructed with the aluminum alloy 1060 H12, and for the composite produced and chosen for substitution analysis.

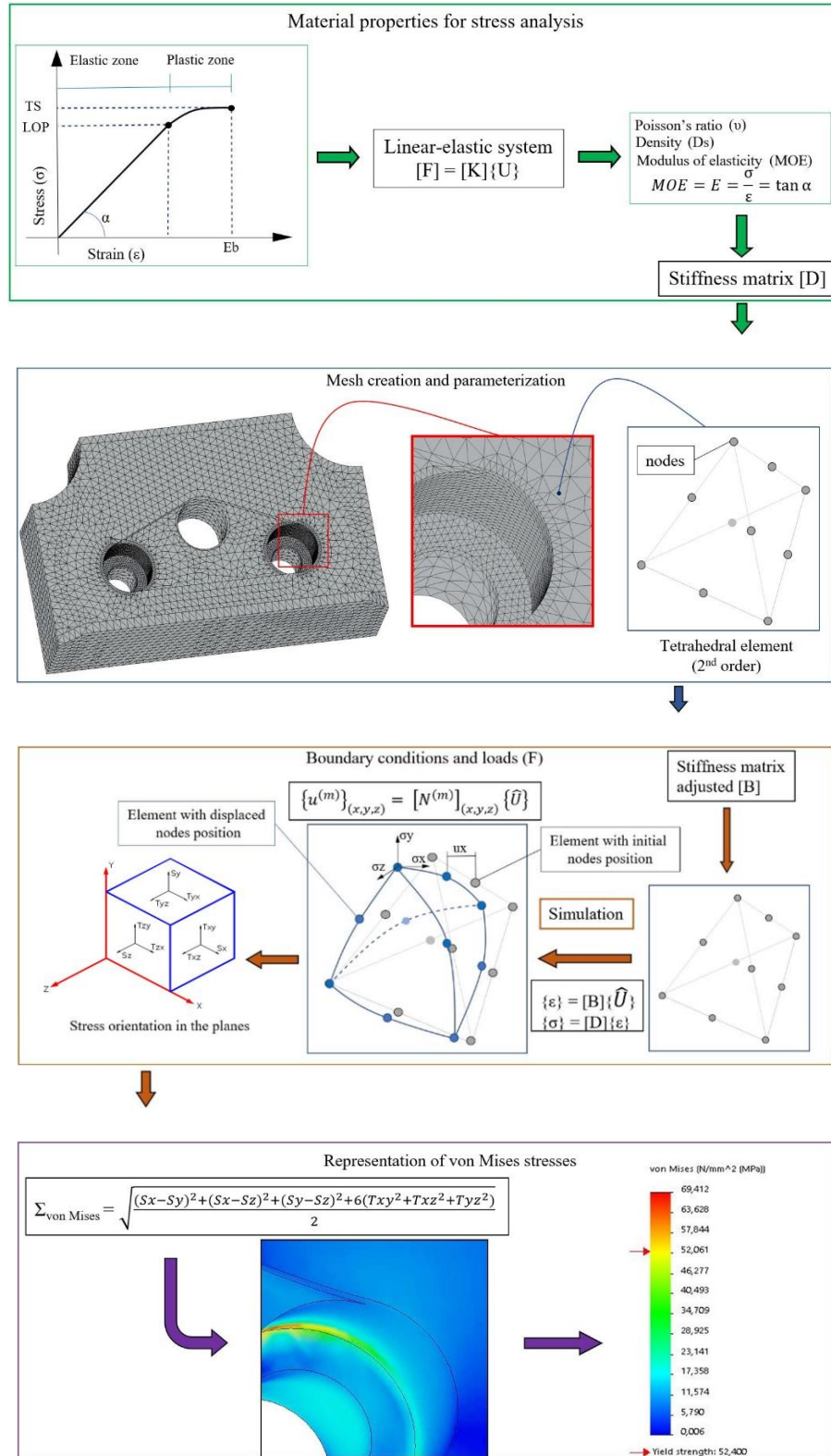


Figure 8 Simplified flowchart for calculating von Mises stress analysis with FEA in the case study presented.

3. Results and discussion

The key processes for obtaining homogeneous specimens of the composites produced were: avoid the agglomeration of NFCs throughout the process, improve their dispersion in the PLA, and control temperatures during extrusion and injection of the composites. For temperature control, the goal was to keep the temperature high enough for a low viscosity of the PLA, improving dispersion conditions of

the NFCs and maintaining good composite flow during extrusion and injection, but at the same time ensuring the temperature would not get too high, so as to avoid degradation of both PLA and NFCs. The heat slightly changed material color to a darker shade, but the visual result was homogeneous. The slow cooling in the mold, at a rate of 6 °C/min, aimed to inhibit the formation of micro cracks and undesirable increase of the material crystallinity degree. The mean values of tensile strength, modulus of elasticity, elongation at break, Poisson's ratio and density for each composite are shown in Table 3.

Table 3 Results of tensile testing highlighting the 3 best composites, which showed the best ratio of elongation to modulus of elasticity.

Specimens	Section (mm ²)	TS (MPa)	MOE (GPa)	Eb (%)	ν	Ds (g/cm ³)
Neat PLA	39.95	60.9 ±2.2	3.3 ±0.1	3.8 ±0.2	0.31 ±0.01	1.26 ±0.01
PLANFC30/4	39.88	55.2 ±1.8	2.9 ±0.1	6.3 ±0.3	0.32 ±0.01	1.27 ±0.01
PLANFC30/6	39.92	54.8 ±1.9	2.9 ±0.1	6.7 ±0.3	0.33 ±0.01	1.27 ±0.01
PLANFC40/4	39.98	56.1 ±2.3	3.2 ±0.1	7.4 ±0.3	0.33 ±0.01	1.28 ±0.01
PLANFC40/6	39.92	55.5 ±2.1	3.2 ±0.1	7.6 ±0.3	0.34 ±0.01	1.28 ±0.01
PLANFC50/4	39.96	59.5 ±2.8	3.2 ±0.1	6.9 ±0.5	0.33 ±0.01	1.28 ±0.01
PLANFC50/6	39.93	58.9 ±2.9	3.1 ±0.1	6.8 ±0.4	0.33 ±0.01	1.29 ±0.01

TS: Tensile strength; **MOE:** Modulus of elasticity;
Eb: Elongation at break; **ν :** Poisson's ratio; **Ds:** Density.

The objective of this step was to obtain composite materials that presented values for the modulus of elasticity around 3.0 GPa and deformation at rupture of 7% as a minimum value. Therefore, the composites that presented these characteristics were: PLANFC40/4, PLANFC40/6 and PLANFC50/4.

PLANFC40/6 showed a better ratio of elongation at break to modulus of elasticity, compared to neat PLA and other composites. This ratio of resistance to elongation is explained because, in addition to the material resistance to deforming elastically, signaled mainly by the high modulus of elasticity, it is expected that this material is also not as brittle and reacts well to impact efforts, in case of collision. Therefore, material elongation is also important, as it is a good indicator of the increase in toughness, which can be confirmed by the Impact test. The material is expected to be able to absorb a great deal of energy both in the elastic phase and in the plastic phase, before fracture. Therefore, in PLANFC40/6, compared to neat PLA, there was an approximate decrease of 3.1% in the MOE, a decrease of ~8.9% in the limit of tensile strength (TS) and an increase of ~101.3% in elongation at break (Eb), as shown in Table 3.

A reduction in strength with an increase in reinforcement content is not an expected or preferable result in composites. This phenomenon occurs due to the decrease in the load transmission interconnections in the polymeric matrix or its saturation, in this case, aggravated mainly by the plasticizer used, with the objective of increasing the plastic deformation of the material and consequently the increase in its toughness. As a result, the composite may not have characteristics superior to those that its components have individually; however, it is a way of adapting the material properties in terms of functionality and the desired characteristics for the final mechanical component. American standards ASTM 6400: 2004, European ISO EN 13432: 2002 and the Brazilian ABNT NBR 15448: 2008 allow PLA and other biodegradable polymers to aggregate other polymers/copolymers or even non-biodegradable material as stabilizing/plasticizing agents to improve their quality, up to 10% of their final weight, without losing their quality and classification as biodegradable material. In any case, the purpose of using the plasticizer was to make the composite less brittle. Therefore, the increase in deformation at break should correspond to an increase in its toughness. Table 4 presents the main values for the Izod and DSC impact tests.

Table 4 Results of Izod impact testing and main results of DSC test.

Specimens	IS (kJ/m ²)	Tg (°C)	Tm (°C)	Xc (%)
Neat PLA	6.4 ± 0.8	61.1	189.2	3.6
PLANFC30/4	10.0 ± 1.3	64.3	168.5	11.3
PLANFC30/6	10.1 ± 1.2	63.4	162.8	10.2
PLANFC40/4	11.2 ± 1.4	63.1	166.3	13.4
PLANFC40/6	11.6 ± 1.6	62.5	163.8	12.7
PLANFC50/4	10.1 ± 1.8	64.3	166.0	11.9
PLANFC50/6	10.0 ± 1.9	63.8	165.4	13.3

IS: Impact strength; **Tg:** Glass transition temperature;
Tm: Melting temperature; **Xc:** Degree of crystallinity.

Another effect in the use of plasticizers in composites is the decrease in glass transition temperature and melting point. This is a characteristic that limits the use of these materials in some applications and a minimum variation of these values was expected. In Table 4, these variations are observed for each specimen sample, which features the same ratio of reinforcement to plasticizer. A greater proportion of the reinforcement slightly increases glass transition temperature, and a greater proportion of the plasticizing agent tends to lower it. However, these values are higher than those found for neat PLA used in this work, as a result of NFC interactions within the PLA matrix. On the other hand, the melting temperature decreased, reaching a difference of 26.4 °C for the PLANFC30/6 composite compared to the melting temperature found for neat PLA. Also, in Table 4, there is an increase in the impact resistance (IS) values based on the proportion of the reinforcement and the plasticizer; this increase reached its maximum value in the PLANFC40/6 composite, showing a variation of ~81.2 % compared to neat PLA. The increase in the composite degree of crystallinity is linked to the increase in the reinforcement phase, given the PLA used in this work, basically formed by L-enantiomer (PLLA), which translates into a material considered amorphous. Additionally, the slow cooling of the specimens inside the mold minimized the increase in the material degree of crystallinity during solidification.

The stress-strain curves from materials PLANFC40/4, PLANFC40/6, PLANFC50/4 and also neat PLA (as reference) were entered in Solidworks software application as new materials and linked with their respective 3D model. Furthermore, the information of density and Poisson's ratio for each material was uploaded, obtained from the previous tests and measurements. The curves obtained from the physical tests and loaded in FEA software are presented in Figure 9. After that, it was possible to start with the meshing constructions for the 3D model and define the optimal strategy using the meshing parameters.

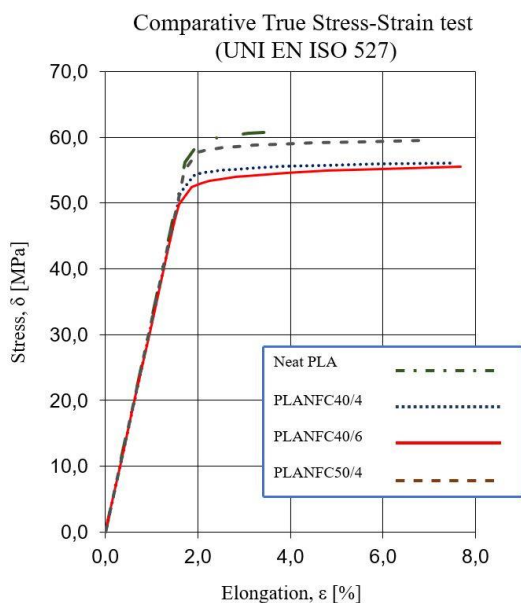


Figure 9 Overlapping stress-strain curves of the PLA/NFC composites and Neat.

The commercial software SolidWorks has an internal algorithm that, based on the geometry and volume of the component to be analyzed, automatically presents initial values for mesh parameters. However, the mesh convergence method was followed using the distance between vertex nodes as a progressive mesh thinning process to obtain convergence. Once the reference point in the geometry was defined (x: 0; y: 0; z: 3.2), for each simulation, distance values between the smallest nodes were followed, starting from 10 mm with decreases of 0.5 mm, with the corresponding stress values recorded on a spreadsheet. It is worth noting that, in various simulations, stress values show great variations, sometimes more and sometimes less, keeping the values of the boundary conditions unchanged, until, with progressive thinning, they reach an acceptable deviation. In this process, the boundary or material conditions do not change the results of mesh convergence, as there is a ratio of the model geometry to volume and how the elements fill the model, and for more complex shapes this convergence requires a smaller distance between vertex nodes and, therefore, a greater number of elements and nodes. In this phase, only second-order tetrahedral elements were used. Values obtained during mesh convergence are shown in Figure 10, where it was observed that the convergence followed with the distance between vertex nodes around 2 mm.

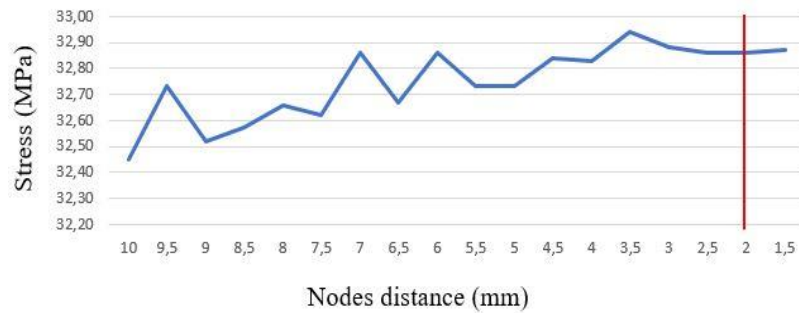


Figure 10 Result of meshing convergence to specimen simulation for PLANFC40/6.

For low-ductile materials observed, the von Mises condition in static simulations is in general the closest to the experimental data. There are other cases, however, in which the Tresca conditions seem to show better correspondence, when, for example, the material undergoes plastic deformation even with a constant value for the load, within its limit. Thus, the two methods can be considered equally applicable formulations. For the uniaxial stress states, the two criteria are equivalent, and in cases where the load conditions are the same in multiaxial stress states, the Tresca criterion provides for greater plastic deformation compared to the von Mises criterion, as the former is more conservative. The maximum deviation between the two models occurs for the state of pure shear. In this state of tension, based on the Tresca criterion, the failure occurs at ~87% of the von Mises stress value. Figure 11 shows the simulation in the specimen for the PLANFC40/6 composite, with the stress, in the indicated area, at the yield strength (LOP), that is, 52.4 MPa. In this case, for a better visualization of the stress distribution in the material, the von Mises stress range was limited between 27 MPa, as the minimum, up to the material rupture stress (55.5 MPa). Figure 12 below shows the fracture point of one of the same composite specimens, during the tensile test, where the greatest applied force reached the rupture stress at that point.

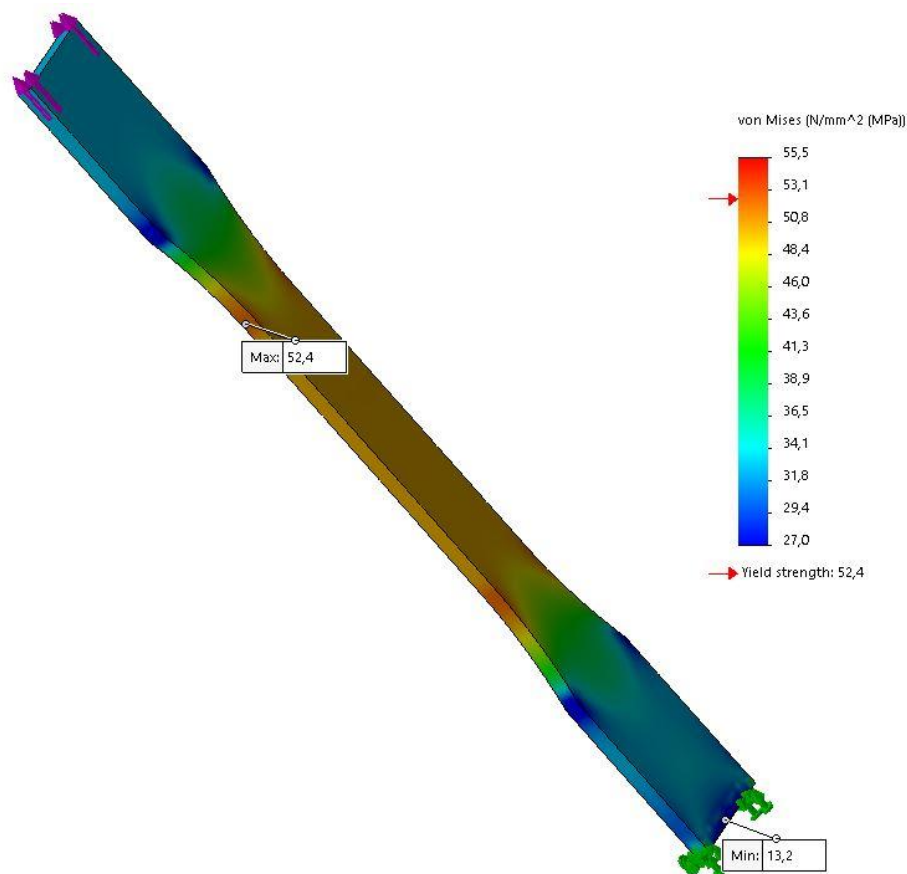


Figure 11 Distribution of von Mises stresses in the simulation for the PLANFC40/6 specimen.



Figure 12 Picture of the rupture of a composite specimen PLANFC40 6 during the tensile test.

In mesh parameters, two types of elements were used: tetrahedral and hexahedral in comparison, with the maximum distance between the vertex nodes defined during the mesh convergence process. The objective was to simulate the application of a load in the elastic zone, corresponding to 80% of the LOP, in order to verify the values for the von Mises stresses, compare with the physical tests (Real) and understand the deviations between both. The values obtained using meshes with second-order tetrahedral (FEA (T)) and second-order hexahedral (FEA (H)) elements are shown in Figure 13. All of these are average values and they presented, among samples with the same concentration, a deviation not exceeding 5%.

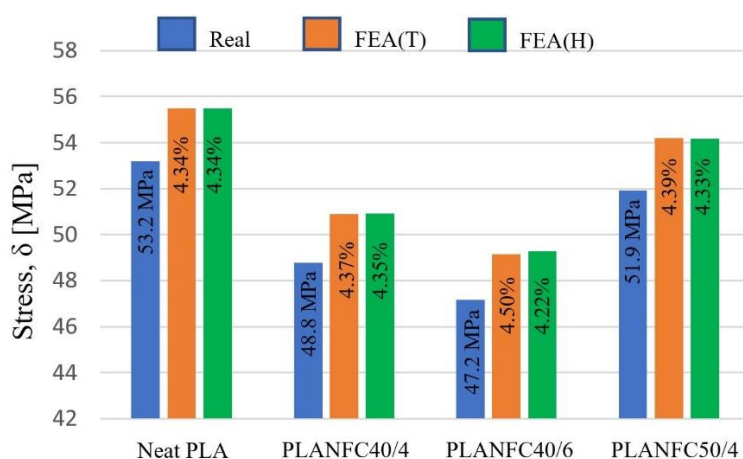


Figure 13 Deviation of physical test and simulation test of stress

There were no significant deviations between the results of the tetrahedral and hexahedral elements. This can be explained because the force was applied uniaxially and the stresses always follow a main axis, with no shear forces and simple model geometry. Therefore, there was no need for mesh refinement and new simulations. It is not that hexahedral elements are more accurate than tetrahedral elements; even though they have a higher GDL, what determines the best efficiency of one or the other element is the type of analysis and the component geometry [44]. Hexahedral elements are used to refine the mesh when there is application and distribution of loads in three dimensions, in non-linear systems and for fluid behavior analysis. In many cases, simple refinement of the tetrahedral mesh in specific areas where the problem arises can provide faster and more accurate results [44]. The deviations found between the simulations and the physical tests can be considered within an acceptable tolerance, because, to calculate the force applied to the final component, a safety factor is added, ranging between 1.5 and 2.0, depending on the component geometry and its function in the system. On the other hand, the design of the 3D component presents a model with an ideal structure without the dimensional and structural imperfections that could arise from the injection or molding process and from contraction during solidification.

Isotropic materials are those whose properties remain the same in all directions. It is worth noting that in crystalline and semi-crystalline materials a single crystal of the material structure is typically anisotropic; however, materials composed of crystal aggregates can be isotropic, since crystal aggregates are arranged in a random orientation (practically in all directions). Amorphous materials are generally isotropic because the molecular disorder reproduces statistically in all directions. Processes such as rolling, drawing and forging can make an anisotropic material, because they cause a preferential orientation of the grains in the crystal line. Composite materials are often anisotropic, thanks to the different mechanical properties of the matrix (binding agent) and reinforcement. The composites used in this research had a low degree of crystallinity and all materials were considered, in this work, homogeneous, isotropic and with elastic-linear behavior [41, 44, 45].

The final properties of a biopolymeric composite using nanofibrillated cellulose present a great variability in resistance, which is influenced by the plant species, harvest period, how far away the fiber is from the nodes in the plant stalks and, mainly, the way in which fibers are prepared and processed. Another procedure that has a great impact on the final result is the methodology applied to obtain the block of material or mechanical component: injection molding, blow molding and tape casting [30]. However, this research sought to apply all the techniques of easy availability that could produce components that maintained a good balance between modulus of elasticity and elongation of the plastic phase, that is, hardness and toughness.

3.1. Case Study

The objective of this case study was to evaluate and verify the practical application of a PLA/NFC composite to replace a mechanical component, produced in aluminum alloy 1060 H12, based on simulations using finite element analysis.

In this case, two equal mechanical components, produced in aluminum alloy 1060 H12, serve as a reaction to the opening of a system of double claws of a gripper, in a tool that is attached to the wrist of a robot (Figure 14). The material is expected to withstand 1500 N of force (value added with a safety factor of 1.5) in each operation to pick, place and support two pins, inserted in two labels, against a steel bar while they are welded in a double labeling process. The study aims to evaluate whether the PLA/NFC composite can be used to replace aluminum alloy 1060 H12.

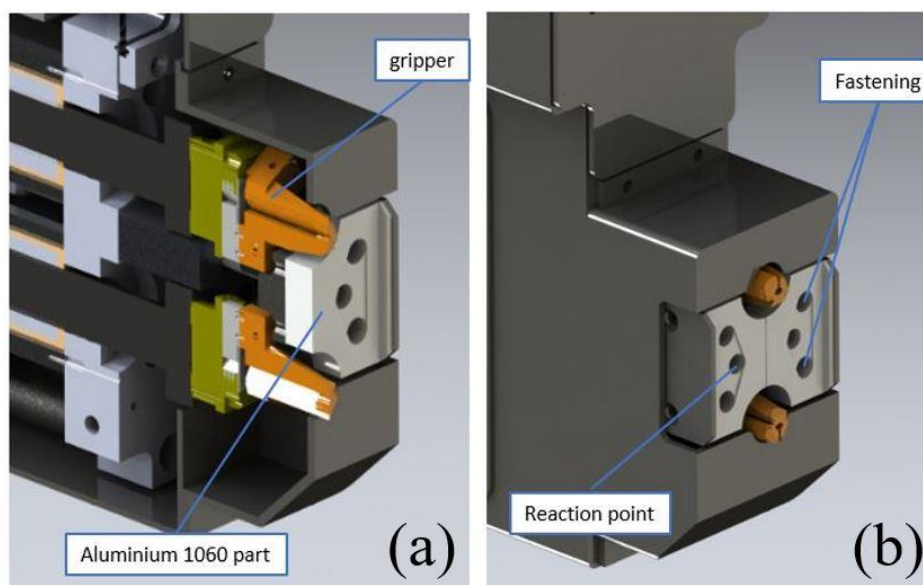


Figure 14 Positioning of parts on the robot tool: (10a) section of tool with gripper systems; (10b) reaction components, area of fastening to the tool, and area behind which the grippers find a reaction.

The first analysis was performed to understand the working temperature at which the part would be submitted, since polymers have a much lower melting temperature than metals and show a viscoelastic behavior from their glass transition temperature. For this purpose, a temperature sensor (thermocouple type k) was placed close to the component in order to record temperatures during operations, which could be established in a range from 10 °C to 50 °C. Additionally, it was necessary to make sure the component had no contact with substances or environment that could modify its properties or accelerate degradation. After that, the procedure for FEA started with a 3D model of the component reproducing the one in aluminum alloy currently in use, meshing parameters setup, meshing convergence procedures and continuous simulations with several different node distances in order to get convergence of the stress value in the point chosen as reference.

Before simulating with the composite that showed the best ratio of elongation at break to modulus of elasticity, PLANCF40/6, a simulation was performed with the current aluminum alloy in use, with the meshing parameter set with tetrahedral element (second order) and the distance among nodes of 1.5 mm, as determined during meshing convergence procedure. Figure 15 shows the result of simulation, confirming the capacity of the material to withstand the load, because the yield strength (75 MPa) is higher than the maximum stress found (~53.4 MPa).

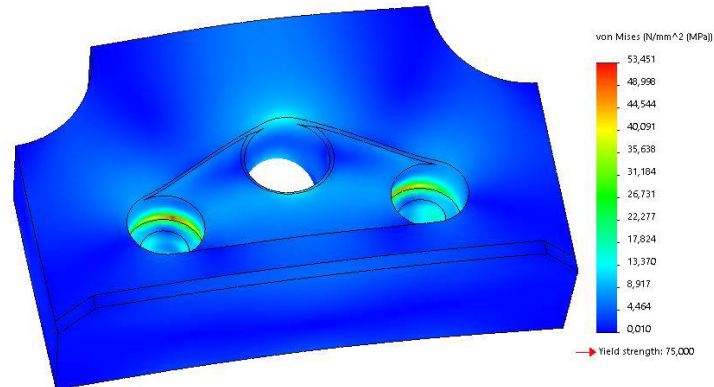


Figure 15 Result of simulation using the current 1060 H12 aluminum alloy in use.

Figure 16 shows the result of simulation using the PLANFC40/6 composite as material, where possible failure zones were found. In fact, the simulation with the load induced a stress area of ~69.4 MPa, which meant plastic deformation due to the composite yield strength of 52.4 MPa.

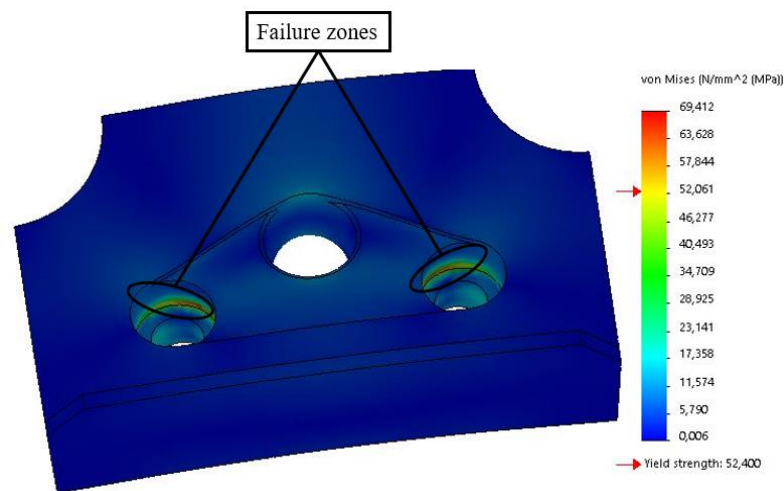


Figure 16 Result of simulation using the PLANFC40/6 composite as material.

For sharp corners, emergence of singularity zones is very common. This occurs during refinement of mesh elements, as they try to adapt to the sharp corner and have their volume close to zero, which, with the application of loads, returns very high stress values. Therefore, the characteristic behavior of a stress singularity is that the stress value continues to increase with mesh refinement in that area to values that tend to infinity. If the stresses at these points tend to converge to a finite value during mesh refinement, it means there is a legitimate concentration of stresses.

A possible change of screws was evaluated as an alternative solution, that is, changing the type of screws to obtain a recess that does not cause a concentration of stresses in these areas. The preceding aluminum component used M6 screws with cylindrical heads (DIN EN ISO 4762: 2004) and the alternative would be to replace them with a countersunk M6 screw (DIN EN ISO 10642: 2007). Hence, the 3D model was modified and new simulation was performed. Figure 17 shows the result.

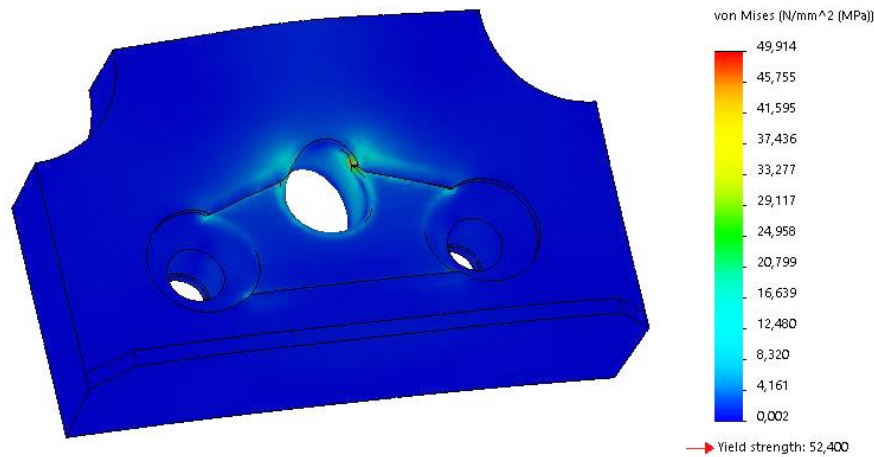


Figure 17 Result of simulation using the PLANFC40/6 composite as material with countersunk instead of counterbore hole.

This simple component modification using FEA shows the viability to use the material in this component, because the maximum stress found (~49.9 MPa) is lower than the yield strength of the composite (52.4 MPa). Figure 18 shows, in sections, the difference between the screw heads.

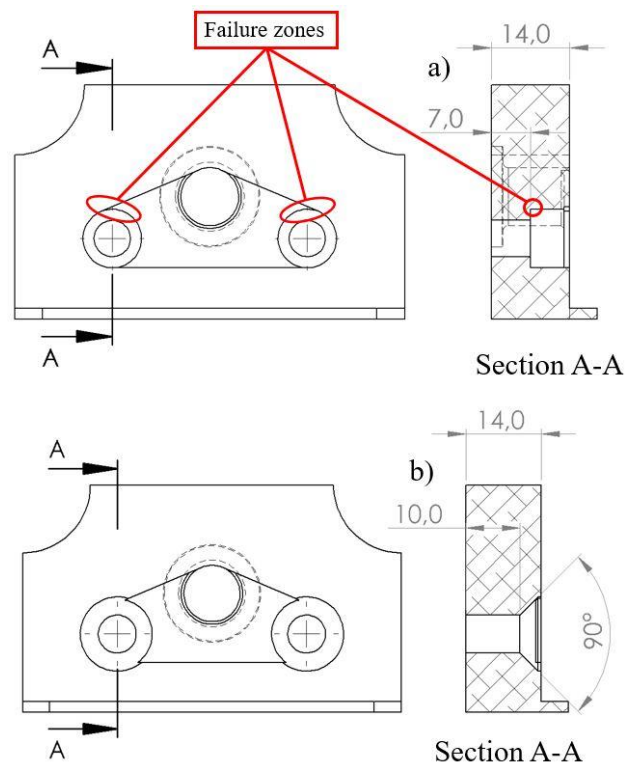


Figure 18 Section view with shape of screw heads: (18a) counterbore screw section of the component currently in use; (18b) section of alternative countersunk screw.

As shown in Figure 18a, when using cylindrical head screws, the material thickness continues absorbing the stresses of 7 mm, whereas with the use of countersunk screws (Figure 18b), the thickness goes up to 10 mm. In addition to that, the countersunk screw has a 45° inclined angle, rather than the sharp corner caused by the cylindrical counterbore.

Based on the simulations, a component was machined from a rough block of the composite PLANFC40/6 using the countersunk machining as housing for the M6 screw heads. In the machining process, cutting parameters close to polyvinyl chloride (PVC) were used: spindle speed of 6000 rpm, feed rate of 2200 mm/min, double helical milling cutter in HSS (high speed steel), with the use of

coolant, resulting in a good finish. After that, the component was mounted on the robot tool in place of one of the aluminum components, keeping the other component in the same location and the system was subjected to approximately 650 work cycles without showing any type of remarkable change. The component constructed with the produced composite PLANFC40/6 was disassembled after the work cycles for visual assessment, and is shown in Figure 19.

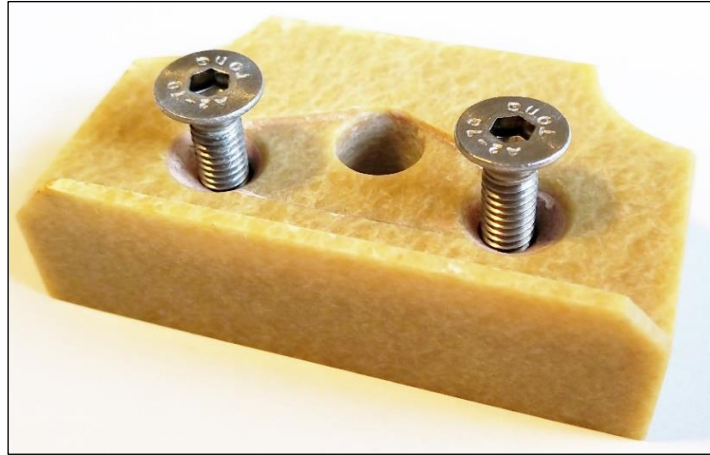


Figure 19 Component image after several working cycles with countersunk screws.

A fundamental issue in the application of robots is the relationship between load capacity and their radius of action, that is, a greater radius of action compromises the maximum weight that the robot can support for the tool on its wrist. Therefore, this payload is influenced not only by the total weight of the tool, but also by the distance from its barycenter to the robot wrist. The greater this distance, the lower the payload capacity, which is easily verified in the technical data sheets of each robot model. Therefore, it is very important to use lightweight components in the work tools. The aluminum parts, which weigh 160.6 g, can be replaced with those of the PLANFC40/6 composite, which weigh 76.2 g. This can be considered a significant advantage in terms of weight reduction, taking into account that the density of the PLANFC40/6 composite is 1.28 g/cm³, whereas the aluminum alloy 1060 H12 is 2.71 g/cm³. Another benefit noteworthy in this substitution, in view of the electric current that passes through the clamp and transmits to the pin during welding, is the dielectric strength of the PLANFC40/6 composite, considered insulating. Thus, it avoids the electrical insulation between the clamp and the component, which is necessary for the aluminum alloy component, as it is a material considered to be a good electrical conductor.

4. Conclusion

This work proposed a biocomposite material as an alternative to polymers of fossil origin, which are widely used today and can replace, in some cases, metallic materials. The use of biodegradable composites would reduce pollution and guarantee a renewable supply of raw materials. Additionally, this work presented a case study using numerical simulation to evaluate components built using these composites, and showing how important this technique is to evaluate, modify and support decision making through simulations, avoiding additional costs. Through the analysis of finite elements, it was possible to verify the difference between the results of a simulation of the tensile test and the real physical tests and, having this information in hands, numerically simulate the model behavior of a mechanical component, submitted to efforts, before actually building it. Another important aspect was the proposal of a composite material with good machinability characteristics and better toughness, thanks to the increase of its deformation in the plastic zone, without, however, causing a marked loss in its modulus of elasticity. This work was limited to considering the composites developed as isotropic materials, inferred by the low degree of crystallinity, which must be further investigated through new tests using specimens, at least, in the other two orthonormal directions. In addition to that, this work was limited to evaluating the material properties under a working temperature below glass transition temperature and without a fatigue test, which would determine the material limit based on cyclic stresses. Some of the conclusions associated with this study are as follows:

- The presented method resulted in composites with greater tenacity without, however, showing a great loss in their mechanical resistance.

- Biocomposites represent a good alternative, not only in the substitution of polymers of fossil origin, but also in some applications in the substitution of metallic materials.
- A reduction in mechanical strength with an increase in reinforcement content is not an expected or preferable result for composites. However, all the materials obtained resulted in a good ratio of modulus of elasticity to plastic deformation, an important factor in components that may suffer collisions and at the same time mechanical stresses without deforming or breaking.
- In the finite element analysis of the specimens, both second-order hexahedral and second-order tetrahedral elements were used, not indicating significant differences for von Mises stress between the respective composites, and the deviations found between these results and the physical test results for the specimens of each simulated composite indicated a deviation of less than 5%.
- The mechanical properties obtained in the composites also resulted in good behavior during the machining of the components, showing good finishing surface and dimensional stability, important factors in the production of mechanical components and, consequently, in the use of other cold forming processes, such as dies and cuts.
- The composite showed excellent specific modulus, which is the ratio of modulus of elasticity to weight.
- Through numerical simulations it was possible not only to evaluate the component submitted to efforts, but also, in a quick and simple way, find alternatives in the component geometry, which technically enabled the use of the PLANFC40/6 biocomposite to replace the component in aluminum alloy 1060 H12: a biodegradable material from renewable sources and approximately half the weight and, in this case, useful properties such as high dielectric strength.

Acknowledgements

This work was supported by the University of Lavras (UFLA), CAPES, CNPq and FAPEMIG.

References

- [1]Tsai, T. D. et al., The origins in the transformation of ambipolar to n-type pentacene-based organic field-effect transistors. *Organic Electronics*, v.15(8), p.1759-1766, 2014.
- [2]Arantes, A.C.C. et al., Bio-based thin films of cellulose nanofibrils and magnetite for potential application in green electronics. *Carbohydrate Polymers*, v. 207, p. 100-107, 2019.
- [3]Gremare A. et al., Characterization of printed PLA scaffolds for bone tissue engineering, *J Biomed Mater Res Part A*, 2017.
- [4]Royse S. Fabrication and characterization of biocomposites from polylactic acid and bamboo fibers [Thesis]. Nebraska (USA): University of Nebraska; 2012.
- [5]Kowalczyk, M. et al., Mechanical and thermal properties of PLA composites with cellulose nanofibers and standard size fibers. *Composites: Part A*, v. 42, p. 1509-1519, 2011.
- [6]Saba, N. and Jawaid, M., Recent advances in nanocellulose - based polymer nanocomposites cellulose – Reinforced nanofibre. *Composites*, p.89-112, 2017.
- [7]Abdulkhaliq, A. et al., A study of morphological, Thermal, mechanical and barrier properties of PLA based biocomposites prepared with micro and nano sized cellulosic fibers. *Cellulose Chemistry and Technology*, V.49 (7-8), p. 597-605, 2015.
- [8]Rudnik, E. et al., Compostable polymer materials – definitions, structures and methods of separation. *Compostable Polymer Materials*. [S.I.] Oxford: Elsevier, 2016.
- [9]Ghasemi, S. et al., Development of nanocellulose reinforced PLA nanocomposite by using maleated PLA (PLA-g-MA). *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, p.1-12, 2017.
- [10]Ramachandran, M. et al., Effect of nanotechnology in enhancing mechanical properties of composites materials. *International Journal on Textile Engineering and Processes*, v. 2, p. 59-63, 2016.
- [11]Okubo, K. et al., Multi-scale hybrid biocomposite: processing and mechanical characterization of bamboo fiber reinforced PLA with microfibrillated cellulose. *Composites: Part A*, v. 40, p. 469-475, 2009.
- [12]Liu, H et al., Interaction of microstructure and interfacial adhesion on impact performance of polylactide (PLA) ternary blends. *Macromolecules*, v. 44, n.6, 2011.
- [13]Brito, G. F. et al., Biopolímeros biodegradáveis e polímeros verdes. *Revista eletrônica de materiais e processos*, v. 62, p. 127-139, 2011.
- [14]Yunzi Hu et al., Newly Developed Techniques on Polycondensation, Ring-Opening Polymerization and Polymer Modification: Focus on Poly(Lactic Acid): *Materials* n° 9, 133, 2016.
- [15]Mokhena, T. C. et al., Thermoplastic processing of PLA/cellulose nanomaterials composites. *Polymers*, v. 10 (1363), p. 1-29, 2018.
- [16]Huneault, M. A.; Li, H., Morphology and properties of compatibilized polylactide/thermoplastic starch blends. *Polymers*. V.48, n.1, 2007.
- [17]Lim, L.T. et al., Processing technologies for poly(lactic acid). *Progress in Polymer Science*, v. 33, n. 8, 2008.
- [18]Fazita M.R.N. et al., Disposal options of bamboo fabric-reinforced poly(lactic) acid composites for sustainable packaging: biodegradability and recyclability, v. 67, p. 1476-1496, 2015.

- [19]K. P. Ashik and Ramesh Sharma, A review on mechanical properties of natural fiber reinforced hybrid polymer composites, *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering*, n. 3, p. 420-426, 2015.
- [20]Sharma, A. et al., Commercial application of cellulose nano-composites - A review, *Biotechnology Reports*, V.21, 2019.
- [21]Vásquez, Q. et al., Printing and encapsulation of electrical conductors on polylactic acid (PLA) for sensing applications, in: *Proceedings of the 27th IEEE Conference on MEMS*, p. 532–535, 2014.
- [22]S. Farah et al., Physical and mechanical properties of PLA, and their functions in widespread applications – A comprehensive review. *Advanced Drug Delivery Reviews*, *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 2016.
- [23]Morales A. et al., Bamboo-Polylactic acid (PLA) composite material for structural applications, *Materials*, 2017.
- [24]Honey B. et al., Fabrication and Study of mechanical properties of bamboo fibre reinforced bio-composites, *Innovative systems design and engineering*, v. 6, n1, 2015.
- [25]Ochi S., Flexural properties of long bamboo fiber/PLA composites: *Open Journal of Composite Material*, n. 5, p. 70-78, 2015.
- [26]Qian, S. and Sheng, K., PLA toughened by bamboo cellulose nanowhiskers: role of silane compatibilization on the PLA bionanocomposite properties. *Composites Science and Technology*, v. 148, p. 59-69, 2017.
- [27]Liu, Y. et al., Simultaneous enhancement of strength and toughness of PLA induced by miscibility variation with PVA. *Polymers*, v. 10(1178), p. 1-13, 2018.
- [28]Meng, X. et al., Toughening of nanocellulose/PLA composites via bio-epoxy interaction: mechanistic study,. *Materials and Design*, v. 139, p.188-197, 2018.
- [29]Chen, R. et al., Injection-moulded biocomposites from polylactic acid (PLA) and recycled carbon fibre: Evaluation of mechanical and thermal properties. *J. Thermoplast. Compos. Mater.* 27, p. 1286-1300, 2014.
- [30]Okurman K. et al., Review of the recent developments in cellulose nanocomposite processing, *Composites: Part A*, number 83, p. 2-18, 2016.
- [31]Hervy, M. et al., Mechanical response of multi-layer bacterial cellulose nanopaper reinforced polylactide laminated composites. *Compos. Part A*, v. 107, p. 155–163, 2018.
- [32]Xuan Wang et al., Influence of the lignin content on the properties of poly(lactic acid)/lignin-containing cellulose nanofibrils composite films, *Polymers*, 2018.
- [33]Yang J. et al., Applications of Lignocellulosic Fibers and Lignin in Bioplastics: A review, *Polymers*, 2019.
- [34]Khurma J. et al., Miscibility study of solution cast blends of poly(lactic acid) and poly(vinyl butyral),*The South Pacific Journal of Natural Science*, 2005.
- [35]Najihah J. et al., Characterization and preparation of Polyvinyl Alcohol (PVA) as Inhibitor in formation of hydrates, *International Journal of Current Science, Engineering and Technology*, v.1, p. 578-584, 2018.
- [36]Nagarajan, V. et al., Perspective on polylactic acid (PLA) based sustainable material for durable applications: focus on toughness and heat resistance. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, v. 4, p. 2899-2916, 2016.
- [37]Azmi, A. I. et al., Experimental study of machinability of GFRP composites by end milling. *Materials and Manufacturing Processes*, v. 27, p. 1045-1050, 2012.
- [38]Patel P. et al., Milling of polymer matrix composites: A review. *International Journal of Applied Engineering Research*, v. 13, n. 10, p. 7455-7465, 2018.
- [39]Rebouillat, S. And Pla, F., State of the art manufacturing and engineering of nanocellulose: a review of available data and industrial applications. *Journal of Biomaterials and Nanobiotechnology*, v. 4, p. 165-188, 2013.
- [40]Mishra V. et al., Precision machining of biopolymers: a brief review of the literature and case study on diamond turning. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, p. 1-22, 2019.
- [41]Naveen J. et al., Modelling of damage processes in biocomposites, fibre-reinforced composites and hybrid composites. *Woodhead Publishing Series in Composites Science and Engineering*, p. 153-170, 2019.
- [42]Sabau, E. et al., Mechanical behavior of composite materials using the finite element analysis. *MATEC Web of Conferences* n. 137 (08006), 2017.
- [43]Zhao, Y. et al., Novel mechanical models of tensile strength and elastic property of FDM AM PLA. *Materials and Design*, n. 181, 2019.
- [44] Sadrehaghghi, I. Assessment of meshing types & mesh quality: technical report. *CFD Open Series*, 2020, DOI: 10.13140/RG.2.2.25026.94404, 139 p.
- [45]Nurhanizar, M. et al., Finite element analysis of composites material for aerospace applications. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* n. 11 (012010), 2010.
-