

# Programa para a Modelagem da degradação de poliésteres biodegradáveis amorfos (Sem a difusão de Cadeia)

Esse programa tem como intuito realizar o calculo da Massa Molar de um poliester, no caso PLA, ao longo do tempo, desconsiderando a difusão de cadeias pequenas.

## Defnir Variaveis a serem utilizadas

```
global a GP m b k1 k2 n C0 Ce0 tf k2_ Rs0 t0 dt t1 t2 Rs1 Rs2 Mn1 Mn2
```

## Ler a entrada do Usuario

```
polimero = input('Qual polímero está sendo analisado? ', 's');  
massa_molar_media = input('Qual é a massa molar média do polímero? ');  
tf = input('Quantas Semanas vão ser avaliadas? ');
```

## Definir as Informações especificas de Cada Polimero

```
if strcmpi(polimero, 'PLA')  
    massa_molar_mere = 144.14; % Massa molar do mero do PLA (ácido láctico)  
    numero_ligacoes_ester = 1; % Número de ligações éster por mero do PLA  
    densidade_polimero = 1.24; % Densidade do PLA  
    C0 = 0; % Concentração inicial normalizada de grupos finais -COOH  
    k1 = 5E-4; % Constante de taxa de hidrólise para reação não catal.  
    k2_ = 0.0539; % Constante de taxa de hidrólise para reação autocatal.  
else  
    error('Polímero não suportado. Por favor, escolha PLA.');
```

## Calcular o grau de Polimerizacao (GP)

```
GP = massa_molar_media/massa_molar_mere;
```

## Calcular o numero total de ligações éster por unidade de volume (Ce0)

```
Ce0 = (densidade_polimero/massa_molar_mere)*numero_ligacoes_ester;
```

## Definir Constantes que serão utilizadas para o integrador do Matlab

```
n = 0.5; % Expoente de dissociação ácida de grupos -COOH  
k2 = (Ce0^n)*k2_; % Constante de taxa de hidrólise para reação autocatal.  
m = 4; % DP médio das cadeias curtas; adimensional  
a = 0.4; % Parâmetros empíricos para produção de cadeia curta  
b = 1; % parâmetros empíricos para produção de cadeia curta
```

## Chamar o Integrador e Calcular a Taxa de dissociação e Massa Molar

```
Rs0 = 0; % Numero de cadeias quebradas no inicio
t0 = 0; % Tempo inicial
dt = 1; % Passo de integração
```

### Integrador do Matlab

```
[t1,Rs1]=ode45(@calc_f_Rs, [t0 tf], Rs0);
```

### Método de Euler

```
t2 = t0:dt:tf;
Rs2 =zeros(size(t2));

Rs2(1)=Rs0;

for i = 2:length(t2)
    Rs2(i) = Rs2(i-1) + (1 - a*Rs2(i-1)^(b))*(k1+k2*((GP^-1)+Rs2(i-1))^(1/2))*dt;
end
t2 = t2';
Rs2 = Rs2';
```

### Calcular Massa Molar

```
Mn1 = (1 - a*Rs1.^b)./(1+GP.*(Rs1 - (a/m)*Rs1.^b));
Mn2 = (1 - a*Rs2.^b)./(1+GP.*(Rs2 - (a/m)*Rs2.^b));
```

### Plotar

```
hold on
plot(t1,Mn1,'Color', 'r', 'LineStyle', '--', 'Marker', 'none');
plot(t2,Mn2,'Color', 'r', 'LineStyle', '--', 'Marker', 'none');
title 'Massa Molar';
xlabel('Tempo (Semanas)');
ylabel('Massa Molar Média Normalizada');
legend('ODE45', 'Euler');
hold off
```

