

Mestrado Integrado em Engenharia Química

Simulação do processo de extrusão de compostos de borracha

Dissertação de Mestrado

de

Vítor Hugo Barros Pereira

Desenvolvida no âmbito da unidade curricular de Dissertação

realizado em

Continental Mabor - Indústria de Pneus, S.A.



Orientador na FEUP: **Prof. Manuel Alves**

Orientador na Continental Mabor: **Eng. Adriano Ribeiro**



Departamento de Engenharia Química

Julho de 2018

*“Normal people believe that if it ain’t broke, don’t fix it.
Engineers believe that if it ain’t broke, it doesn’t have enough features yet.”*

Scott Adams

Agradecimentos

Em primeiro lugar queria agradecer à Continental por ter me permitido passar esta experiência, onde me pude enriquecer, quer pessoal, quer profissionalmente.

Ao meu orientador, Engenheiro Adriano Ribeiro, por todo o apoio e disponibilidade que demonstrou, bem como a confiança que transmitiu em mim para a realização deste projeto.

A toda a Direção de Industrialização do Produto, quero agradecer por me terem recebido da melhor maneira e tornarem o período que aqui passei muito mais fácil e agradável. Um agradecimento especial à Engenheira Mariana Carvalho por estar sempre disponível para me ajudar quando precisava e ao Engenheiro Eduardo Vale pelos bons conselhos e por tudo que me ensinou e transmitiu durante o tempo que aqui estive.

Ao meu orientador na FEUP, Professor Manuel Alves, pela disponibilidade para me ajudar mesmo quando o tempo não era muito. O seu conhecimento foi fundamental para a realização deste trabalho e estou agradecido pela disponibilidade com que o me transmitiu.

Aos meus amigos que fiz durante estes últimos 5 anos no Porto, em especial o João, o Paulo e o Rúben, que me acompanharam nesta jornada na faculdade. Pelos fins numa final de tarde ou outro momento aleatório qualquer, um obrigado pela boa companhia e amizade.

Aos meus amigos de Ponte de Lima que, apesar de nos últimos anos não estar frequentemente com eles, sempre me fizeram, e ainda fazem, passar bons momentos. Um agradecimento especial ao Hélio, que veio comigo para o Porto e foi o melhor colega de casa que poderia ter durante estes 5 anos.

À Helena por estar sempre lá quando precisei, pelo apoio incondicional e por sempre me ouvir quando precisei. Estares ao meu lado tornou tudo mais fácil.

À minha irmã, Sofia, e ao meu cunhado, Daniel, por estarem sempre presentes, por me ajudarem e por me darem sempre os melhores conselhos. Aos meus sobrinhos, Miguel e Clara, por melhorarem sempre o meu dia e transmitirem a felicidade que só as crianças sabem dar.

Acima de tudo, quero deixar um agradecimento especial aos meus pais. Tudo isto apenas foi possível graças ao esforço incansável do meu pai e ao apoio incondicional da minha mãe. Lutaram muito para que eu pudesse chegar até aqui e nada disto teria sido possível sem vocês. Muito obrigado por tudo.

A todos que, direta ou indiretamente, me apoiaram até aqui, um muito obrigado.

Resumo

A presente dissertação descreve o trabalho realizado na empresa Continental Mabor - Indústria de Pneus S.A., em parceria com a Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto (FEUP).

O principal objetivo deste trabalho consiste na determinação do modelo reológico que melhor caracteriza o comportamento dos compostos de borracha durante o processo de extrusão. Devido ao efeito de memória e ao comportamento pseudoplástico dos compostos de borracha, estes compostos expandem à saída da extrusora. Este fenómeno é denominado de inchamento do extrudido (*die-swell* ou *extrudate swell*) e origina problemas no processo de fabrico, uma vez que são necessárias dimensões rigorosas nos diversos componentes do pneu.

Foram realizadas simulações utilizando os modelos reológicos de Giesekus e White-Metzner. Através da regra de Cox-Merz e do princípio da sobreposição tempo-temperatura, foi utilizada a equação de Carreau-Yasuda para ajustar o comportamento pseudoplástico dos compostos de borracha no modelo White-Metzner.

Para a execução das simulações foi utilizada a aplicação informática OpenFOAM®. Dentro deste programa, foi utilizado o módulo *rheoTool*, e especificamente o *solver rheoInterFoam*, que permite efetuar a simulação de escoamentos multifásicos com fluidos viscoelásticos.

Após a realização de várias simulações verificou-se que o modelo de White-Metzner representa adequadamente o comportamento dos compostos de borracha. Posteriormente, foram realizadas simulações de teste para validar os resultados obtidos. Assim, foi possível prever adequadamente o valor do inchamento do extrudido para dois compostos de borracha diferentes, habitualmente usados no fabrico de pneus.

Com um maior desenvolvimento deste trabalho, futuramente, será possível utilizar simulação para efetuar o design das cabeças de extrusão (conjunto “flow-channel” e pré-fieira) a utilizar na produção. Como são construídas num curto espaço de tempo e em grande quantidade, caso se consiga ultrapassar o problema do elevado tempo de simulação, também será possível fazer a construção de fieiras baseadas nos resultados provenientes das simulações

Palavras Chave: Extrusão; Inchamento do extrudido; OpenFOAM®; *rheoTool*; Modelo de Giesekus; Modelo de White-Metzner

Abstract

This dissertation describes the work carried out at the company Continental Mabor - Indústria de Pneus S.A. in partnership with the Faculty of Engineering of the University of Porto (FEUP).

The main objective of this work is to determine the rheological model that better characterizes the behavior of rubber compounds during the extrusion process. Due to the memory effect and the pseudoplastic behavior of the rubber compounds, they expand at the extruder exit. This phenomenon is called die-swell, or extrudate swell, and causes problems during manufacturing process, since strict dimensions are required for the various components of the tire.

Simulations were run using the Giesekus and the White-Metzner rheological models. Using the Cox-Merz rule and the time-temperature superposition principle, the Carreau-Yasuda equation was fitted to the experimental data to describe the relaxation time and viscosity as function of shear rate, to be then implemented in the White-Metzner model.

The computer application OpenFOAM[®] was used to perform the simulations. Within this open source program, the rheoTool module was used, and specifically the rheoInterFoam solver was used in the simulations of multiphase flows of viscoelastic fluids.

After several simulations, it was found that the White-Metzner model represents adequately the behavior of the rubber compounds. Subsequently, test simulations were performed to validate the obtained results, showing that it was possible to predict adequately the die-swell of two different rubber compounds.

With further development of this work, in the future, it will be possible to use simulation data to design extruder heads (fluid flow channel and pre-extruder die). Because of the short time needed to design an extruder die, if the high computational time can be overcome, it will be also possible to design extrusion dies with the simulation data.

Keywords: Extrusion; die swell; extrudate swell; OpenFOAM[®]; *rheoTool*; Giesekus model; White-Metzner model

Declaração

Declara, sob compromisso de honra, que este trabalho é original e que todas as contribuições não originais foram devidamente referenciadas com identificação da fonte.

06/09/2018

Vitor Hugo Barros Pereira
(Vitor Hugo Barros Pereira)

Índice

1	Introdução.....	1
1.1	Enquadramento e Apresentação do Projeto	1
1.2	Apresentação da Empresa	2
1.3	Contributos do Trabalho.....	3
1.4	Organização da Tese	3
2	Contexto e Estado da Arte	5
2.1	O Pneu e a sua estrutura	5
2.2	Composição do Pneu	7
2.2.1	Borracha	7
2.2.2	Enchedores	8
2.2.3	Materiais de reforço	10
2.2.4	Auxiliares de processamento.....	10
2.2.5	Agentes de vulcanização.....	10
2.2.6	Agentes de proteção.....	11
2.3	Processo de produção.....	12
2.4	Extrusão	13
2.4.1	Fundamentos teóricos.....	15
3	Aplicação Informática OpenFOAM®	19
4	Resultados e Discussão.....	25
4.1	Determinação dos parâmetros de Carreau-Yasuda para os compostos de borracha 25	
4.2	Caracterização das simulações	27
4.3	Resultados das simulações	33
4.3.1	Modelo de Giesekus.....	33
4.3.2	Modelo de White-Metzner	36
5	Conclusões	45
6	Avaliação do Trabalho Realizado	47

6.1	Objetivos Realizados	47
6.2	Limitações e Trabalho Futuro	47
6.3	Apreciação Final	48
	Referências	49
Anexo 1	Ajuste ao modelo de Maxwell.....	51
Anexo 2	Estimativa de parâmetros de Carreau-Yasuda para outros compostos	53

Lista de Figuras

<i>Figura 1 - Secção de corte de um pneu radial ligeiro e seus principais componentes (Continental 2015).</i>	5
<i>Figura 2 - Distribuição dos ingredientes num pneu radial ligeiro (DIP 2017).</i>	7
<i>Figura 3 - Estrutura do negro de fumo (Hamed 2012).</i>	9
<i>Figura 4 - Reação de silanização. Adaptado de Rodgers e Waddell (2013a).</i>	9
<i>Figura 5 - Esquema da reação de vulcanização (Coran 2013).</i>	11
<i>Figura 6 - Esquema ilustrativo da calandragem (Tadmor e Gogos 2006).</i>	12
<i>Figura 7 - Esquema de uma extrusora de parafuso. (Rauwendaal et al. 2002)</i>	13
<i>Figura 8 - Principais instabilidades no escoamento de um fluido na extrusão (a-escoamento normal, b-sharkskin, c-stick-spurt, d-super-escoamento, e-melt fracture). (Agassant et al. 2006).</i>	14
<i>Figura 9 - Efeito do inchamento do extrudido numa fieira. Adaptado de Rauwendaal (2014e).</i>	15
<i>Figura 10 - Modelo de Rouse. Adaptado de (Giesekus 1982).</i>	17
<i>Figura 11 - Estrutura hierárquica de pastas e ficheiros para a realização de uma simulação</i>	20
<i>Figura 12 - Interface gráfica ParaView</i>	24
<i>Figura 13 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T08846</i>	26
<i>Figura 14 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T12301</i>	26
<i>Figura 15 - Fieira utilizada nos ensaios de extrusão e respetivo esquema da geometria (Carvalho 2017)</i>	28
<i>Figura 16 - Esquema da pré-fieira de uma extrusora. Dimensões em milímetros.</i>	28
<i>Figura 17 - Grelha utilizada para as simulações e respetivas ampliações</i>	30
<i>Figura 18 - Representação da interface borracha-ar para o início da simulação</i>	33
<i>Figura 19 - Inchamento do extrudido para $\alpha = 0,2$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)</i>	34
<i>Figura 20 - Campo da magnitude de velocidade (m/s) para $\alpha = 0,2$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)</i>	34
<i>Figura 21 - Campo da magnitude do tensor das tensões (Pa) e aumento da zona de expansão do fluido para $\alpha = 0,2$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)</i>	34
<i>Figura 22 - Inchamento do extrudido obtido para $\alpha = 0,5$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)</i>	35
<i>Figura 23 - Exemplo de uma instabilidade obtida para $\alpha = 0,5$, $Re=6,88 \times 10^{-7}$ e $De=520,2$. Interface (em cima) e campo de tensões (em baixo).</i>	36
<i>Figura 24 - Inchamento do extrudido do composto T08846 previsto com o modelo de White-Metzner ($Re=0,06$; $De=757,7$)</i>	37

Figura 25 - Campo da magnitude de velocidade (m/s) do composto T08846 previsto com o modelo de White-Metzner (Re=0,06; De=757,7) 37

Figura 26 - Campo da magnitude do tensor de tensões (Pa) do composto T08846 previsto com o modelo de White-Metzner e respectivo zoom (Re=0,06; De=757,7)..... 37

Figura 27 - Inchamento do extrudido do composto T12301 previsto com o modelo de White-Metzner (Re=0,13; De=809,2) 38

Figura 28 - Campo da magnitude de velocidade (m/s) do composto T12301 previsto com o modelo de White-Metzner (Re=0,13; De=809,2) 38

Figura 29 - Campo de magnitude do tensor de tensões (Pa) do composto T12301 previsto com o modelo de White-Metzner e respectivo zoom (Re=0,13; De=809,2)..... 38

Figura 30 - Esquema das alterações à grelha para os testes de refinamento de grelha 39

Figura 31 - Evolução do inchamento do extrudido com o tempo para diferentes grelhas. Composto T08846, Re=0,06; De=757,68 (Modelo de White-Metzner) 40

Figura 32 - Teste à influência da massa volúmica do fluido. Composto T08846. Modelo de White-Metzner; Simulação Original: Re=0,06; De=757,7; Simulação Teste: Re=0,006; De=757,7 41

Figura 33 - Teste à influência das propriedades do segundo fluido. Composto T08846; Re=0,06; De=757,7 (Modelo de White-Metzner) 42

Notação e Glossário

u	Vetor velocidade	m/s
t	Tempo	s
f	Força externa por unidade de volume	N/m ³
c	Tensor conformação	
I	Matriz identidade	
G	Módulo de elasticidade	Pa
K, L	Parâmetros do modelo de Carreau-Yasuda	s
a, b, m, n	Parâmetros do modelo de Carreau-Yasuda	
Co	Número de Courant	
S	Superfície do volume de controlo	m ²
S_R	Inchamento do extrudido	
h	Altura da interface	m
L	Altura da fieira	m
t_d	Tempo difusivo	s
Re	Número de Reynolds	
De	Número de Deborah	
Wi	Número de Weissenberg	

Letras gregas

λ	Tempo de relaxação	s
η	Viscosidade	Pa·s
ρ	Massa volúmica	kg/m ³
τ	Tensor das tensões	Pa
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação	s ⁻¹
β	Razão da viscosidade do solvente	
α	Parâmetro do modelo de Giesekus	
Ω	Volume de controlo	m ³
ϕ	Variável genérica	
α_T	Fator de deslocamento horizontal	

Índices

S	Contribuição do solvente
P	Contribuição do polímero
f	Contador

Acrónimos

RFL	Resorcinol-Formaldeído-Mergulho
CBS	N-ciclohexil-2-benzotiazolsulfonamida
MBTS	Dissulfeto de benzotiazol
DPG	Difenil-guanidina
CTP	N-Ciclohexil tioftalimida
RPA	Analizador de Processamento de Borracha

1 Introdução

1.1 Enquadramento e Apresentação do Projeto

O pneu é uma das peças mais importantes na área dos transportes. Dada a sua enorme variedade de aplicações, desde os veículos de passageiros até veículos agrícolas, entre outros, os pneus têm uma enorme variedade de requisitos no que diz respeito à função que desempenham. Resistência ao rolamento e à abrasão, grande capacidade de carga, ou promover o conforto, são algumas das características para as quais um pneu pode ser desenvolvido, dependendo da sua aplicação.

Um pneu consiste essencialmente de um compósito de borracha, têxtil e metal, contando com cerca de dez componentes diferentes e uma ainda maior variedade de matérias-primas. Tal como seria de esperar, a produção de um pneu é feita de acordo com as propriedades finais pretendidas para este, principalmente no que diz respeito à sua composição. Essa manufatura consiste em cinco fases: mistura, preparação, construção, vulcanização e inspeção final.

Na mistura são preparados os compostos de borracha de acordo com as especificações pretendidas. Dependendo do componente do pneu em causa, os compostos de borracha podem ter diferentes composições que, conseqüentemente, vão determinar as suas propriedades. Passando para a preparação, estes compostos são reencaminhados para três processos diferentes, dependendo da sua aplicação: extrusão, calandragem e corte, onde cada componente adquire a forma necessária para a fase seguinte: a construção. Na construção, cada um dos componentes é montado para formar o pneu em verde (não vulcanizado) que posteriormente é vulcanizado. A reação de vulcanização vai aumentar o número de ligações cruzadas do polímero, aumentando a sua elasticidade e diminuindo a plasticidade. Nesta fase, o pneu adquire a sua forma final. Por último, é realizada uma inspeção final para garantir que o pneu não tem nenhum defeito e cumpre todas as especificações.

Este trabalho vai-se concentrar no processo de extrusão dos compostos que originam o piso dos pneus. Este processo consiste na passagem forçada de um composto de borracha por uma abertura, doravante denominada fieira, adquirindo a sua forma. Devido às propriedades viscoelásticas da borracha e do seu efeito de memória, habitualmente ocorre algum inchamento após a saída da fieira. A este fenómeno dá-se o nome de inchamento do extrudido (*die-swell* ou *extrudate swell*). Devido à ocorrência deste fenómeno, o extrudido adquire dimensões diferentes das da fieira. Para obter as dimensões pretendidas, recorre-se a um processo iterativo que tem como base a experiência e a sensibilidade dos operadores, o que leva ao desperdício de tempo e de matérias-primas. Para além do inchamento do extrudido, uma das maiores dificuldades reportadas pelos operadores de fieiras está relacionada com a previsão do

escoamento da borracha após ser feita uma correção na feira. Quando os operadores tentam corrigir uma dimensão do extrudido num ponto, ao alterar a feira, a borracha desenvolve outro escoamento que vai provocar alterações dimensionais noutros pontos do extrudido. Esta é uma das principais razões pelo qual este processo empírico é demorado.

Foi destas dificuldades que nasceu a necessidade de prever estes efeitos através da simulação computacional de dinâmica de fluidos. Utilizando as propriedades reológicas determinadas anteriormente por Carvalho (2017), o objetivo deste trabalho passa por determinar o inchamento do extrudido e prever o escoamento da borracha recorrendo à aplicação informática de acesso livre (*opensource*) *rheoTool* (Pimenta e Alves 2018) implementada no OpenFOAM®. Para isso, o principal objetivo consiste em averiguar qual o modelo reológico que melhor representa o comportamento viscoelástico da borracha. Inicialmente são realizadas simulações em duas dimensões (2D), assumindo condições de placa infinita na direção perpendicular ao plano do escoamento, uma vez que o piso tem uma largura muito superior à altura. Após se encontrar o modelo constitutivo mais adequado, o objetivo passa por simular em três dimensões (3D) todo o perfil do piso do pneu.

1.2 Apresentação da Empresa

O grupo Continental AG (*Automotive Group*), fundado em outubro de 1871, começou por fabricar artefactos de borracha flexível e pneus maciços para carruagens e bicicletas. Desde então, acompanhou a evolução da indústria dos pneumáticos e diversificou por várias áreas da indústria automóvel sendo especialista em sistemas de travagem, controlos dinâmicos para viaturas, tecnologias de transmissão de potência, sistemas eletrónicos e sensores. Para além de tudo isto, o Grupo Continental produz componentes para o fabrico de maquinaria para a indústria mineira, mobiliária e de impressão (Mabor 2017b).

Em 1946, a Mabor - Manufatura Nacional de Borracha, S.A. tornou-se a primeira fábrica de pneumáticos em Portugal. Foi mais tarde, em 1989, que a Mabor se uniu à Continental AG surgindo assim em Lousado a Continental Mabor - Indústria de Pneus, S.A.. Após sofrer uma reestruturação, esta unidade iniciou produção em 1990 com uma produção média de 5000 pneus/dia, contando atualmente com uma produção média de 56000 pneus/dia. A gama de pneus produzida é variada, desde pneus de alta performance, a pneus ContiSeal e ContiSilent, e varia de jante de 14" até 22". Cerca de 60% desta produção destina-se ao mercado de substituição e a restante destina-se à linha de montagem de vários e prestigiados construtores da indústria automóvel. De notar que cerca de 98% da produção é destinada à exportação. Em finais de 2016 a Continental Mabor contava com cerca de 1900 colaboradores (Mabor 2017a).

Organizada em doze direções diferentes, há que realçar a Direção de Industrialização do Produto onde foi realizado todo o trabalho que irá ser descrito nesta dissertação, e a Direção de Produção que também interveio quando necessário.

O principal lema do Grupo Continental é “Valores que criam valor” e assenta em quatro pilares: confiança, paixão por vencer, liberdade para agir e uns pelos outros. Estes são os ideais que suportam o desenvolvimento, o trabalho em equipa e o sucesso sustentável desta empresa (Mabor 2017c).

1.3 Contributos do Trabalho

O objetivo principal deste trabalho é determinar qual o melhor modelo para representar a borracha na simulação do processo de extrusão. Para isso, após um período inicial de familiarização com o OpenFOAM®, foram feitas várias simulações para averiguar quais os principais problemas a resolver e para determinar qual o melhor modelo. De seguida, foi determinado o modelo mais adequado e foi testada a viabilidade dos resultados obtidos.

As propriedades dos compostos de borracha utilizados nas simulações foram determinadas por Carvalho (2017) e o *rheoTool*, extensão implementada no OpenFOAM® utilizada nas simulações, foi desenvolvido por Pimenta e Alves (2018)

1.4 Organização da Tese

O trabalho apresentado está estruturado em seis capítulos. De seguida é detalhada a constituição de cada um deles.

No capítulo 1, Introdução, faz-se uma apresentação do tema a tratar nesta dissertação bem como da empresa em que foi realizado. São também mencionados os principais aspetos a tratar neste capítulo durante a realização deste trabalho.

No capítulo 2, Contexto e Estado da Arte, é descrito mais detalhadamente, a constituição e composição do pneu e o seu método de produção. O processo de extrusão é descrito com maior detalhe, uma vez que se trata da questão central deste trabalho, e os fundamentos teóricos relacionados com o escoamento da borracha durante esse processo.

No capítulo 3, Aplicação Informática OpenFOAM®, é apresentada a aplicação informática utilizada para as simulações do processo de extrusão. É também descrita a árvore de diretórios necessários para efetuar uma simulação, e quais as principais características dos ficheiros que lá se encontram.

De seguida, no capítulo 4, Resultados e Discussão, são apresentados e discutidos os principais resultados obtidos. São apresentadas as principais características da grelha utilizada para

simulação e quais as suas principais condicionantes para as simulações. De seguida são apresentados os principais resultados das simulações para os modelos utilizados.

No capítulo 5, Conclusões, apresentam-se as principais conclusões que vão caracterizar o trabalho realizado.

Por último, no capítulo 6, Avaliação do Trabalho Realizado, é feita uma reflexão crítica sobre o trabalho desenvolvido nesta dissertação, e são apresentadas sugestões para trabalho futuro.

2 Contexto e Estado da Arte

2.1 O Pneu e a sua estrutura

Foi em meados do século XIX que uma das invenções mais importantes para a humanidade, a roda, sofreu dois grandes avanços tecnológicos que determinaram a história desta ferramenta. Primeiro, em 1839, Charles Goodyear inventou a vulcanização: processo que permitiu que a borracha vulcanizada substituísse o metal, a madeira e o couro, materiais utilizados até então, mas que devido à sua dureza, tornavam a viagem muito desconfortável. A partir daí, a roda começou a ser feita em borracha maciça que, apesar de ser melhor que os materiais anteriormente utilizados, ainda não permitia uma viagem muito confortável. E foi daí que se deu o segundo salto: em 1847, Robert W. Thomson inventou o pneu pneumático (Thomson 1847), um pneu insuflado com ar no seu interior, reduzindo significativamente as vibrações e melhorando o desempenho do veículo (Continental 2018).

Um pneu tem as seguintes principais funções: capacidade de suportar uma determinada carga através do ar insuflado a uma determinada pressão; promover o contacto entre a estrada e o veículo com a transmissão das forças exercidas pelo carro, quer longitudinal (aceleração e travagem) quer lateralmente (curvas e mudanças de direção); por último, suportar o chassis em condições adversas do terreno, mantendo o veículo estável e com poucas vibrações. Para além destas funções básicas, um pneu deverá ser económico, respeitar o ambiente e as legislações em vigor e promover conforto e segurança (Continental 2015).

Atualmente um pneu conta com cerca de 10 componentes com 4 a 6 camadas de aço/têxtil e borracha, 10 a 15 compostos de borracha e 15 a 20 ingredientes por composto. Na figura 1 encontra-se um exemplo da constituição de um pneu radial para automóveis de passageiros.



- | | |
|---------------------|---------------------------|
| 1. Núcleo de Talão | 6. Tira ou Banda do Talão |
| 2. Cunha de Talão | 7. Parede |
| 3. Camada Interna | 8. Cinta Metálica |
| 4. Tela Têxtil | 9. Cinta Têxtil |
| 5. Reforço de Talão | 10. Piso |

Figura 1 - Secção de corte de um pneu radial ligeiro e seus principais componentes (Continental 2015).

Cada um destes componentes desempenha uma função específica no pneu.

Três destes componentes fazem parte do talão: o núcleo, a cunha e o reforço. O núcleo é formado por um conjunto de arames de aço revestidos por borracha, e tem como função fixar o pneu corretamente na jante. A cunha é unicamente composta por borracha e serve para melhorar a estabilidade e precisão direcional do pneu e aumentar o conforto. Por último, o reforço é um componente opcional feito com fios têxteis de nylon e também melhora a estabilidade do pneu. Relativamente à união com a jante, resta apenas um componente, a tira do talão. Este componente confere estrutura ao pneu para a parede não dobrar.

Seguindo uma ordem do interior para exterior, de seguida, aparece a camada interna. Composta essencialmente por borracha halo butílica, a camada interna faz o papel da câmara de ar e retém o ar dentro do pneu por grandes períodos de tempo. Para além disso, tem alguma influência em características importantes do pneu, como a durabilidade e o ruído.

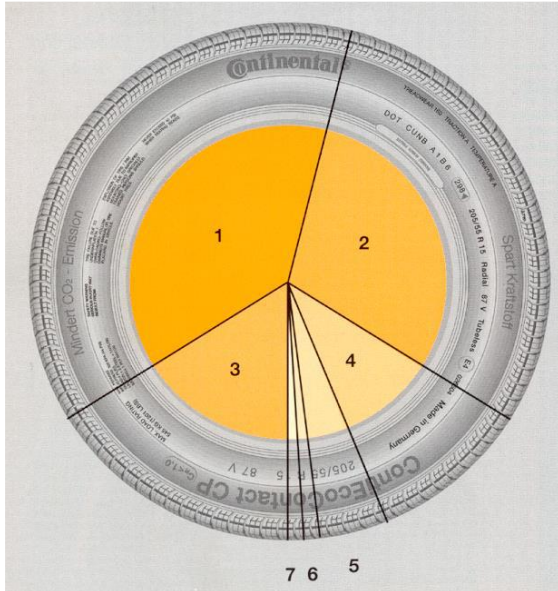
De seguida vem a tela têxtil. Composta por cordas de rayon ou polyester revestidas por borracha, e disposta numa direção radial (90° com a direção do movimento), a tela serve para suportar a força causada pelo ar pressurizado no interior do pneu. Para além disso, como uma a carcaça do pneu à coroa, também tem o papel de distribuir as tensões por todo o pneu.

Por fora da tela têxtil colocam-se dois tipos de cintas: uma cinta metálica e uma cinta têxtil. A cinta metálica é composta por duas camadas de cordas de aço revestidas por borracha e colocadas perpendicularmente. Esta cinta mantém o contorno e a área de contacto do pneu com a estrada bem definida, impedindo que expanda. É responsável, por isso, pela estabilidade e durabilidade do pneu. A cinta têxtil, feita de nylon ou polyester, é responsável por conferir rigidez à estrutura do pneu e, para além disso, melhora a performance do pneu a altas velocidades, minimizando deformações decorrentes da força centrífuga. Estas cintas são muito importantes para a estrutura e segurança do pneu uma vez que mantêm a sua integridade, distribuem todas as forças a que estão sujeitos por toda a sua estrutura, e são responsáveis pela sua forma e pegada.

Na parte superior do pneu, em contacto com a estrada e o ambiente, está o piso, o qual é composto por três camadas. Em contacto direto com a estrada está a capa, responsável pelo desgaste e aderência do pneu. Por baixo da capa encontra-se a base, que reduz a resistência ao rolamento e promove a diminuição de calor. Por último, nas extremidades do piso encontram-se as asas que servem para unir o piso à parede do pneu. A parede do pneu é constituída maioritariamente por borracha natural, protegendo o pneu de impactos laterais e da degradação causada pelo ambiente, nomeadamente pelo ozono.

2.2 Composição do Pneu

Cada um dos componentes mencionados na secção anterior tem a sua função específica para que o pneu cumpra o seu objetivo, tendo por isso diferentes composições. Na figura 2 identificam-se os principais materiais utilizados para o fabrico de um pneu, bem como a distribuição qualitativa das quantidades utilizadas.



1. Borracha (Natural, Sintética)
2. Enchedores (Negro de Fumo, Sílica, ...)
3. Materiais de reforço (Aço, Poliéster, Nylon, Rayon)
4. Auxiliares de processamento (Óleos, resinas)
5. Agentes de vulcanização (Enxofre, ativadores, aceleradores, ...)
6. Agentes de proteção (Anti degradantes, Ceras, Resinas)
7. Outros materiais

Figura 2 - Distribuição dos ingredientes num pneu radial ligeiro (DIP 2017).

No resto deste subcapítulo irá ser explicado com mais detalhe cada uma destas matérias-primas e qual a sua função no pneu.

2.2.1 Borracha

O principal material dos pneus é a borracha. Composta por longas cadeias de polímeros, a borracha é um material viscoelástico que pode ser moldado com o calor e a pressão, misturada com outros materiais e, por último, vulcanizada para criar ligações internas permanentes que dão o carácter elástico ao pneu. A estrutura molecular dos compostos de borracha pode ser controlada de acordo com as propriedades pretendidas, pelo que, a borracha utilizada nos pneus tanto pode ser natural como sintética. As principais borrachas utilizadas na indústria dos pneus e as suas respetivas estruturas moleculares são as seguintes (DIP 2017):

- Borracha natural de isopreno, $[-\text{CH}_2-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}-\text{CH}_2-]_n$
- Borracha sintética de isopreno
- Borracha sintética de estireno-butadieno, $[-\text{CH}_2=\text{C}(\text{C}_6\text{H}_5)]_n-[\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}(\text{CH}_2)-]_m$
- Borracha sintética de polibutadieno, $[\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2)-]_n$
- Borracha sintética halobutílica, $[-\text{CH}_2-\text{C}(\text{CH}_3)_2-\text{CH}_2-\text{C}(\text{CH}_2)-\text{CH}(\text{X})-\text{CH}_2-]_n$, X=Cl, Br

A borracha natural de isopreno provém da *Hevea Brasiliensis* (árvore da borracha) e é amplamente utilizada dada a sua elevada resistência à fadiga e ao rasgo, à sua grande adesão a outros componentes e baixa resistência ao rolamento, o que torna os pneus mais económicos. No entanto, esta borracha apresenta baixo desempenho nas travagens em piso molhado. A borracha sintética de isopreno, dada a sua semelhança à borracha natural tem propriedades e usos semelhantes.

A borracha de estireno-butadieno é muito utilizada no piso do pneu dada a sua eficiência em travagens em piso seco e molhado, e boa tração. Apesar deste aspeto positivo, esta borracha apresenta alguma resistência ao rolamento, desgasta-se com relativa facilidade e não é boa para condições de neve, sendo por isso combinada com outras borrachas para otimizar o desempenho do pneu (DIP 2017; Rodgers e Waddell 2013a).

A borracha de polibutadieno apresenta boa flexibilidade a baixas temperaturas, apesar da derrapagem em pisos molhados. Para além disto, apresenta boa resistência à abrasão, início de cortes ou fissuras e baixa resistência ao rasgo e tensão de rotura. Esta borracha é mais eficiente quando usada em misturas com outras borrachas para aproveitar os seus pontos fortes e minimizar os seus pontos fracos (DIP 2017; Simpson 2002).

Por último, a borracha halobutílica é usada unicamente no interior do pneu. A grande estanquicidade aos gases é a principal propriedade para a utilização desta borracha. A sua baixa elasticidade é superada pela sua grande capacidade de impermeabilizar o interior do pneu.

De notar que como algumas destas borrachas são não totalmente saturadas, é necessário a adição de agentes protetores contra o oxigénio, ozono e radiação UV (Simpson 2002). Salienta-se, também, que a maioria das vezes para se obterem as propriedades pretendidas para um pneu, uma mistura de borrachas é utilizada em vez de uma só borracha (DIP 2017).

2.2.2 Enchedores

Os enchedores, também conhecidos como cargas, são outra matéria-prima de extrema importância na construção dos pneus, dividindo-se em dois grupos: de reforço e não reforço. Os enchedores de reforço aumentam a performance do pneu após a sua produção, melhorando as suas propriedades mecânicas. Os enchedores de não reforço reduzem o custo de construção do pneu, uma vez que vão substituir materiais mais caros sem prejudicar, ou até mesmo melhorando, algumas propriedades do pneu como a estanquicidade ao ar e o aspeto visual. Os principais enchedores de reforço utilizados são o negro de fumo e a sílica enquanto que os de não reforço são o caulino e o carbonato de cálcio (DIP 2017).

Como os enchedores estão presentes em grandes quantidades num pneu, é de extrema importância conhecer algumas das suas propriedades. Dado que melhoram algumas das propriedades da borracha, o que é mais importante saber é como vão interagir com ela. A sua

morfologia, o tipo de interação que estabelecem com a borracha, a sua estrutura, distribuição de tamanhos, dispersão e a sua energia e área superficial são, por isso, parâmetros necessários para a caracterização de um enchedor (Donnet e Custodero 2013).

O negro de fumo é essencialmente constituído por 90 a 99% de carbono elementar e a restante parte consiste em hidrogénio, oxigénio e enxofre. É produzido principalmente por decomposição química do gás natural ou petróleo. Existem inúmeros tipos de negros de fumo, e as suas principais características podem variar dependendo do processo de fabrico e da sua utilização (Simpson 2002). A sua morfologia é constituída por agregados esféricos parcialmente fundidos para formar cadeias ramificadas. A figura 3 exemplifica a estrutura do negro de fumo. É considerado que quanto maior a zona a tracejado, maior a estrutura, o que implica um maior volume efetivo do negro de fumo. O aumento da estrutura ou a diminuição do tamanho das partículas do agregado vão permitir um maior número de interações de Van der Waals do negro de fumo com a borracha, uma vez que aumentam a área superficial (Donnet e Custodero 2013). A quantidade e o tipo de negro de fumo utilizado depende da função a que o composto de borracha se destina: por exemplo, um aumento na quantidade usada leva a uma maior tração em piso molhado, mas aumenta a resistência ao rolamento; um tamanho de partículas menor leva a uma maior tração, mas também a uma maior resistência ao rolamento; uma maior estrutura diminui a resistência ao rolamento e aumenta a resistência ao desgaste (DIP 2017; Rodgers e Waddell 2013a).



Figura 3 - Estrutura do negro de fumo (Hamed 2012).

A sílica tem uma estrutura semelhante à do negro de fumo, e é constituída por silício e oxigénio numa estrutura tetraédrica. Na sua superfície, a sílica contém grupos silanol (-Si-OH) que lhe vão conferir alguma polaridade. Isto dificulta a ligação da sílica com a matriz não polar da borracha, o que diminui muito o seu efeito reforçante. Para melhorar a interação sílica-borracha é utilizado um agente ativador da ligação, um silano. Na reação de silanização (esquematisada na figura 4), o agente ativador da ligação vai ter duas funções: diminuir a polaridade da superfície da sílica, melhorando a mistura com a borracha, e assegurar a reação de vulcanização com o polímero. O enchedor de sílica vai aumentar a tração em piso molhado e aumentar a resistência à abrasão e ao rasgo (DIP 2017; Rodgers e Waddell 2013a).

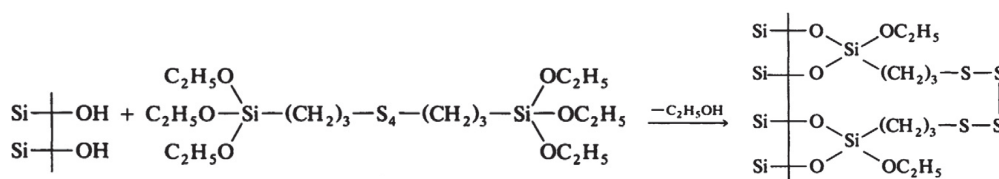


Figura 4 - Reação de silanização. Adaptado de Rodgers e Waddell (2013a).

No que diz respeito aos enchedores de não reforço, o mais utilizado é o carbonato de cálcio. Tal como a maior parte dos enchedores de não reforço, o carbonato de cálcio é utilizado para diminuir o custo de fabrico do pneu uma vez que não altera significativamente as propriedades da borracha (Rodgers e Waddell 2013a).

2.2.3 Materiais de reforço

Os materiais de reforço são as principais estruturas de carga do pneu. O aço e os têxteis vêm reforçar a borracha, aumentando a resistência à fadiga, a resistência à abrasão, a resiliência e a duração ou quilometragem do pneu, para além de manterem a forma e a pegada correta do pneu. Os principais materiais utilizados para reforço são o aço, o nylon, o rayon e o poliéster. Existem várias variáveis importantes a ter em conta quando se utiliza um material de reforço, como por exemplo a força de quebra, a construção da corda, a espessura dos fios, o grau de torção da corda, entre outras.

O aço é utilizado no núcleo do talão e na cinta metálica para segurar o pneu à jante e manter a integridade da coroa, respetivamente. Estas cordas são cobertas por bronze para promover a formação de monossulfeto de cobre durante a vulcanização, que melhora substancialmente a adesão do metal à borracha. O nylon, rayon ou poliéster são utilizados na tela e cinta têxtil. Estes materiais poliméricos, que são rígidos à temperatura ambiente, são ligados para formar fios que são usados para criar cabos para fazer parte da tela e da cinta. Estes têxteis são mergulhados em resorcinol-formaldeído-mergulho (dip RFL) para melhorar a adesão à borracha (DIP 2017; Rodgers e Waddell 2013b).

2.2.4 Auxiliares de processamento

As borrachas podem ser, por vezes, de difícil processamento dada a sua alta viscosidade ou alta adesividade, entre outros. Os auxiliares de processamentos vêm facilitar o processo de fabrico da borracha em si, ou realçar as propriedades dadas por um enchedor (Simpson 2002).

Os auxiliares de processamento podem ser categorizados de acordo com a característica onde vão atuar: óleos plastificantes (parafínicos, nafténicos e aromáticos) que diminuem a viscosidade da borracha e melhoram a mistura; resinas que melhoram a adesividade da borracha; e, por último, peptizantes que diminuem os radicais livres e a oxidação na borracha, o que mantém o peso molecular baixo e, conseqüentemente, a viscosidade.

2.2.5 Agentes de vulcanização

Para adquirir as características finais do pneu, a borracha é vulcanizada. Vulcanização é uma reação química que aumenta o número de ligações cruzadas entre várias cadeias de polímeros. Assim, vai causar um aumento de elasticidade e uma diminuição na plasticidade. Um esquema

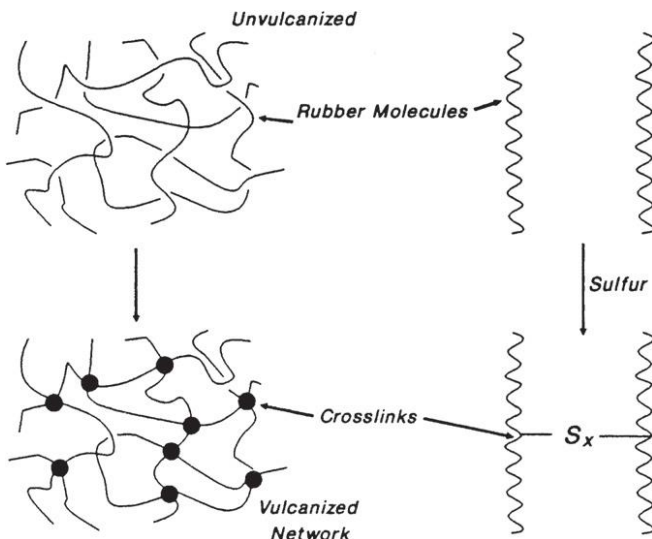


Figura 5 - Esquema da reação de vulcanização (Coran 2013).

da reação de vulcanização está representado na figura 5. Os principais agentes de vulcanização são o ativador, o promotor da reação, o acelerador e o retardador. O ativador, geralmente óxido de zinco, forma complexos reativos que promovem a reação de vulcanização. O promotor da reação, o enxofre, reage com as ligações duplas do polímero para criar as ligações cruzadas entre cadeias. O acelerador, sendo N-ciclohexil-2-benzotiazóisulfonamida (CBS), dissulfeto de benzotiazol (MBTS) ou difenilguanidina (DPG) os compostos mais usados,

aumenta a velocidade da reação de uma forma controlada, para diminuir o tempo de cura dos pneus. Para a escolha do acelerador e da sua quantidade utilizada, é necessário ter em conta fatores como o tipo de borracha, a quantidade de ativador presente e as propriedades mecânicas que se pretende obter daquela borracha. Por último, o retardador reduz a velocidade da reação de vulcanização. É usado para evitar que a borracha comece a vulcanizar ainda durante a fase de processamento pré-vulcanização. O composto mais usado é o N-ciclohexil tioftalimida (CTP) (Rodgers e Waddell 2013a).

2.2.6 Agentes de proteção

Tal como o próprio nome sugere, os agentes de proteção são usados para dar resistência química e física ao pneu contra os ataques provenientes do meio ambiente, aumentando o seu tempo de vida útil. Dada a natureza não saturada dos hidrocarbonetos pertencentes à borracha, esta fica suscetível à oxidação proveniente de radicais livres formados por calor, radiação UV, quebra de ligações polissulfídicas ou ozono. Os agentes de proteção dividem-se em três categorias: antioxidantes, que ajudam a eliminar os radicais livres formados; antiozonantes, que protegem o pneu de ataques causados pelo ozono; ceras, que ao longo do tempo de vida do pneu migram para a sua superfície formando uma barreira física que protege o pneu da luz e do ozono (Rodgers e Waddell 2013a).

Para além de todos os compostos mencionados anteriormente, um pneu pode conter quantidades residuais de outros materiais que são aplicados em casos particulares, ou para a obtenção de uma determinada propriedade. Destacam-se algumas resinas reforçantes, e promotores de adesão de cobalto que servem para melhorar a adesão entre a borracha e o metal ou têxtil.

2.3 Processo de produção

Para obter o pneu, todos os materiais que o constituem têm que passar por um processo complexo de fabrico para obtenção das propriedades desejadas. Este processo envolve 5 etapas principais: mistura, preparação, construção, vulcanização e inspeção final.

Aquando da chegada das matérias-primas, estas são analisadas e, depois de validadas, são reencaminhadas para a primeira unidade do processo: a mistura. Após a formulação das quantidades de cada matéria-prima a utilizar no composto pretendido, estas são misturadas por uma determinada ordem. Primeiro adiciona-se a borracha e os enchedores, seguido dos restantes aditivos. De seguida, e sempre em último lugar, são adicionados os compostos responsáveis pela vulcanização, para evitar que esta comece durante o período da mistura. Após todos os componentes estarem bem dispersos na mistura, o composto é arrefecido e processado em “folhas” e armazenado em paletes para serem reencaminhados para a fase de preparação.

Na fase de preparação, os compostos de borracha são processados de acordo com a finalidade que vão ter. Os três processos possíveis são a calandragem, extrusão e corte.

No processo de calandragem, ilustrado na figura 6, dá-se a impregnação da borracha em tecido têxtil ou metálico. Para além disso também pode ser calandrada apenas borracha. O material passa por vários rolos de calandragem para lhe confinar a largura e espessura necessárias. Nesta fase são produzidas a tela e cintas têxtil e a cinta metálica. Após este processo, dá-se o corte do material calandrado para prosseguir para a construção.

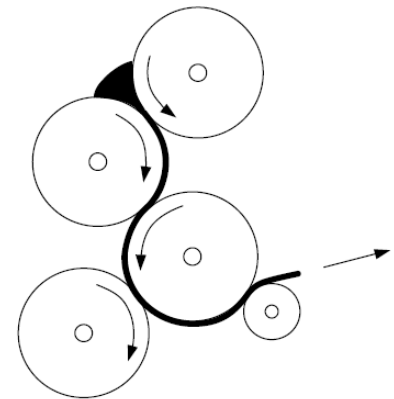


Figura 6 - Esquema ilustrativo da calandragem (Tadmor e Gogos 2006).

A extrusão consiste na passagem forçada de um composto de borracha por uma fieira que lhe vai conferir a sua forma. Por este processo são produzidos os pisos, as paredes e as cunhas do talão. Os perfis resultantes são depois cortados para seguir para o processo de construção. Este processo será descrito de forma mais detalhada no subcapítulo 2.4 dada a sua importância no trabalho realizado.

Após todos os componentes do pneu serem produzidos, são reencaminhados para a construção do pneu em verde (pneu não vulcanizado). Aí juntam-se todos os componentes seguindo uma determinada ordem: forma-se primeiro a carcaça do pneu (camada interna, tela têxtil, talão e parede) juntando-se de seguida as cintas e o piso. Uma vez terminada a construção do pneu em verde, este é lubrificado e reencaminhado para a vulcanização. Nesta etapa, é aplicado um molde aquecido ao pneu que vai conferir o padrão no piso bem como as inscrições presentes na parede. Na parte interior do pneu em verde encontra-se um diafragma onde circula vapor de

água a altas pressões e temperaturas promovendo, juntamente com o molde, a reação de vulcanização. Esta é a última fase do processo produtivo, a que se segue uma fase de inspeção de qualidade para garantir que o pneu não contém nenhum defeito e que respeita todas as normas de qualidade e segurança vigentes. Caso cumpra com todas essas especificações, o pneu é reencaminhado para o armazenamento para ser posteriormente distribuído (Rodgers e Waddell 2013b).

2.4 Extrusão

A extrusão é um dos processos mais utilizados industrialmente no processamento de polímeros. Consiste essencialmente na passagem forçada do polímero por uma abertura, doravante denominada fiação, adquirindo a sua forma. A sua primeira utilização, datada em 1935 na Alemanha, foi para a extrusão de borracha. A partir daí, a área dos termoplásticos desenvolveu-se muito mais rapidamente do que a área dos elastómeros e a quantidade de informação existente para a extrusão de termoplásticos é muito superior (Rauwendaal 2014a). Os componentes do pneu que são produzidos por extrusão são o piso, as paredes e as cunhas do talão.

Atualmente existem vários tipos de extrusoras dependendo da sua utilidade. A principal característica diferenciadora é o método de operação: em contínuo ou em descontínuo. A operar em descontínuo, existe a extrusora de êmbolo que essencialmente funciona como uma bomba de deslocamento positivo. A operar em contínuo existem a extrusora de disco e a de parafuso (figura 7) que empurram continuamente a borracha. As extrusoras de parafuso tanto podem ser simples, contendo apenas um parafuso, ou podem ser multiparafuso (Rauwendaal 2014b). A extrusora utilizada na produção dos componentes do pneu é a extrusora de parafuso simples. Para além disso, dependendo do perfil pretendido, podem utilizar-se várias extrusoras para juntar mais do que um tipo de borracha num só perfil de extrusão. Este processo é denominado de co-extrusão. Para a preparação dos pisos, são utilizados três compostos diferentes, cada um alimentado à mesma fiação por diferentes parafusos, enquanto que para a parede são combinados dois compostos.

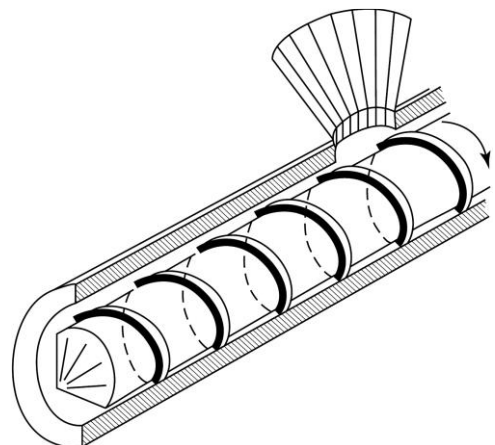


Figura 7 - Esquema de uma extrusora de parafuso. (Rauwendaal et al. 2002)

Existem inúmeras variáveis a ter em conta no design de uma extrusora. O parafuso, a zona de alimentação da borracha, a fiação e a zona pré-fiação, a temperatura e a pressão e o seu controlo são algumas das variáveis que são necessárias contabilizar (Rauwendaal 2014d, 2014c). Assim,

o processo de extrusão a nível industrial é muitas vezes assente em dados empíricos, uma vez que uma análise quantitativa e detalhada deste processo é muito complexa e de difícil obtenção.

Dependendo das condições de operação da extrusora, podem ocorrer instabilidades que diminuem a qualidade do extrudido. Entre estas, destacam-se as chamadas de *sharkskin*, *stick-spurt* e *melt fracture*. Na figura 8 apresentam-se exemplos de cada um desses fenómenos. A instabilidade de *sharkskin* é gerada na superfície do polímero à saída da fieira devido à mudança nas condições de fronteira, o que leva a um aumento das tensões provocando a fratura do polímero ou ao deslizamento junto da parede da fieira. Esta instabilidade pode ser corrigida através da suavização dos ângulos bruscos da fieira ou com a utilização de aditivos. A instabilidade de *stick-spurt* é identificada por oscilações cíclicas no extrudido, que se pensa terem origem na acumulação de pressão dentro da fieira, o que leva ao deslizamento do polímero junto da parede. Este fenómeno pode ser atenuado alterando variáveis como o comprimento da extrusora ou polindo a superfície da fieira. A instabilidade de *melt fracture* consiste num efeito semelhante, mas para tensões de corte e pressões mais extremas. Em condições intermédias entre estas duas instabilidades, existem alguns polímeros que têm um comportamento normal ao qual se denomina de super-escoamento (Agassant et al. 2006).

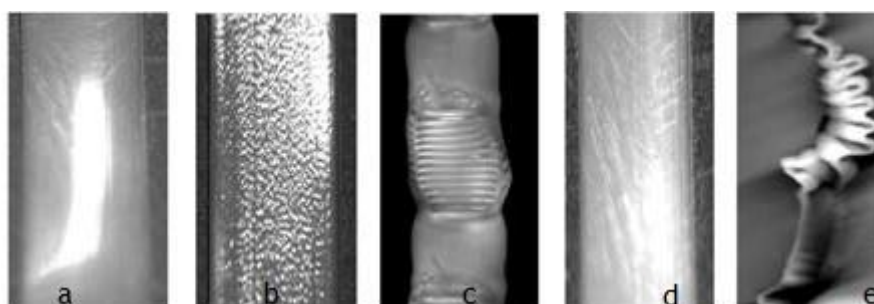


Figura 8 - Principais instabilidades no escoamento de um fluido na extrusão (a-escoamento normal, b-sharkskin, c-stick-spurt, d-super-escoamento, e-melt fracture). (Agassant et al. 2006).

Para além destas instabilidades, um comportamento característico de materiais poliméricos, que acontece frequentemente na extrusão e que vai ser a questão central deste trabalho, é o inchamento do extrudido. Este fenómeno ocorre quando um fluido viscoelástico, devido à sua componente elástica e ao chamado “efeito de memória”, expande na direção normal ao escoamento após a saída da fieira. O inchamento do extrudido vai provocar uma diferença entre as dimensões da fieira e do correspondente extrudido, o que aumenta a dificuldade na produção quando são necessárias dimensões rigorosas do produto final. Tal como esquematizado na figura 9, para obter determinadas dimensões num produto, a fieira tem que ser projetada tendo em conta o efeito do inchamento do extrudido, o que nem sempre é fácil.

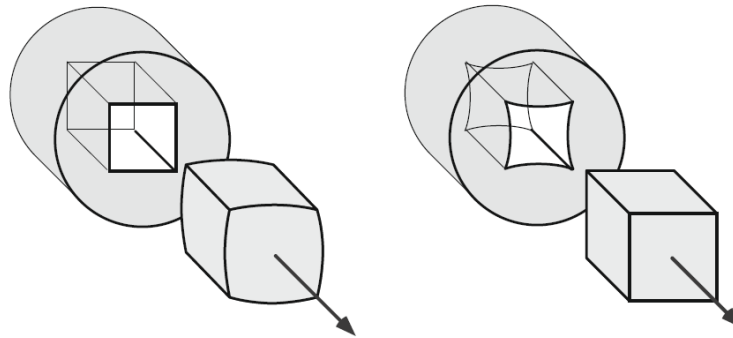


Figura 9 - Efeito do inchamento do extrudido numa fieira. Adaptado de Rauwendaal (2014e).

O inchamento do extrudido foi reportado pela primeira vez por Barus (1891), quando trabalhava em colas para peças marítimas. Este comportamento também é conhecido por efeito de Barus. Desde então, começaram a ser realizadas experiências para descrever, perceber e quantificar este fenómeno. A experiência mais comum para o estudar é a reometria capilar, onde o polímero escoia desde um reservatório até a saída por um capilar, onde dilata. A explicação defendida pela grande parte dos autores divide-se em vários mecanismos, desde o efeito das tensões normais ao escoamento, ao efeito da energia elástica do material, da orientação das moléculas em escoamento ou até mesmo do aumento da entropia. No entanto, todas estas explicações estão relacionadas de alguma forma.

O inchamento do extrudido está diretamente relacionado com uma grande quantidade de variáveis intrínsecas ao processo de extrusão, entre elas, a geometria da fiação, a geometria do parafuso e as condições operatórias, bem como características do polímero a extrudir, tais como a estrutura molecular, a quantidade de enchimento e as propriedades viscoelásticas (Wang 2012).

2.4.1 Fundamentos teóricos

Tal como muitos outros processos na indústria, a extrusão resume-se essencialmente ao escoamento de um fluido, neste caso, um composto de borracha. A ciência que se dedica ao estudo da deformação e ao escoamento da matéria é a reologia.

A borracha é um fluido não-newtoniano, ou seja, a sua viscosidade varia com a tensão de corte. Neste caso em particular, a borracha é denominada um fluido pseudoplástico uma vez que a sua viscosidade diminui com o aumento da tensão de corte. Para além disto, a borracha também é considerada um fluido viscoelástico, revelando um comportamento entre um sólido elástico e um fluido viscoso.

Estas características dos fluidos viscoelásticos vão conferir-lhes um comportamento diferenciador dos fluidos newtonianos. Enquanto que nos fluidos newtonianos, como a água, quando lhes é aplicada uma tensão de corte eles deformam e quando a tensão deixa de ser

aplicada a deformação desaparece quase imediatamente, nos fluidos viscoelásticos isso não acontece. Os fluidos viscoelásticos também deformam, mas quando a tensão é removida eles continuam a deformar por mais algum tempo, recuperando parcialmente a condição inicial. Esse tempo característico é uma das principais propriedades destes materiais, e é denominado tempo de relaxação (λ). Devido às longas cadeias poliméricas da borracha, desenvolvem-se tensões internas que, mesmo não havendo tensões externas, vão provocar o escoamento até relaxarem. Isto provoca um efeito de memória no escoamento deste tipo de fluidos (Morrison 2001). Esta característica, a par da viscosidade (η), são as principais propriedades que vão descrever o escoamento da borracha durante o processo de extrusão. Dependendo do modelo reológico do escoamento escolhido, existem outros parâmetros que são necessários para descrever o escoamento, e que serão descritos posteriormente. Estes parâmetros reológicos necessários para a simulação da extrusão foram obtidos por Carvalho (2017). Alguns dos parâmetros relativos aos modelos foram obtidos a partir dos dados experimentais de Carvalho (2017).

As duas principais leis que regem a deformação isotérmica da matéria são a lei da conservação da massa e a lei da conservação da quantidade de movimento. Caso se esteja a tratar de casos não isotérmicos, teria que se introduzir a lei da conservação da energia. Estas duas leis são válidas quer para fluidos newtonianos, quer para fluidos não newtonianos, dado que são a base fundamental para descrever a maior parte dos fenómenos (Morrison 2001). Para descrever o escoamento é necessário que estas equações sejam válidas em qualquer ponto do domínio, resultando, como seria de esperar, em notação e operações vetoriais e tensoriais. Assim, é possível obter resultados para o escoamento na extrusão quer em duas ou em três dimensões.

Para efetuar as simulações foi utilizada a aplicação informática *rheoTool* (Pimenta e Alves 2018) no *OpenFOAM*[®], especificamente o módulo *rheoInterFoam*. As equações (2.1) e (2.2) são as equações da conservação da massa e da quantidade de movimento utilizadas por esta ferramenta, respetivamente, considerando escoamento laminar e fluido incompressível:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}' + \mathbf{f} \quad (2.2)$$

em que \mathbf{u} é o vetor velocidade, t é o tempo, ρ é a massa volúmica, p é a pressão, $\boldsymbol{\tau}'$ é o tensor de tensões e \mathbf{f} são quaisquer forças externas ao fluido por unidade de volume.

Geralmente o tensor de tensões é dividido nas componentes das tensões poliméricas (τ), responsáveis pelo comportamento viscoelástico, e pelo solvente (τ_s), responsável pela resposta instantânea (puramente viscosa) do solvente, $\tau' = \tau + \tau_s$ (Comminal et al. 2018).

A tensão polimérica está relacionada com o tensor conformação (c) de acordo com a equação (2.3), onde \mathbf{I} é a matriz identidade e $G = (1 - \beta)\eta/\lambda$ é o módulo de elasticidade. O parâmetro β é a razão entre a viscosidade do solvente e a viscosidade total (Comminal et al. 2018). O tensor conformação pode ser considerado como uma medida da deformação ao nível molecular. Trata-se de uma média dos vetores posição dos elementos que circundam um dado elemento do polímero e ao qual ele está ligado segundo o modelo de Rouse. A figura 10 é um exemplo ilustrativo de um conjunto de vetores posição associados a um elemento de um polímero (Giesekus 1982).

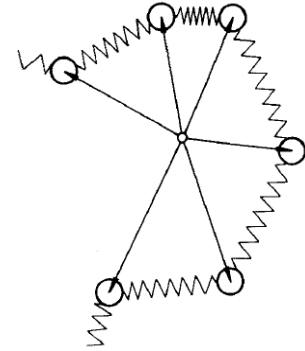


Figura 10 - Modelo de Rouse. Adaptado de (Giesekus 1982).

$$\tau = \frac{(1 - \beta)\eta}{\lambda} (c - \mathbf{I}) \quad (2.3)$$

Para fechar o sistema de equações que é necessário resolver, é acrescentada uma equação constitutiva que caracteriza a contribuição do tensor de tensões. Esta equação vai definir o comportamento do fluido na simulação. Na literatura existem vários modelos que representam diferentes fluidos em diferentes condições. As equações (2.4) e (2.5) são uma representação de algumas das equações constitutivas:

$$\tau_s = \eta_s(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (2.4)$$

$$f(\tau)\tau + \lambda(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial \tau}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \tau - \tau \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \tau \right) + \mathbf{h}(\tau) = \eta_p(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (2.5)$$

em que λ é o tempo de relaxação, $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação, η_p e η_s são as contribuições das viscosidades do polímero e do solvente, respetivamente, $f(\tau)$ é uma função escalar e $\mathbf{h}(\tau)$ é uma função tensorial que dependem das tensões presentes em cada ponto do escoamento.

Os modelos que vão ser utilizados para simular o escoamento são o modelo de Giesekus e o modelo de White-Metzner usando a equação de Carreau-Yasuda para descrever as funções materiais $\lambda(\dot{\gamma})$ e $\eta_p(\dot{\gamma})$.

No modelo de Giesekus, a mobilidade das moléculas de polímero depende do tensor conformação. Assim, este modelo contabiliza as interações polímero-polímero durante o escoamento de acordo com a equação (2.6), em que α é um parâmetro adimensional que quantifica o grau de anisotropia presente no fluido. Este parâmetro varia entre 0 e 0,5 e quanto maior o seu valor, maiores serão as interações entre as moléculas de polímero durante o escoamento. Este modelo consegue prever o efeito pseudoplástico característico da borracha (Comminal et al. 2018).

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \right) + \alpha \frac{\lambda}{\eta_P} (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) = \eta_P (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (2.6)$$

No modelo de White-Metzner, dado pela equação (2.7), o tempo de relaxação e a viscosidade são considerados funções da taxa de deformação, sendo possível introduzir o efeito pseudoplástico com base em dados experimentais. Para materiais complexos, como a borracha, uma vez que contém interações polímero-polímero e polímero-enchedor, este modelo pode ser o mais indicado uma vez que os restantes modelos não conseguem prever os comportamentos complexos associados a este tipo de sistemas. Para além disso, dada a elevada viscosidade da borracha, vão desenvolver-se tensões normais e de corte elevadas durante o escoamento do fluido, o que aumenta a dificuldade de modelos como o de Giesekus para prever com rigor, o seu comportamento. O modelo de White-Metzner como se baseia em dados experimentais, consegue adaptar-se bem a estas condições e prever estes comportamentos. Aliás, tal como mencionado pelos autores, este modelo foi criado com o objetivo de tornar a resolução numérica deste sistema de equações mais simples e mais prática para poder ser aplicado a casos reais de engenharia (Pimenta e Alves 2018; White e Metzner 1963).

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \right) = \eta_P(\dot{\gamma}) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (2.7)$$

No que diz respeito às funções materiais usadas para descrever a variação do tempo de relaxação e da viscosidade com a taxa de deformação, foi usado o modelo de Carreau-Yasuda, dadas pelas equações (2.8) e (2.9), respetivamente, uma vez que este modelo já está implementado na ferramenta *rheoInterFoam*. Para aplicar uma metodologia de resolução do conjunto de equações do sistema mais estável numericamente, foi considerado $K = L$, $a = b$ e $n = m$, isto é, quer o tempo de relaxação, quer a viscosidade têm os mesmos parâmetros e, por isso, comportam-se de igual forma (Pimenta e Alves 2018).

$$\lambda(\dot{\gamma}) = \frac{\lambda}{[1 + (L\dot{\gamma})^b]^{\frac{1-m}{b}}} \quad (2.8)$$

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_s + \frac{\eta_P}{[1 + (K\dot{\gamma})^\alpha]^{\frac{1-n}{\alpha}}} \quad (2.9)$$

Para obter os parâmetros do modelo de Carreau-Yasuda foram usados os dados experimentais obtidos por Carvalho (2017). A partir do Analisador de Processamento de Borracha (RPA) é obtida a viscosidade complexa (η^*) que é relacionada com a viscosidade pela regra de Cox-Merz (Cox e Merz 1958), dada por:

$$\eta(\dot{\gamma}) = |\eta^*(\omega)|_{\dot{\gamma}=\omega} \quad (2.10)$$

Assim, através da utilização do *add-in Solver* do programa *Microsoft® Office Excel* é possível obter os parâmetros que melhor se ajustam aos pontos experimentais utilizando o método dos mínimos quadrados.

3 Aplicação Informática OpenFOAM®

OpenFOAM® (*Open Field Operation And Manipulation*) é um software de simulação livre e em “*open source*”, escrito em linguagem C++. Trata-se de um conjunto de ferramentas de cálculo numérico e de análise de dados (pré- e pós-processamento) na área dos fenómenos de transporte. Contém aplicações para diversas áreas, desde escoamentos de fluidos complexos, reação química, acústica, eletromagnetismo, entre outros (OpenCFD 2004-2017b). Neste capítulo vão ser mencionadas as funcionalidades mais importantes deste software para a realização deste trabalho.

O OpenFOAM® foi lançado pela primeira vez em finais de 2004, inicialmente pela OpenCFD Ltd, e desde então já foi adquirido por várias entidades, sendo atualmente detido pelo ESI Group (*Engineering System International*), um grupo especialista na criação de software para protótipos virtuais para indústria (OpenCFD 2004-2017a).

Resumidamente, o OpenFOAM® consiste numa biblioteca de aplicações que se dividem em dois grupos: *solvers* e utilidades. Os *solvers* servem para um caso específico de aplicação em dinâmica de fluidos computacional, e contêm as equações discretizadas com as leis que regem o modelo. Nesta dissertação o *solver* utilizado é o *rheoInterFoam*. Este *solver* contém uma biblioteca com uma variedade de modelos para simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos (Pimenta e Alves 2018). As utilidades são as ferramentas que servem para o tratamento de dados pré- e pós-processamento. De notar que, devido à natureza *open source* deste software, qualquer utilizador que saiba os conceitos básicos da linguagem C++ pode implementar novos modelos no OpenFOAM®. Esta característica confere ao OpenFOAM® uma grande versatilidade para se ajustar às necessidades de cada utilizador (Greenshields 2011-2016).

Para realizar uma simulação é necessário um diretório que contenha as pastas denominadas 0, *constant* e *system*, cada uma com uma variedade de ficheiros com os dicionários que contêm a informação necessária à realização da simulação. Na figura 11 encontram-se os ficheiros mais importantes da simulação e que vão ser descritos nesta secção.

Inicialmente, é necessário começar pela definição do domínio de simulação. Essas definições são realizadas no ficheiro *blockMeshDict*, que se inclui na pasta *system*. É neste ficheiro que se vão definir as características da grelha a usar na simulação. A primeira lista a definir é a lista de todos os vértices necessários para a definição do domínio de cálculo. São enumerados todos os pontos sob a forma de vetor, segundo um referencial cartesiano, em unidades de metros. Ficam automaticamente atribuídos índices aos pontos de acordo com a ordem em que aparecem na lista e começando pelo índice zero. Essa numeração vai ser utilizada para a lista seguinte: a

lista dos blocos do domínio. Cada um destes blocos inclui um dos pontos enumerado anteriormente em cada um dos seus vértices de forma a definir uma zona do domínio. Para além de se definirem os blocos, nesta lista também se define o número de elementos que cada bloco vai conter em cada direção, bem como a razão entre o comprimento do último e do primeiro elemento. Assim, é possível criar uma grelha mais detalhada em zonas mais importantes do escoamento onde são expectáveis os maiores gradientes. Por último, é necessário definir as fronteiras do sistema. Para isso usam-se os pontos listados para definir faces. Cada conjunto de faces que são do mesmo tipo é enumerado numa lista das fronteiras sob o mesmo nome. Para além disso, também é definido qual o tipo de fronteira. Nas simulações realizadas utilizaram-se vários tipos de fronteiras, nomeadamente: *wall* (parede) quando coincide com uma parede; *symmetryPlane* quando coincide com um plano de simetria; *patch*, um tipo de geometria genérico, geralmente usado para entradas e saídas; *empty*, que é usado em simulações em 2D para descartar a direção onde não é necessário efetuar cálculos.

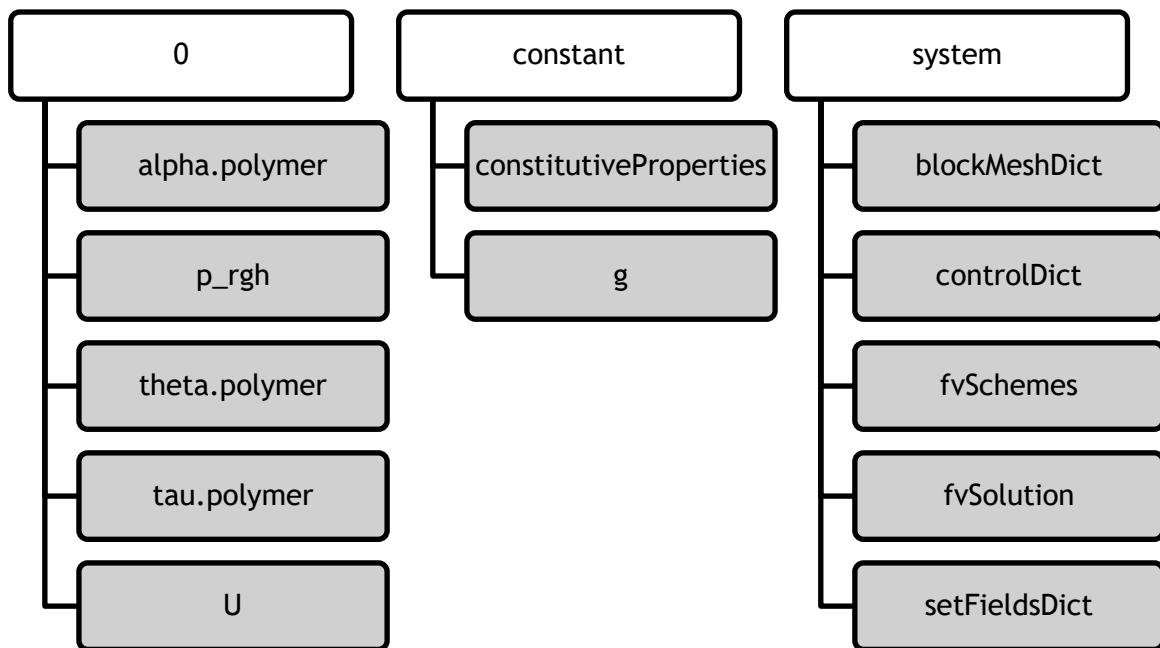


Figura 11 - Estrutura hierárquica de pastas e ficheiros para a realização de uma simulação

Depois de o domínio estar definido, é necessário inserir as condições de fronteira do sistema. Essas especificações são feitas na pasta 0. Geralmente começa-se uma simulação no tempo 0, mas também é possível começar uma simulação noutra tempo, como por exemplo, continuando uma simulação que foi previamente parada. Dentro desta pasta encontra-se um ficheiro que diz respeito a cada uma das variáveis a serem calculadas pelo modelo, nomeadamente, a pressão (*p_rgh*), a velocidade (*U*), as tensões (*tau.polymer*), o tensor conformação logarítmico (*theta.polymer*) e o indicador da fase (*alpha.polymer*). Esta última variável serve para distinguir qual das fases se encontra em cada ponto do domínio, polímero ou ar. À medida que a simulação vai resolvendo as equações do modelo para vários tempos, novas pastas são criadas

com o nome do respetivo tempo em questão, onde são guardados os valores de todas as variáveis calculados pelo *solver*.

Existem vários tipos de condições de fronteira que podem ser aplicadas a um domínio. Nesta dissertação as condições de fronteira aplicadas são *fixedValue* quando é conhecido o valor de uma variável numa fronteira, como por exemplo o valor da velocidade nas entradas, *zeroGradient* quando o gradiente de uma variável ao longo da direção perpendicular à face da fronteira é nulo, *symmetryPlane* quando se aplica um plano de simetria e, por último, *empty* nos casos das fronteiras relativas à direção cujos cálculos não são necessários (escoamento 2D).

Na pasta *constant* estão definidas todas as propriedades dos materiais necessárias para o modelo escolhido para a simulação. É no ficheiro *constitutiveProperties* que são especificadas essas propriedades. Para além das propriedades associadas ao modelo, também é possível adicionar a tensão superficial entre os fluidos da simulação para o cálculo da interface. Para além do ficheiro com as propriedades, a pasta *constant* também contém um ficheiro denominado *g* onde está especificado as componentes do vetor da aceleração da gravidade.

Na pasta *system* incluem-se os parâmetros relativos à configuração da simulação. Para além do já mencionado *blockMeshDict*, há mais alguns dicionários que vão definir e controlar o desempenho da simulação. Todas as definições relativas ao controlo do tempo e à escrita de resultados vão ser efetuadas no ficheiro *controlDict*. Neste ficheiro podem controlar-se definições como o tempo inicial, final e o passo, bem como o intervalo para a escrita de resultados que geralmente é muito maior que o passo da simulação. É possível também usar um passo no tempo adaptativo, tendo em conta o número de Courant (Co):

$$Co = \frac{\delta t |u|}{\delta x} \quad (3.1)$$

O número de Courant relaciona a distância que o fluido se desloca durante um passo de tempo com o tamanho dos elementos da grelha. Quanto menor o número de Courant, maior o rigor e a estabilidade numérica da simulação.

Assim, é possível definir um número de Courant máximo e a própria simulação ajusta o passo no tempo de forma a não o ultrapassar. Por último, uma funcionalidade que este ficheiro permite, é a criação de funções para registar, durante a simulação, o valor de variáveis escolhidas pelo utilizador em qualquer ponto do domínio. Esses dados são armazenados numa pasta denominada *postProcessing* dentro do diretório da simulação.

No ficheiro *fvSchemes*, são indicados os métodos de discretização e interpolação usados para o cálculo numérico da simulação. É, por isso, necessário especificar esses métodos para várias operações da simulação, nomeadamente, a primeira derivada em ordem ao tempo ($\partial/\partial t$), o gradiente (∇), o divergente ($\nabla \cdot$), o operador Laplaciano (∇^2), a interpolação dos valores das variáveis no centro de um elemento da grelha a partir das suas faces e a componente do

gradiente normal às faces de um elemento. Para o cálculo das derivadas em ordem ao tempo foi considerado o método de Euler de primeira ordem e implícito. No cálculo dos gradientes foi considerado o teorema de Green-Gauss que estipula que a integral de superfície de uma função escalar é igual à integral de volume do gradiente dessa mesma função:

$$\int_{\Omega} \nabla \phi \, d\Omega = \int_S \phi \cdot \hat{n} \, dS \quad (3.2)$$

onde ϕ é a variável em questão, Ω é o volume de controle, \hat{n} é o versor normal à superfície e S é a superfície do volume de controle. Assim, o gradiente pode ser calculado por:

$$\nabla \phi = \frac{1}{\Omega} \sum_{\text{faces}} \phi_f \vec{S}_f \quad (3.3)$$

Para estimar o valor da variável na face f é usada interpolação linear dos centros para as faces dos elementos da grelha. \vec{S}_f é o vetor normal à superfície.

De seguida é especificado o método utilizado para o cálculo do divergente. Como dependem da variável a considerar (velocidade, tensões, etc.), o método de discretização e cálculo do divergente pode variar de caso para caso. Para os divergentes associados ao gradiente da velocidade e para a obtenção do operador Laplaciano é usado um método semelhante ao explicado anteriormente. Para a componente associada ao termo convectivo da equação da quantidade de movimento é utilizado o método denominado *none*. Neste método, a componente convectiva do balanço de quantidade de movimento não é contabilizada devido ao baixo número de Reynolds típico de todas as simulações efetuadas. Esta simplificação será explicada posteriormente, juntamente com as restantes simplificações feitas nas várias simulações. Para o termo convectivo da equação constitutiva é utilizado o método de alta-resolução denominado CUBISTA (*Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection*). Este método foi criado com o propósito de ser aplicado na resolução numérica de simulações de fluidos viscoelásticos. Como se trata de uma questão complexa e não central neste trabalho, este método não será aqui descrito em detalhe. Mais informação encontra-se disponível em Alves et al. (2003) e a aplicação do método no OpenFOAM® pode ser encontrada em Pimenta e Alves (2017) e em Comminal et al. (2018). Por último, relativamente ao divergente, ainda é utilizado um método para o cálculo do divergente associado à interface. Trata-se do método de Van Leer, um método limitante usado para a variável *alpha*, a variável usada para a distribuição de fases, e para calcular a interface das duas fases, e que está limitada a valores entre 0 e 1, onde 0 é um dos componentes e 1 é o outro.

Finalmente, para a interpolação dos valores das variáveis no centro de um elemento da grelha a partir das suas faces é usada a interpolação linear e para o cálculo da componente do gradiente normal às faces de um elemento é utilizado um método aproximado que consiste na

diferença entre os gradientes de cada lado da face da célula dividida pela distância entre eles. Caso a grelha seja não ortogonal, esse valor é depois corrigido com um fator de correção que vai depender do grau de não ortogonalidade, como descrito em (Pimenta e Alves 2017).

Para controlar o algoritmo, os métodos usados para resolver os sistemas lineares das equações discretas e as tolerâncias para convergência devem ser especificadas no ficheiro *fvSolution*. Para cada uma das variáveis a ser calculadas é especificado o *solver* utilizado e os respetivos parâmetros. Mais informação pode ser encontrada no manual do utilizador do programa (Greenshields 2011-2016). Essencialmente, os *solvers* usam um método iterativo para resolver os sistemas de equações. As iterações param quando uma de três condições é verificada: os resíduos ficam menores que uma tolerância especificada; a razão entre o resíduo da iteração atual e a inicial é menor que um valor especificado ou o número de iterações ultrapassa um limite máximo. É possível especificar também o fator de relaxação das iterações. Trata-se de uma razão entre o valor calculado para a próxima iteração e a atual que, conseqüentemente, limita a variação da solução na próxima iteração. Este parâmetro permite aumentar a estabilidade numérica da simulação em detrimento do tempo computacional, uma vez que retarda o processo iterativo. Pode também ser escolhido o algoritmo de cálculo do sistema de equações diferenciais. Existem três algoritmos possíveis para o acoplamento pressão-velocidade: PISO (*pressure-implicit split-operator*), SIMPLE (*semi-implicit method for pressure-linked equations*) e PIMPLE (uma combinação dos dois anteriores). A diferença entre estes métodos reside na ordem em que as equações são resolvidas e como funciona a resolução da equação da pressão (denominado *coupling*) para garantir a conservação da massa através da correção explícita da velocidade para que satisfaça a conservação da quantidade de movimento. Geralmente estes algoritmos começam pela resolução da equação da quantidade de movimento e depois diferem na maneira como percorrem o ciclo por todas as equações a resolver.

Por último, o ficheiro *setFieldsDict* é usado em simulações que envolvem mais do que uma fase, como neste caso (polímero e ar), para inicializar o domínio com valores de *alpha*, a variável que define a fração dos componentes que se encontram em determinado ponto do domínio.

Depois de configurada uma simulação e após a sua execução, todos os resultados obtidos podem ser visualizados na interface gráfica do OpenFOAM®, denominada de *ParaView*. Neste programa é possível realizar uma grande quantidade de operações de tratamento de dados, desde a criação de mapas de contorno das variáveis a animações do escoamento. Para além desta interface gráfica é possível, a partir da linha de comandos, executar várias funções para realizar o tratamento de dados da simulação sem recorrer a uma interface gráfica. É também possível registar durante a simulação valores de variáveis em diversos pontos do domínio ou até mesmo executar funções previamente fornecidas pelo OpenFOAM®. Para isso pode-se usar o ficheiro

controlDict, tal como mencionado anteriormente, ou criar um ficheiro *sampleDict*, um ficheiro com uma funcionalidade semelhante à parte de processamento de dados do ficheiro *controlDict*.

Este capítulo foi escrito tendo como base os manuais do utilizador do OpenFOAM® (Greenshields 2011-2016) e do *rheoTool* (Pimenta e Alves 2018). Informação mais detalhada acerca de cada uma das funcionalidades deste software pode ser encontrada nessas referências.

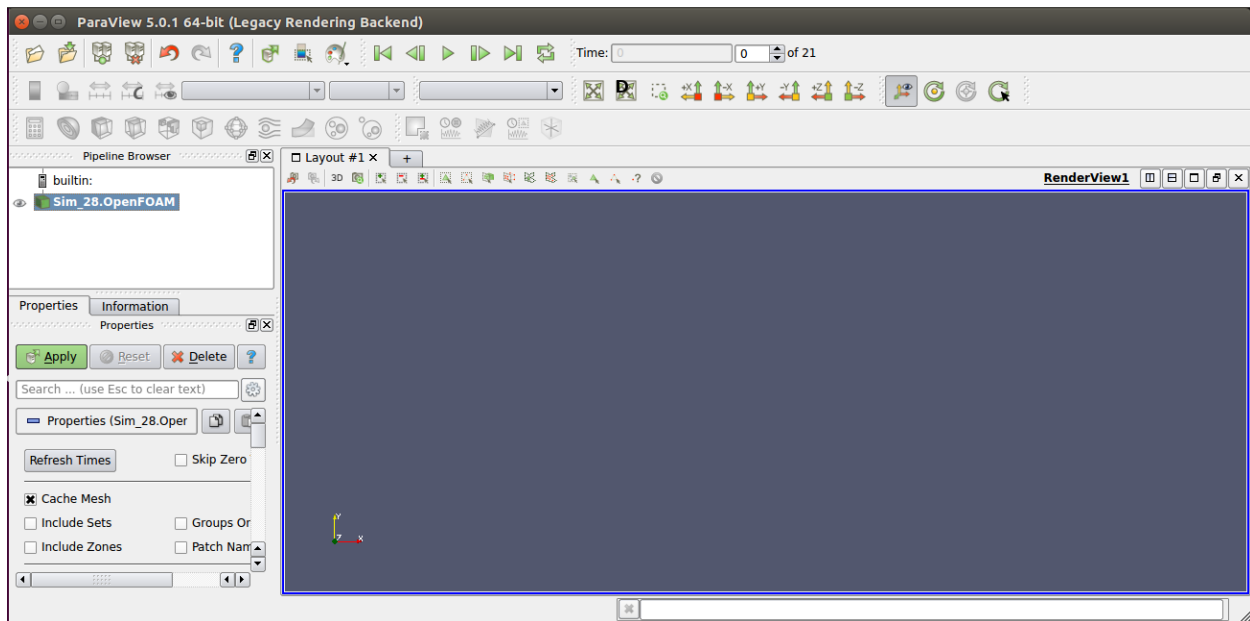


Figura 12 - Interface gráfica ParaView

4 Resultados e Discussão

Como mencionado nos capítulos anteriores, os resultados das simulações bem como as propriedades do material utilizado serão descritos neste capítulo. Dada a grande quantidade de diferentes compostos de borracha existentes na produção, e dada a grande quantidade de tempo necessária para a execução de uma simulação, este trabalho centrou-se em apenas dois, o T08846 e o T12301, dois compostos de piso e que são dos compostos de borracha com menor e maior inchamento do extrudido, $S_R = 1,51$ e $S_R = 1,89$, respetivamente (Carvalho 2017).

4.1 Determinação dos parâmetros de Carreau-Yasuda para os compostos de borracha

Para as simulações em que foi utilizado o modelo de Giesekus, tal como mencionado anteriormente, os únicos parâmetros necessários são a viscosidade e o tempo de relaxação da borracha. Estas propriedades materiais foram determinadas por Carvalho (2017). O terceiro parâmetro, α foi iterado de forma a se enquadrar melhor com as características da borracha. Mais detalhes acerca da metodologia para a determinação deste parâmetro serão descritos aquando dos resultados das simulações com este modelo.

Este subcapítulo dirige-se particularmente à determinação dos parâmetros de Carreau-Yasuda para as simulações com o modelo de White-Metzner. Para isso, foram utilizados os pontos experimentais dos varrimentos em frequência de Carvalho (2017), efetuados a 70°C, e foram realizados alguns ensaios a 90°C, uma vez que se trata da temperatura à qual se encontra a borracha à saída da fieira. Mais detalhes acerca dos ensaios realizados podem ser encontrados em Carvalho (2017). Assumindo válida a regra de Cox-Merz, mencionada anteriormente, e o princípio da sobreposição tempo-temperatura (Dealy e Plazek 2009), é possível prever o efeito pseudoplástico da borracha, tal como se pode verificar pelas figuras 13 e 14. Em anexo encontram-se as curvas de ajuste ao modelo de Maxwell multimodos a diferentes temperaturas, bem como a sua sobreposição tempo-temperatura. O fator de deslocamento horizontal, α_T , obtido para os compostos T08846 e T12301 foi de 0,9 e 3, respetivamente, entre as temperaturas de 70°C e 90°C. Após a obtenção das curvas mestras a 90°C, foram determinados os parâmetros do modelo de Maxwell generalizado bem como os parâmetros do modelo de Carreau-Yasuda. Para diminuir a complexidade e facilitar o cálculo numérico das simulações com o modelo de White-Metzner, foi atribuído ao parâmetro α o valor de 2, uma vez que a curva de ajuste se mantém praticamente igual à curva obtida por minimização dos quadrados dos erros. Assim, o modelo utilizado fica simplificado para o modelo de Carreau.

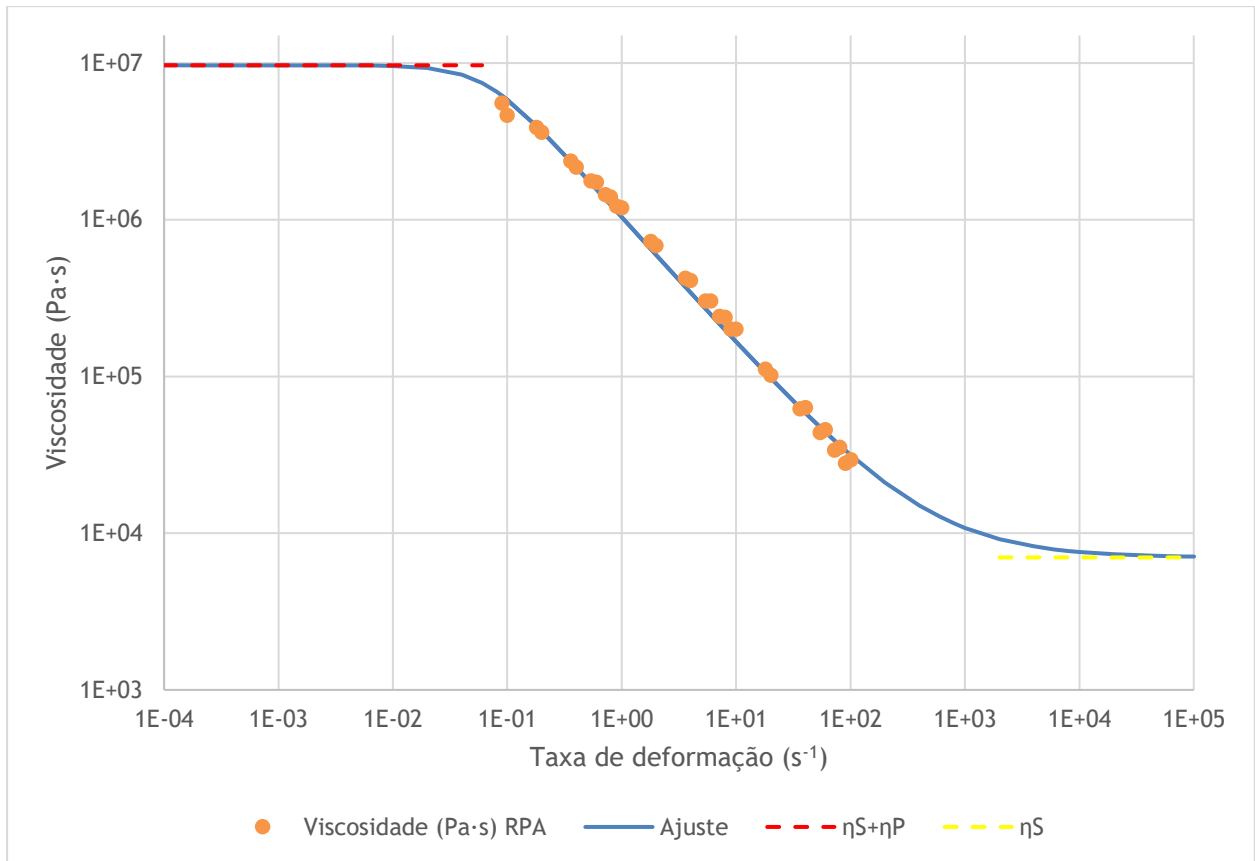


Figura 13 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T08846

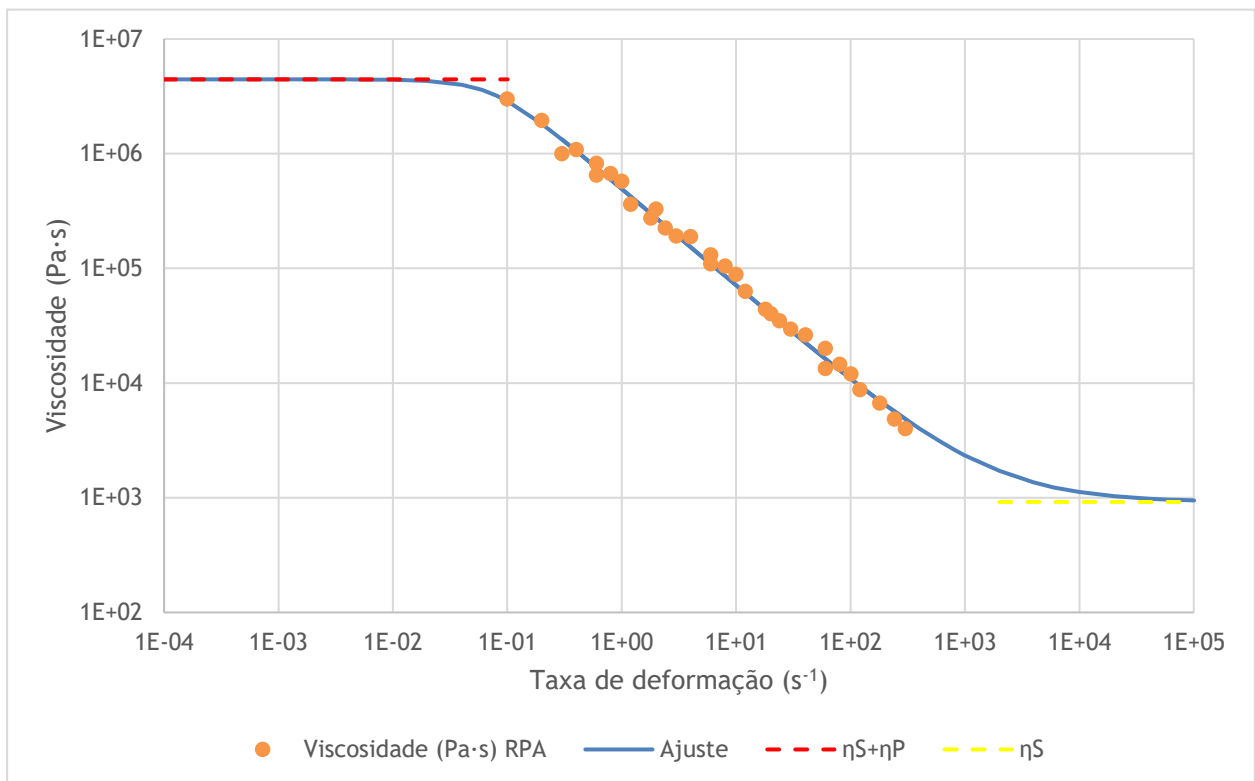


Figura 14 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T12301

De acordo com os valores experimentais obtidos, na tabela 4.1 e na tabela 4.2 encontram-se todos os parâmetros estimados para o modelo de White-Metzner. Tal como seria de esperar, ambos os compostos de borracha têm um efeito pseudoplástico semelhante, resultando em parâmetros do modelo de Carreau semelhantes. A maior diferença reside na viscosidade, uma vez que a viscosidade do composto T12301 é cerca de metade da viscosidade do composto T08846.

Tabela 4.1 - Estimativa dos parâmetros de Maxwell

Composto	Parâmetros	Elemento de Maxwell 1	Elemento de Maxwell 2	Elemento de Maxwell 3	Solvente	Média
T08846	λ (s)	0,15	1,5	15	-	13,53
	η (Pa·s)	$1,63 \times 10^5$	$8,70 \times 10^5$	$8,64 \times 10^6$	$7,00 \times 10^3$	$9,67 \times 10^6$
T12301	λ (s)	0,05	0,5	15	-	14,45
	η (Pa·s)	$2,02 \times 10^4$	$1,48 \times 10^5$	$4,27 \times 10^6$	918,6	$4,44 \times 10^6$

Tabela 4.2 - Estimativa dos parâmetros para o modelo de Carreau

Composto	k	n
T08846	15,73	0,19
T12301	13,40	0,15

Em anexo é possível encontrar a estimativa destes parâmetros para outros compostos de borracha. Estão assim reunidos todos os parâmetros materiais necessários para a realização das simulações. De seguida, é necessário caracterizar o domínio onde ocorre o escoamento da borracha.

4.2 Caracterização das simulações

Na figura 15 encontra-se um exemplo de uma fieira de extrusão para pisos de pneu. Tal como nos ensaios de extrusão realizados em Carvalho (2017), as simulações vão ser realizadas considerando apenas um composto para, nesta fase inicial, simplificar o processo. Um posterior aumento na complexidade do problema irá aproximar ainda mais as simulações à realidade.

Para além da simplificação a nível dos compostos, foram efetuadas simplificações ao nível domínio de cálculo, para diminuir o tempo de simulação e melhorar a convergência. A primeira e maior simplificação foi a utilização de apenas duas dimensões. Como a altura do piso (direção Oy) é muito inferior à sua largura (direção Ox), como se pode observar na figura 15, os gradientes de tensões e velocidades na direção da largura podem ser considerados desprezáveis quando comparados com os mesmos gradientes na direção da altura. Assim, reduz-se em grande quantidade o número de pontos da grelha e, conseqüentemente, o tempo necessário para correr uma simulação.

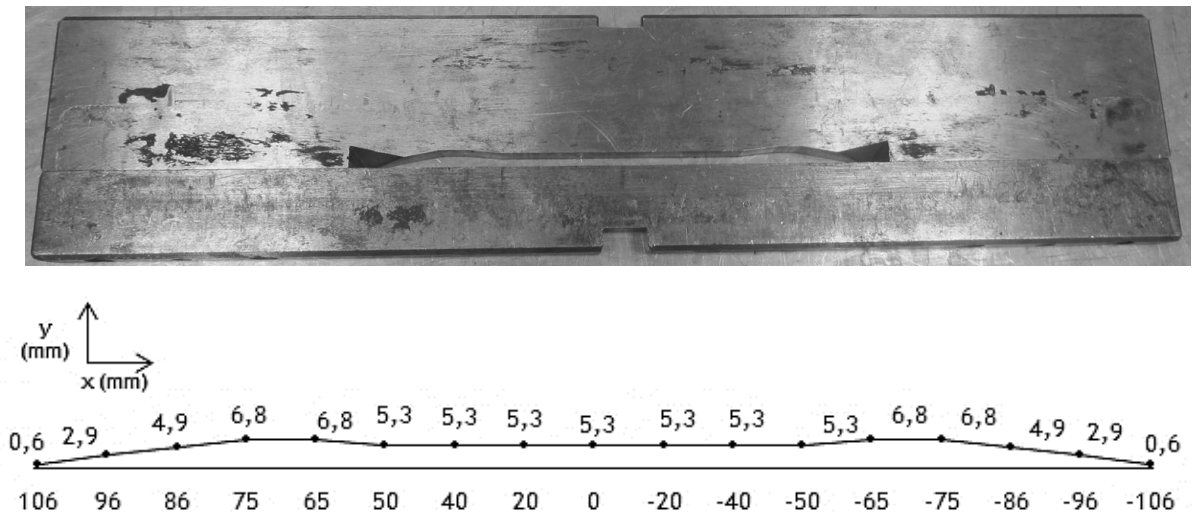


Figura 15 - Fieira utilizada nos ensaios de extrusão e respetivo esquema da geometria (Carvalho 2017)

Adicionalmente, foi feita também outra simplificação na zona pré-fieira. Devido à grande complexidade de uma extrusora triplex, o escoamento da borracha até chegar à fieira é de difícil representação. Pela experiência reportada pelos colaboradores da empresa responsáveis pelo desenvolvimento de fieiras, a forma como é disposta a zona pré-fieira vai influenciar fortemente a forma como o escoamento se comporta. As dimensões reduzidas da fieira, associado ao facto de os três compostos apenas contactarem à saída da extrusão, provoca a necessidade de canais de escoamento muito reduzidos. Na figura 16 está representado um corte do conjunto fieira e pré-fieira. Como se pode verificar, existem três canais de escoamento que se encontram apenas na fieira (zona destacada), todos eles com dimensões muito reduzidas. Como se trata do escoamento de um fluido muito viscoso, as tensões de corte desenvolvidas são muito altas. Uma pequena alteração nas dimensões da pré-fieira altera este comportamento uma vez que vai modificar as tensões de corte. No entanto, no que diz respeito ao inchamento do extrudido, o comportamento não deverá variar muito. Como o objetivo inicial deste trabalho passa por identificar qual o melhor modelo para representar o efeito pseudoplástico da borracha e com isso prever o seu escoamento e respetivo inchamento do extrudido, esta zona foi simplificada o máximo possível.

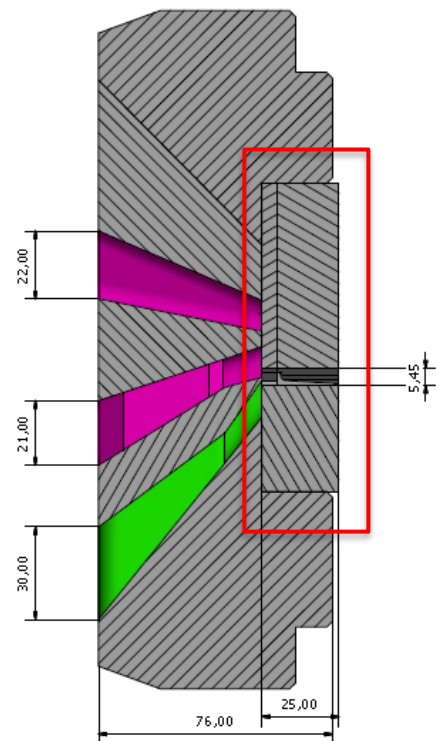


Figura 16 - Esquema da pré-fieira de uma extrusora. Dimensões em milímetros.

Na figura 17 encontra-se ilustrada a grelha utilizada nas simulações. O ponto P representa o local especificado onde termina a fieira e começa a expansão do fluido. Como se pode verificar, o domínio considerado até essa zona é um escoamento de corte simples quando comparado com a realidade. Esta zona da saída da fieira é a mais importante no que diz respeito ao cálculo numérico a realizar na simulação, dado que as tensões de corte junto da parede vão influenciar fortemente o grau do inchamento do extrudido. Para além disso, na saída da fieira, o ângulo de 90° vai provocar instabilidade numérica, uma vez que se observa aí uma mudança muito abrupta nas condições fronteira do escoamento. Estas razões levam a que a grelha de simulação tenha que ser mais refinada nesta zona para aumentar a precisão numérica e para evitar que ocorra a divergência da simulação. Através das sucessivas ampliações é possível verificar o nível de refinamento da grelha nessa zona.

Relativamente às dimensões da grelha, foi utilizada uma altura da fieira de 1 cm. Como existe uma grande variedade de fieiras a serem utilizadas na produção com diferentes dimensões, foi escolhida esta dimensão porque é uma altura aproximada das várias fieiras existentes e facilita a interpretação de resultados. Para obter o inchamento do extrudido foi utilizada a seguinte relação:

$$S_R = \frac{h}{L} \quad (4.1)$$

Em que h é a altura da interface a uma distância 0,5 m da saída da fieira e L é a altura da fieira.

A zona a montante da fieira tem um comprimento de 0,5 m bem como a zona a jusante da fieira. Trata-se de um comprimento 50 vezes superior à altura da fieira, e que deverá ser suficiente para não influenciar os resultados da simulação na zona de interesse. Na zona a jusante da fieira foi considerada uma altura 10 vezes superior à altura da fieira. Novamente, é uma distância suficiente para não influenciar os resultados.

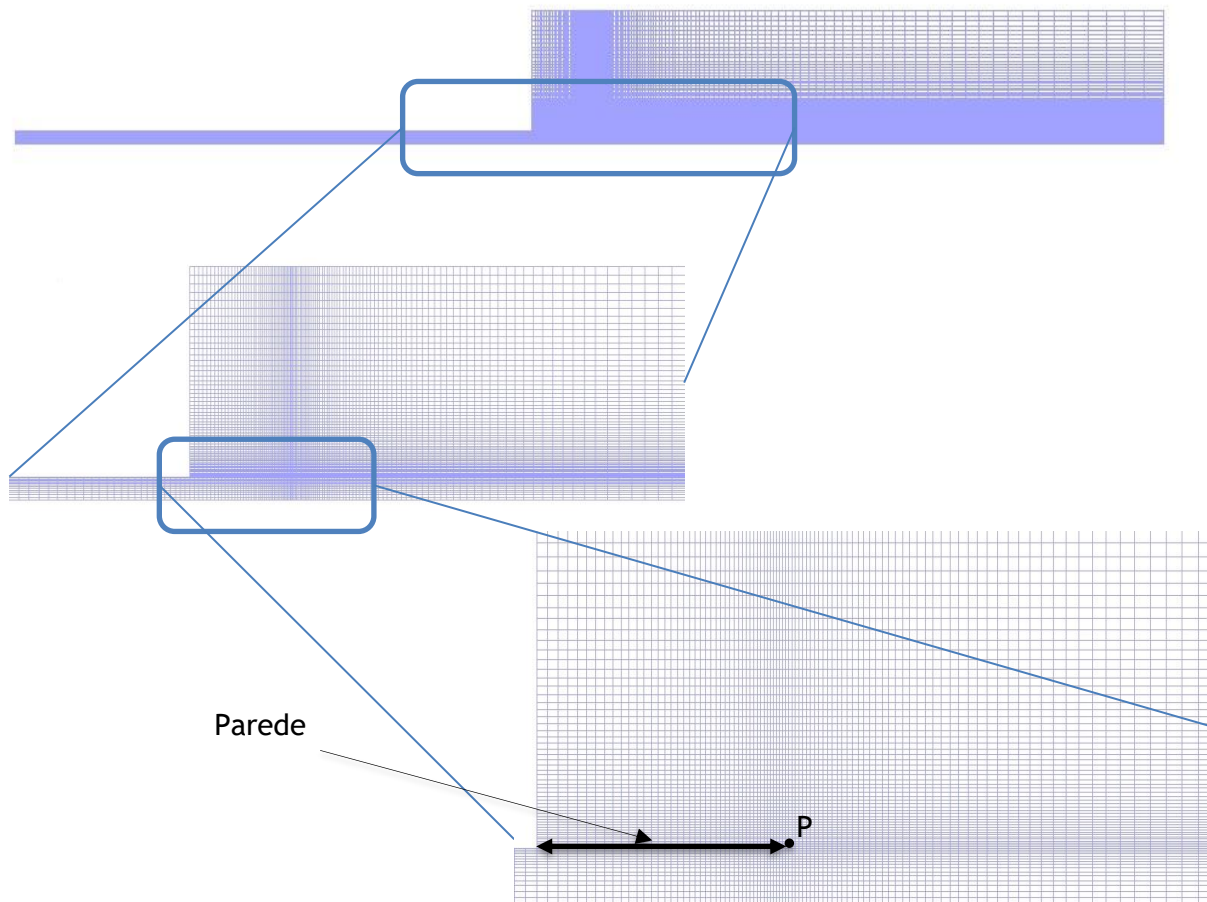


Figura 17 - Grelha utilizada para as simulações e respectivas ampliações

Para além da grelha utilizada nas várias simulações, foram utilizadas duas grelhas adicionais, uma menos refinada e outra mais refinada, para testar a independência dos resultados com o grau de refinamento da grelha. As principais dimensões, bem como o número de pontos usados em cada uma destas malhas encontram-se especificados na tabela 4.3. Estas dimensões vão ser muito importantes para a escolha do passo de tempo da simulação, tendo em conta o número de Courant.

Em cada uma das extremidades do domínio foi definida uma condição de fronteira de acordo com o sistema em questão. Na zona de escoamento a montante da fieira (zona da esquerda) usou-se uma velocidade de entrada de 0,56 m/s, que corresponde à velocidade usada nas extrusoras na produção. Impôs-se também a condição de não-deslizamento nas paredes. Na zona de escoamento a jusante da fieira (zona da direita), como se trata da atmosfera foi considerada a condição de fronteira de gradiente nulo. De notar que, como a saída da fieira se encontra localizada no ponto P, a condição de não-deslizamento vai ser considerada até lá e não apenas até à expansão do domínio localizada antes desse ponto. Considera-se parede até esse ponto numa tentativa de diminuir a divergência da simulação à saída da fieira. Assim, evita-se que a saída da fieira coincida com a condição fronteira na superfície à esquerda, pelo

que a simulação calcula os valores da velocidade do ar e da borracha com mais facilidade em torno dessa zona.

Tabela 4.3 - Principais características das grelhas usadas nas simulações

	Grelha Menos Refinada	Grelha Utilizada	Grelha Mais Refinada
$\delta x/h$ à saída da fieira	0,1213	0,0609	0,0304
$\delta y/h$ na esquina superior da fieira	0,0643	0,0305	0,0153
$\delta x/h$ longe da fieira	3,406	1,717	0,862
$\delta y/h$ perto da simetria	0,2574	0,1219	0,0613
$\delta y/h$ longe da simetria	0,7883	0,3912	0,196
Número de células elementares	6058	24278	95834

Para garantir a convergência das simulações, foi utilizado um número de Courant entre 0,1 e 0,15. Assim, o fluido demora aproximadamente 10 passos no tempo a percorrer um elemento da grelha, o que melhora a convergência e a precisão dos resultados.

Existe também uma constante temporal e três números adimensionais importantes na caracterização de uma simulação, nomeadamente o tempo difusivo, dado pela equação (4.2), que vai condicionar fortemente o passo temporal da simulação, e os números de Reynolds, Deborah e Weissenberg, dados pelas equações (4.3), (4.4) e (4.5), respetivamente, que vão caracterizar o escoamento da borracha.

$$t_d = \frac{\rho L^2}{\mu} \quad (4.2)$$

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \quad (4.3)$$

$$De = \frac{\lambda u}{L} \quad (4.4)$$

$$Wi = \dot{\gamma} \lambda \quad (4.5)$$

Como os compostos apresentam uma viscosidade muito elevada, as forças viscosas vão dominar resultando assim num número de Reynolds muito baixo, podendo ser considerado aproximadamente zero. Devido ao alto tempo de relaxação e à espessura reduzida das fieiras, o escoamento vai processar-se a números de Deborah e de Weissenberg muito altos, o que resulta em problemas de instabilidade numérica frequentemente reportados na literatura e que são um dos grandes desafios da reologia computacional (Pimenta e Alves 2017; Afonso et al. 2011).

O tempo difusivo serve para caracterizar a inércia do escoamento e representa o tempo que a vorticidade do escoamento demora para difundir uma distância L (M. Squires e R. Quake 2005). Dado que as forças viscosas são predominantes, o tempo difusivo vai ser muito baixo. Esta

característica tem uma grande implicação na simulação, uma vez que obriga a que o passo temporal da simulação tenha que ser muito baixo, aproximadamente uma ordem de grandeza a baixo do tempo difusivo, para que a simulação não divirja e permita obter resultados adequados. Como o passo temporal tem que ser pequeno, e é necessário que a simulação corra pelo menos entre 10 a 15 vezes o tempo de relaxação para se atingir o estado estacionário, o tempo computacional necessário para uma simulação torna-se bastante longo, uma vez que se pretende calcular o valor do inchamento do extrudido em estado estacionário. Numa tentativa de diminuir o tempo necessário para obtenção dos resultados das simulações, efetuou-se uma adaptação ao número de Reynolds e ao tempo difusivo de forma a aumentar o passo temporal da simulação sem alterar significativamente os resultados. Como a massa volúmica da borracha apenas interfere na parcela relativa ao estado transiente e no termo convectivo (que é pouco relevante para números de Reynolds baixos e que não é contabilizado através da utilização do método de discretização *none*) na equação da conservação da quantidade de movimento, equação (2.2), em vez de ser utilizado o valor real da massa volúmica da borracha (aproximadamente 1200 kg/m^3), que implicaria um passo temporal muito baixo, foi usado um valor muito superior (irrealista) (10^8 kg/m^3) que vai resultar num passo temporal mais aceitável para a simulação. A maior implicação desta adaptação resulta numa variação do número de Reynolds. No entanto, o valor do novo número de Reynolds, apesar de também aumentar várias ordens de grandeza, ainda vai ser baixo ($Re \ll 1$), esperando-se que não altere significativamente o padrão de escoamento em questão. Assim, como não se está a utilizar o valor real da massa volúmica, não é possível tirar conclusões do estado transiente onde esta variável vai influenciar os resultados. Esta alteração vai permitir acelerar muito a simulação, diminuindo o tempo necessário para correr uma simulação para cerca de uma semana, sem pôr em causa o objetivo de obter com rigor o inchamento do extrudido em estado estacionário. Na tabela 4.4 encontram-se os valores destas variáveis para os dois compostos utilizados.

Tabela 4.4 - Números adimensionais e tempo difusivo das simulações

Compostos	T12301	T08846
De	809,2	757,7
Re	$1,51 \times 10^{-6}$	$6,95 \times 10^{-7}$
Tempo difusivo (s)	$2,7 \times 10^{-8}$	$1,24 \times 10^{-8}$
Pseudo- número de Reynolds	0,13	0,06
Pseudo-Tempo Difusivo (s)	$2,25 \times 10^{-3}$	$1,03 \times 10^{-3}$

Como se pode verificar, usar a massa volúmica real implicaria passos temporais com uma ordem de grandeza de 10^{-8} s levando a que fossem necessários $1,5 \times 10^{10}$ passos temporais para simular

cerca de 150 segundos. Simulações desse gênero levariam a um tempo computacional impraticável para obter resultados, sendo por isso muito importante e necessário fazer esta alteração.

Por último, antes de correr uma simulação é necessário inicializar o campo relativo à variável α , a variável responsável pelo cálculo da distribuição de fases e da interface. Na figura 18 pode-se observar esse mesmo campo. Aqui, é possível verificar com detalhe até onde se localiza o escoamento pré-fieira. Tal como mencionado anteriormente, o escoamento pré-fieira não termina na zona de expansão do domínio mas ligeiramente a jusante. Essa zona é inicializada como contendo borracha, a vermelho, como se pode observar na figura 18.



Figura 18 - Representação da interface borracha-ar para o início da simulação

4.3 Resultados das simulações

Numa primeira tentativa de escolher o modelo mais adequado para representar o escoamento da borracha foi utilizado o modelo de Giesekus, cujos resultados vão ser apresentados de seguida. Posteriormente, vão ser discutidos os resultados para o modelo de White-Metzner, o segundo modelo constitutivo testado.

4.3.1 Modelo de Giesekus

Uma vez que não foi determinado experimentalmente o parâmetro α do modelo de Giesekus, foram efetuadas várias simulações com diferentes valores deste parâmetro para verificar qual o valor que ia ao encontro do inchamento do extrudido da borracha determinado experimentalmente.

Inicialmente foi realizada uma simulação com um valor de $\alpha = 0,2$ para o composto T12301. Nas figuras 19 a 21 apresenta-se o inchamento do extrudido, o campo de velocidades e o campo de tensões para essa simulação. O valor do inchamento do extrudido obtido foi de $S_R = 3,71$. Este valor do inchamento do extrudido encontra-se muito afastado da realidade, pelo que o valor de α utilizado não é o adequado. Como esta variável representa o grau de anisotropia do composto, quando maior o valor α , maior a quantidade de ligações entre moléculas de borracha na direção normal ao escoamento. O próximo passo será aumentar esta variável para observar o comportamento da simulação.

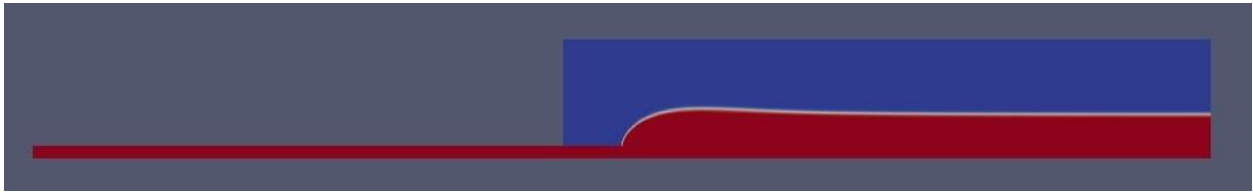


Figura 19 - Inchaço do extrudado para $\alpha = 0,2$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)

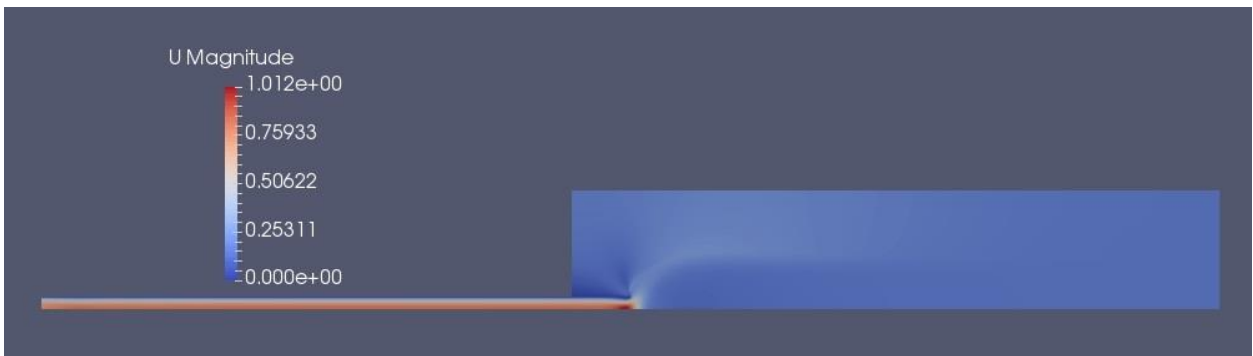


Figura 20 - Campo da magnitude de velocidade (m/s) para $\alpha = 0,2$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)

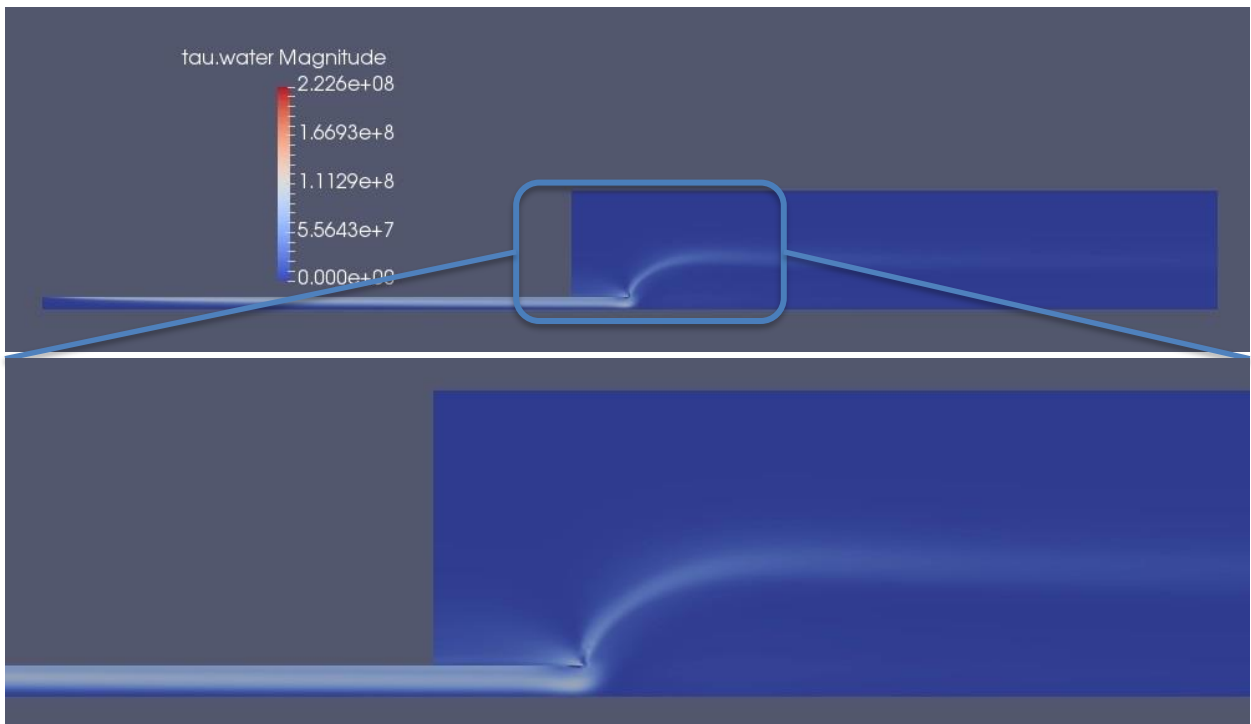


Figura 21 - Campo da magnitude do tensor das tensões (Pa) e aumento da zona de expansão do fluido para $\alpha = 0,2$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)

Adicionalmente, foi realizada uma simulação para $\alpha = 0,5$. Este é o valor máximo recomendável para esta variável. Na figura 22 pode-se observar o resultado obtido para o inchaço do extrudado. Os campos da magnitude de velocidade e do tensor de tensões têm comportamento

semelhante ao observado no resultado da simulação para $\alpha = 0,2$. Neste caso, o inchamento do extrudido obtido foi inferior, $S_R = 3,3$. De notar que como o inchamento do extrudido já tinha ultrapassado consideravelmente o valor obtido experimentalmente para este composto, esta simulação foi parada antes de atingir o estado estacionário para diminuir o tempo da simulação. No entanto, o inchamento do extrudido ainda estava a aumentar consideravelmente, o que leva a concluir que se iria obter novamente um valor muito afastado da realidade.



Figura 22 - Inchamento do extrudido obtido para $\alpha = 0,5$ ($Re=0,13$; $De=809,2$)

Com base nestas simulações, conclui-se que o modelo de Giesekus não representa adequadamente o comportamento dos compostos de borracha. Em análise, apesar de se verificar que o inchamento do extrudido diminui com o aumento do valor de α , o valor máximo desta variável ainda resulta em valores muito altos para o inchamento do extrudido. Um aumento de α traduz-se num aumento das interações entre as moléculas do composto e consequentemente numa diminuição do inchamento. Como a borracha é um composto muito viscoso, a utilização de apenas este parâmetro pode não ser suficiente para quantificar essas interações. Outra característica que é importante mencionar é que estes compostos não são apenas constituídos por borracha. Como estão presentes diversos materiais, as interações entre eles variam em intensidade, principalmente as interações polímero-enchedor. Como o enchedor representa cerca de 30% da composição do composto, aproximadamente a mesma quantidade de borracha, as interações polímero-enchedor podem ser mais predominantes do que as interações polímero-polímero e o modelo de Giesekus não contempla adequadamente estes efeitos.

Outro aspeto que é importante mencionar, prende-se com a resolução numérica deste modelo. Como se pode observar pela figura 21, junto da parede na saída da fieira, é a zona de mais difícil resolução numérica. Como o número de Weissenberg é muito alto, e nesse local os gradientes de tensões também são muito altos, observam-se instabilidades numéricas. Aliás, como se pode observar, as maiores tensões localizam-se do lado de fora da parede, o que não deverá representar a realidade. Isto é indicativo de que as simulações com este modelo são de difícil implementação numérica. Dependendo dos parâmetros definidos nas simulações, algumas delas podem originar resultados em que é claramente visível a instabilidade numérica, como se pode observar na figura 23. Através da representação destes campos para diferentes tempos, pode-se observar que a instabilidade a jusante da saída da fieira advém da instabilidade numérica no ponto junto da parede à saída da mesma. Tais instabilidades podem

aparecer até para grelhas muito refinadas (Comminal et al. 2018). É, por isso, necessário utilizar outro modelo que preveja melhor o efeito pseudoplástico e elástico da borracha para melhorar a previsão do inchamento do extrudido.

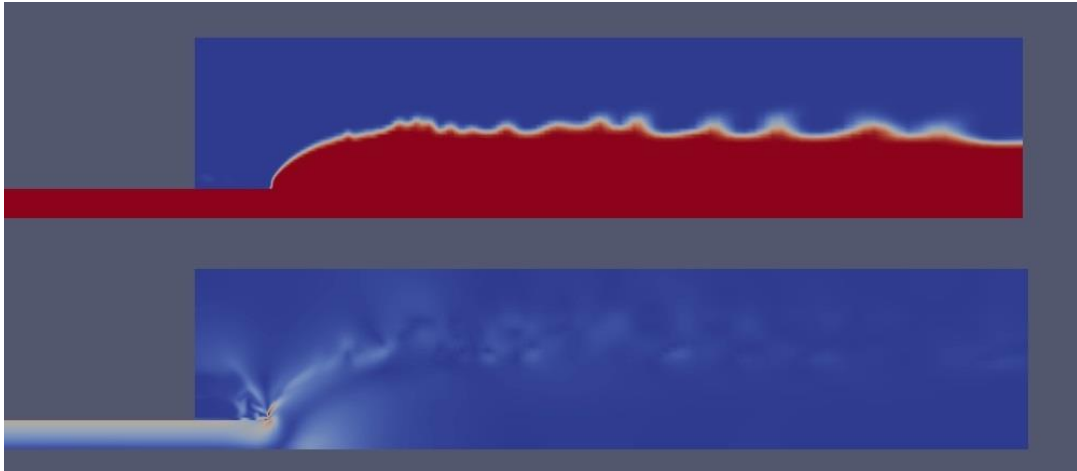


Figura 23 - Exemplo de uma instabilidade obtida para $\alpha = 0,5$, $Re=6,88 \times 10^{-7}$ e $De=520,2$. Interface (em cima) e campo de tensões (em baixo).

4.3.2 Modelo de White-Metzner

Após se ter verificado que o modelo de Giesekus não era o mais indicado, foi necessário escolher qual o modelo seguinte a usar. Como os compostos de borracha são materiais extremamente complexos, é difícil encontrar um modelo que vá totalmente ao encontro das suas características. Foi por isso escolhido o modelo de White-Metzner porque tem uma grande componente experimental. Em vez de o modelo estimar o efeito pseudoplástico, tal como o modelo de Giesekus o faz, é possível utilizar os pontos experimentais que descrevem esse comportamento para a função viscosidade do modelo de White-Metzner.

O primeiro composto utilizado nas simulações com este modelo foi o T08846 e o segundo foi o T12301. Nas figuras 24 a 26 encontram-se o inchamento do extrudido, o campo da magnitude da velocidade e o campo da magnitude do tensor de tensões para o composto T08846, respetivamente, e nas figuras 27 a 29 os mesmos campos para o composto T12301.

Para o composto T08846, o inchamento do extrudido obtido na simulação foi de $S_R = 1,88$, sendo o inchamento do extrudido real $S_R = 1,51$. De igual maneira, para o composto T12301, o inchamento do extrudido obtido foi de $S_R = 1,80$, sendo que o inchamento do extrudido real é de $S_R = 1,89$. Trata-se de uma melhoria significativa quando comparado com o modelo de Giesekus.

Como se pode observar pelas imagens do inchamento do extrudido, existe uma maior expansão do fluido logo à saída da fiação. Trata-se de um efeito que efetivamente ocorre durante a

extrusão dos compostos de borracha, e que se manifesta de forma mais acentuada no modelo de White-Metzner do que no modelo de Giesekus.



Figura 24 - Inchamento do extrudado do composto T08846 previsto com o modelo de White-Metzner ($Re=0,06$; $De=757,7$)

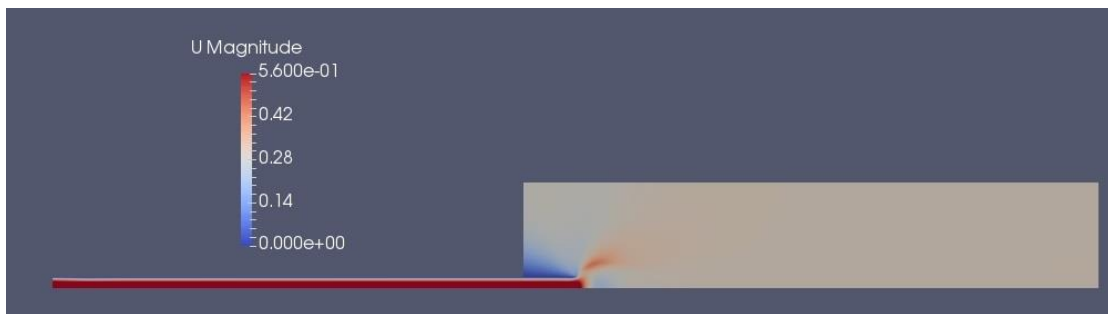


Figura 25 - Campo da magnitude de velocidade (m/s) do composto T08846 previsto com o modelo de White-Metzner ($Re=0,06$; $De=757,7$)

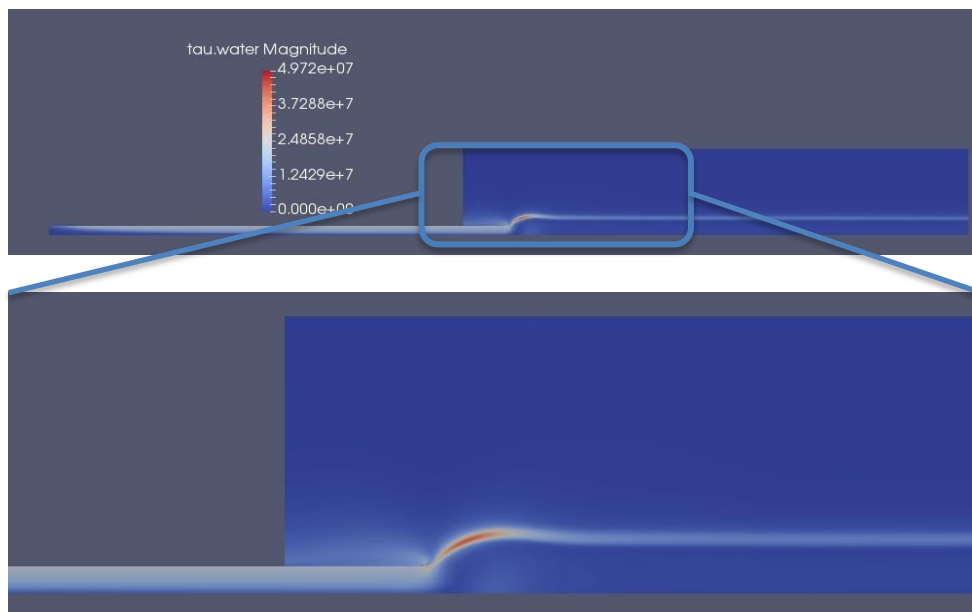


Figura 26 - Campo da magnitude do tensor de tensões (Pa) do composto T08846 previsto com o modelo de White-Metzner e respectivo zoom ($Re=0,06$; $De=757,7$)



Figura 27 - Inchaço do extrudado do composto T12301 previsto com o modelo de White-Metzner ($Re=0,13$; $De=809,2$)

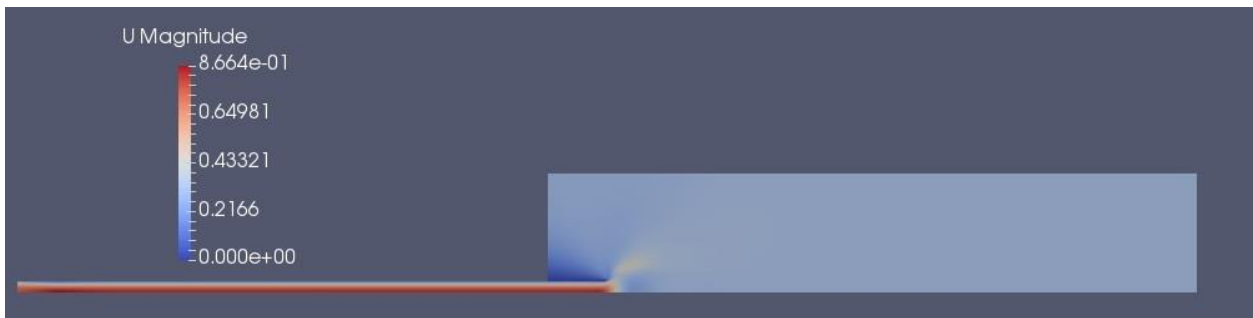


Figura 28 - Campo da magnitude de velocidade (m/s) do composto T12301 previsto com o modelo de White-Metzner ($Re=0,13$; $De=809,2$)

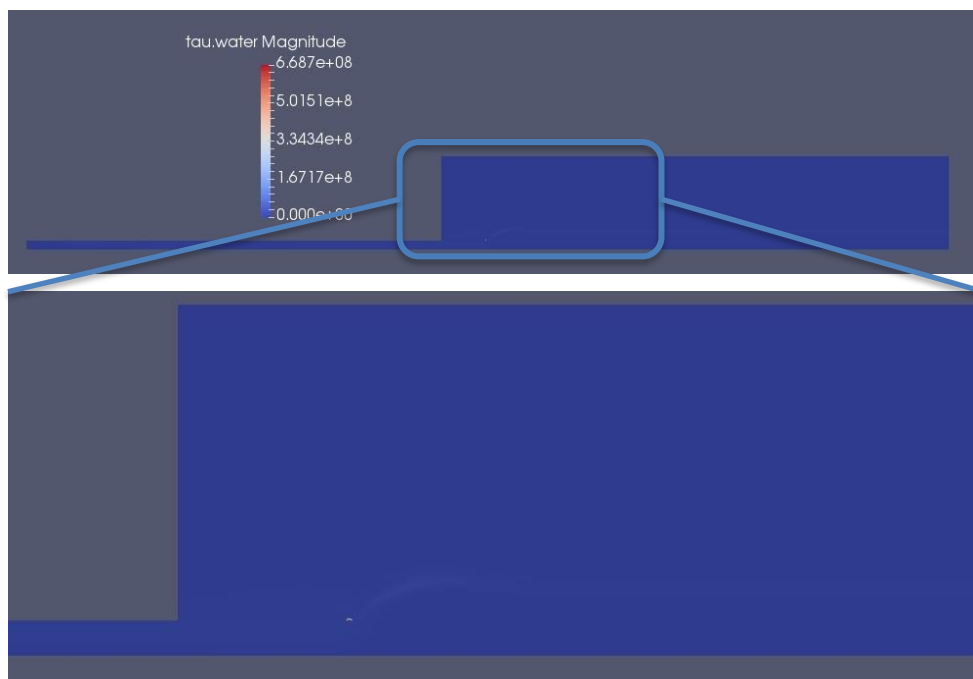


Figura 29 - Campo de magnitude do tensor de tensões (Pa) do composto T12301 previsto com o modelo de White-Metzner e respectivo zoom ($Re=0,13$; $De=809,2$)

Como seria de esperar, as maiores tensões estão localizadas à saída da fiação. Com a mudança nas condições de fronteira, o fluido expande e por isso vai gerar tensões normais elevadas naquela região, que posteriormente vão relaxar ao longo do escoamento. Essas tensões normais são responsáveis pelo inchaço do extrudado do composto.

Ainda é possível verificar que existe alguma instabilidade numérica presente na simulação do composto T12301, embora inferior à verificada nas simulações com o modelo de Giesekus. Durante a realização das várias simulações que conduziram a estes resultados não foram encontradas nenhuma instabilidades tão intensas como as observadas com o modelo de Giesekus. O modelo de White-Metzner aparenta ser mais estável sob o ponto de vista numérico. De seguida apresentam-se os testes para validar os resultados obtidos. Para isso foram realizados 3 tipos de testes: teste à independência da grelha, à adaptação da massa volúmica e, por último, testar a influência das propriedades físicas do segundo fluido presente na simulação e de que forma afeta a interface com a borracha. Para estes testes foi utilizada a simulação do composto T08846 como referência para comparação de resultados.

4.3.2.1 Testes de grelha

Para validar os resultados obtidos, é necessário verificar se estes dependem da grelha que foi utilizada na simulação. Quanto mais refinada for a grelha utilizada, mais precisos são os resultados e maior o tempo de computação necessário para a realização uma simulação. O objetivo passa por usar o menor número de pontos possível para diminuir o tempo da simulação, mas sem comprometer a precisão dos resultados.

Para realizar os testes à grelha foram utilizadas as grelhas especificadas na tabela 4.3. Para que os testes sejam viáveis, é importante que os pontos utilizados não alterem a sua localização no domínio. Na figura 30 encontra-se um esquema das alterações efetuadas à grelha para estes testes. Na imagem da esquerda encontra-se representada a criação da grelha mais grosseira, onde foram removidos metade dos pontos em cada direção dos pontos existentes na grelha usada (imagem do meio). Na imagem da direita está representada a criação da grelha mais refinada, onde se duplicou a quantidade de pontos em cada direção, relativamente à grelha original.

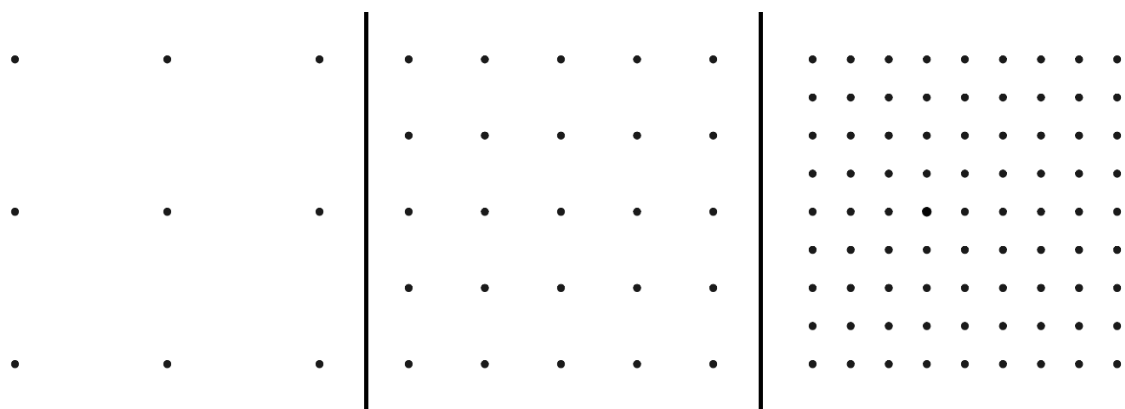


Figura 30 - Esquema das alterações à grelha para os testes de refinamento de grelha

Para comparar os resultados obtidos, foi acompanhada a evolução com o tempo do inchamento do extrudido, a uma distância de 0,5 metros a jusante da fieira. Apesar de não ser possível tirar

conclusões quanto ao estado transiente, devido a alteração da massa volúmica, foi usada esta metodologia para se observar quando era atingido o estado estacionário e verificar se haveriam alterações no comportamento da simulação até lá.

Na figura 31 é possível observar os testes efetuados à grelha de simulação. Tal como seria de esperar, para a grelha mais grosseira os resultados obtidos são apreciavelmente diferentes dos resultados da grelha original. Nesta grelha, as dimensões dos elementos de volume são demasiadamente grandes ao ponto de influenciar o cálculo numérico da simulação. A grelha mais refinada veio comprovar que a simulação com a grelha original já obtém resultados aceitáveis, e quase independentes da grelha. Dado o grande aumento no número de pontos da grelha, o tempo computacional necessário para correr uma simulação aumentou significativamente, não sendo possível efetuar a simulação até ser alcançado o estado estacionário. Através da observação da evolução temporal do inchamento do extrudido é plausível concluir que o resultado da malha mais refinada irá ser semelhante à malha original.

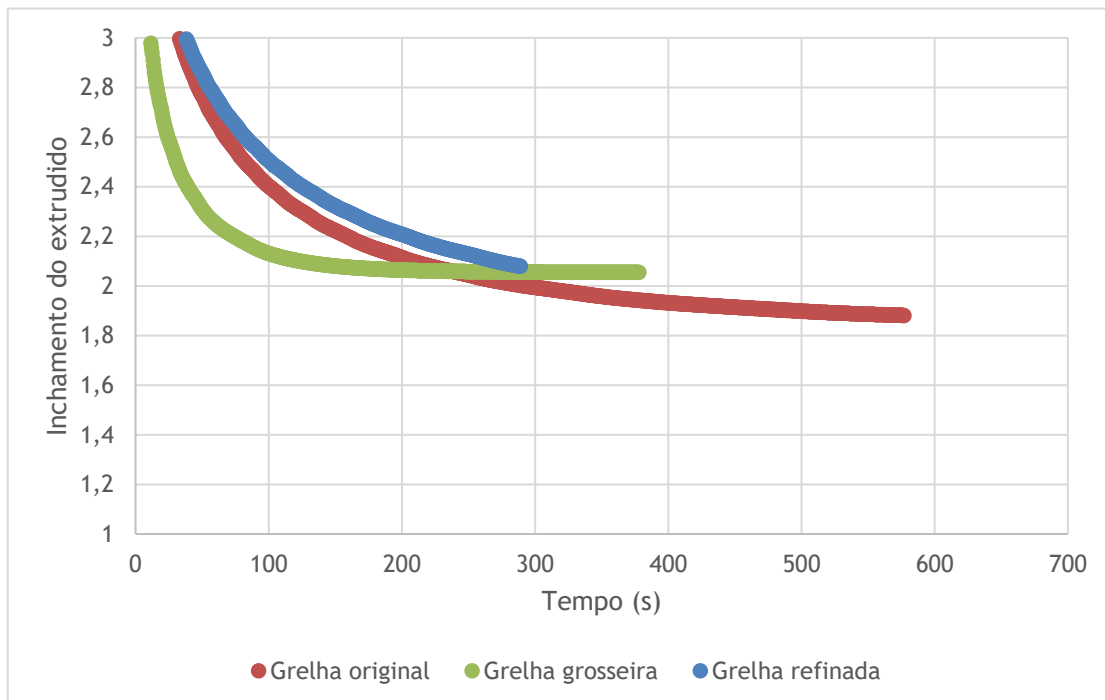


Figura 31 - Evolução do inchamento do extrudido com o tempo para diferentes grelhas. Composto T08846, $Re=0,06$; $De=757,68$ (Modelo de White-Metzner)

4.3.2.2 Influência da massa volúmica do fluido

Para verificar se a alteração na massa volúmica não introduz erros significativos, foi realizada uma simulação para testar essa mudança. Como se pode facilmente concluir, esse teste não foi efetuado com a massa volúmica real porque é inviável utilizar um passo de simulação tão baixo. Em alternativa, no teste realizado foi apenas diminuída a massa volúmica da borracha em uma ordem de grandeza. Desta forma, é apenas necessário diminuir cerca de 10 vezes ao passo temporal da simulação, uma vez que o tempo difusivo e o número de Reynolds também

diminuíram uma ordem de grandeza. Todas as restantes variáveis da simulação permanecem inalteradas. Note-se que esta alteração conduz a um tempo de computação cerca de 10 vezes superior.

Os resultados esperados para essa simulação serão os mesmos que os resultados obtidos na simulação original com a exceção do estado transiente. Na figura 32 encontra-se a evolução do inchamento do extrudido com o tempo para as duas simulações.

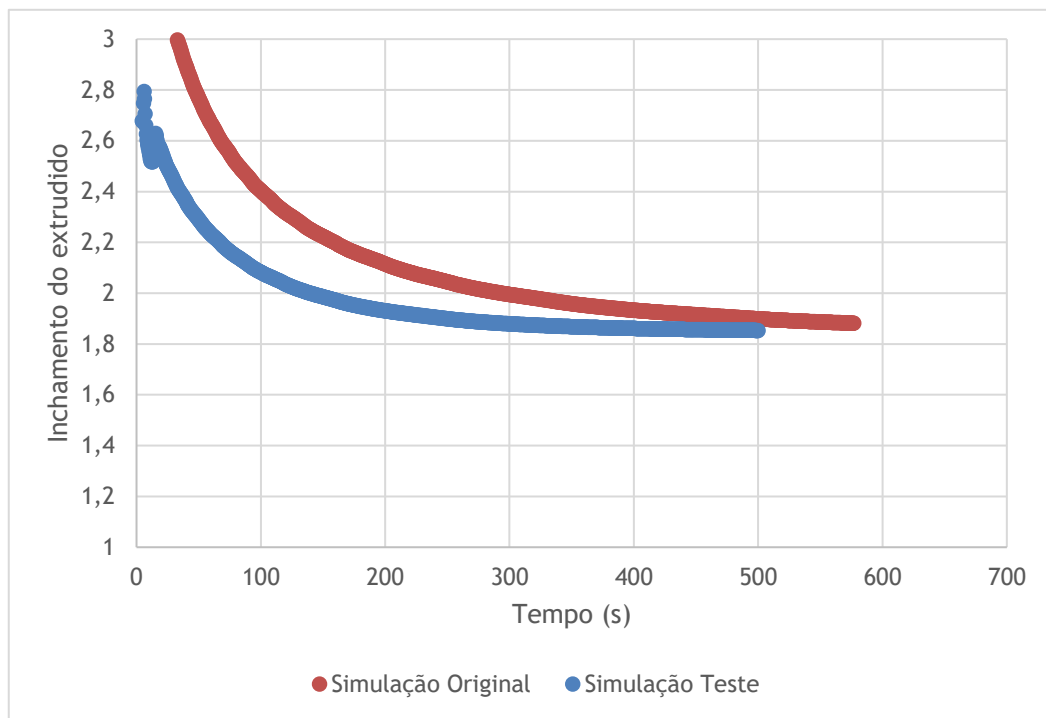


Figura 32 - Teste à influência da massa volúmica do fluido. Composto T08846. Modelo de White-Metzner; Simulação Original: $Re=0,06$; $De=757,7$; Simulação Teste: $Re=0,006$; $De=757,7$

Como se pode verificar, houve uma alteração na evolução do inchamento do extrudido com o tempo. Para aumentar ao máximo o passo temporal da simulação, escolheu-se aumentar o máximo possível à massa volúmica utilizada nas simulações. Apesar do número de Reynolds usado nas simulações ser bastante mais elevado do que o valor real, não se verifica uma alteração significativa no valor do inchamento do extrudido, particularmente à medida que se alcança o estado estacionário, validando a simplificação utilizada.

4.3.2.3 Influência das propriedades físicas do segundo fluido em escoamento

Como as características principais do escoamento dependem essencialmente das propriedades dos compostos de borracha, é esperado que as propriedades físicas do segundo fluido não tenham grande influência no inchamento do extrudido obtido.

Neste caso, as propriedades do segundo fluido em escoamento seriam, adequadamente, as propriedades do ar. No entanto, como diferem em várias ordens de grandeza das propriedades

dos compostos de borracha (principalmente a viscosidade, aproximadamente 12 ordens de grandeza), iria introduzir problemas numéricos na simulação.

Assim, foram utilizadas propriedades do segundo fluido de cerca de 3 a 4 ordens de grandeza inferiores às propriedades da borracha (15 kg/m^3 para a massa volúmica e $10 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ para a viscosidade). É, por isso, necessário testar se a utilização de propriedades (irrealistas) do segundo fluido significativamente mais altas do que a realidade pode influenciar o inchamento do extrudido obtido. Para testar essa influência foi realizada uma simulação em que essas propriedades foram aumentadas uma ordem de grandeza. Na figura 33 é possível observar o comportamento dessas duas simulações. Como seria de esperar, o comportamento é idêntico, o que vem confirmar a hipótese de que a influência do segundo fluido é praticamente nula, para as condições usadas nas simulações deste trabalho.

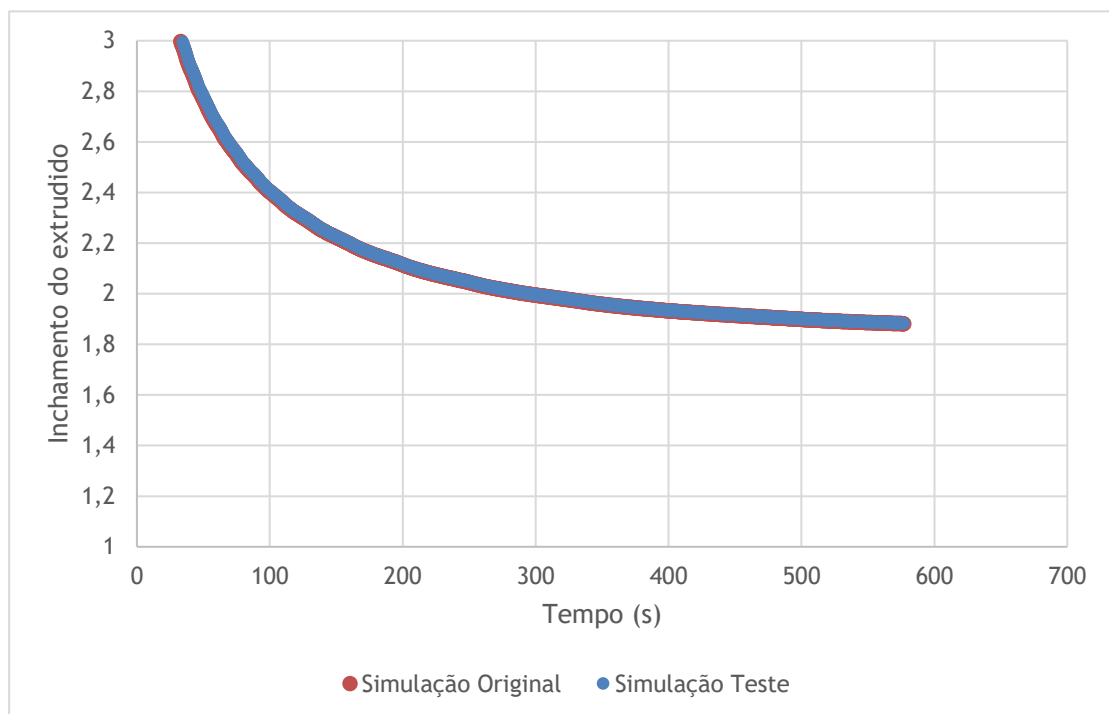


Figura 33 - Teste à influência das propriedades do segundo fluido. Composto T08846; $Re=0,06$; $De=757,7$ (Modelo de White-Metzner)

Com a realização destes testes foi possível validar os resultados obtidos com base nas propriedades físicas alteradas. Assim, com base no inchamento do extrudido obtido para estes dois compostos, pode-se concluir que o modelo de White-Metzner se revela promissor para a caracterização do processo de extrusão de compostos de borracha.

Os resultados obtidos foram mais próximos dos valores reais do inchamento do extrudido dos dois compostos de borracha. No entanto, para estes compostos utilizados nas simulações obteve-se um valor semelhante entre eles quando, na realidade, revelam comportamentos diferentes. A causa mais provável para a obtenção deste resultado está na escolha dos modos

de Maxwell utilizados. Apesar de os dois compostos de borracha terem viscosidades muito diferentes, os tempos de relaxação são semelhantes o que poderá resultar em inchamentos do extrudido semelhantes. Como seria de esperar, o fluido mais elástico apresentaria um maior inchamento do extrudido quando na realidade isso não acontece. Através de uma escolha de modos de Maxwell mais adequados poderão ser obtido resultados mais concordantes com os resultados experimentais.

É importante mencionar, no entanto, as simplificações usadas nestas simulações, principalmente na zona pré-fieira onde o escoamento é fortemente condicionado. Ao efetuar estas simplificações, as tensões de corte ao longo do escoamento estabilizam antes de se atingir a zona de expansão, caso que certamente não deverá ocorrer na realidade e que poderá ter influência no comportamento da borracha na saída da fieira. No entanto, como se obtiveram valores do inchamento do extrudido próximos da realidade, pode-se concluir que estas simulações conseguiram prever as tensões de corte junto da parede para que tal inchamento ocorra.

Outro aspeto que se deve mencionar, refere-se às propriedades reológicas dos compostos. Nestas simulações são usadas funções materiais que foram determinadas em escoamento de corte. No entanto, devido aos vários obstáculos que a borracha atravessa durante o escoamento, também seria importante considerar propriedades elongacionais da borracha, as quais são, contudo, difíceis de caracterizar experimentalmente.

5 Conclusões

O principal objetivo deste trabalho era determinar qual o melhor modelo para prever o comportamento dos compostos de borracha no processo de extrusão.

Com as propriedades determinadas em ensaios oscilatórios, a partir dos varrimentos em frequência, foi possível prever o efeito pseudoplástico dos compostos de borracha usando a regra de Cox-Merz e efetuando ajuste ao modelo de Carreau-Yasuda. Através da implementação do modelo de White-Metzner previu-se o inchamento do extrudido para dois compostos de borracha diferentes.

Foram necessárias várias simplificações para diminuir o tempo de execução de uma simulação. Entre as várias simplificações usadas, a alteração na massa volúmica do composto de borracha, foi a que teve mais impacto nos resultados. No entanto, pode-se verificar que os resultados ainda são aceitáveis, o que valida o modelo de White-Metzner como um modelo adequado para descrever o comportamento dos compostos de borracha no processo de extrusão.

Tendo em conta os resultados promissores que foram obtidos, e agora que já se conhece um modelo adequado para representar o escoamento da borracha, o próximo passo deverá ser aumentar a complexidade das simulações para se aproximarem ainda mais da realidade. Tal medida irá necessitar de um aumento do poder de processamento para que o tempo necessário para a execução de uma simulação não seja muito elevado, já que essa foi uma das maiores dificuldades deste trabalho.

Futuramente, com o desenvolvimento do trabalho aqui realizado, será possível projetar as fieiras da extrusão a partir da informação dada pelas simulações. Assim, haverá um enorme ganho no que diz respeito ao tempo necessário para começar a extrudir um composto de borracha com uma nova fieira, bem como uma diminuição dos desperdícios de compostos de borracha associados.

6 Avaliação do Trabalho Realizado

6.1 Objetivos Realizados

O principal objetivo deste trabalho passava por determinar qual o modelo que melhor se ajusta ao comportamento da borracha e com isso prever o inchamento do extrudido no processo extrusão.

À segunda tentativa, com o modelo de White-Metzner, foi encontrado um modelo que se ajusta satisfatoriamente ao pretendido e que prevê com boa aproximação o inchamento do extrudido da borracha.

As simulações obtidas, apesar de próximas do pretendido, ainda poderão ser melhoradas principalmente no que diz respeito ao domínio da simulação através do aumento da complexidade do escoamento dos compostos de borracha a montante da fieira.

6.2 Limitações e Trabalho Futuro

A principal limitação encontrada durante a realização deste trabalho foi o tempo requerido para realizar uma simulação. Dado a elevada quantidade de cálculo numérico a realizar durante uma simulação, cada uma levou cerca de 5 a 7 dias a realizar.

Como se trabalhou com compostos muito viscosos e elásticos, e um domínio com dimensões reduzidas, o aparecimento frequente de problemas numéricos levou a que muitas vezes se gastassem vários dias com simulações inconclusivas.

No entanto, este trabalho revela ser muito promissor. Dado que estas foram as primeiras simulações realizadas a abordar este problema, foi necessário realizar muitas simplificações para verificar a viabilidade da previsão do comportamento da borracha através de simulação. Como se pode verificar, esta abordagem produziu resultados satisfatórios, e agora está na altura de dar o passo seguinte. Com um aumento na capacidade de processamento disponível, para se poder utilizar simulações com um maior número de elementos, um aumento da complexidade na zona pré-fieira é certamente o próximo passo a dar. É aí que, segundo a experiência dos operadores, se encontram os maiores problemas da extrusão e por isso deve ser certamente o próximo problema a atacar.

Para além disso, ainda é possível caracterizar melhor os compostos de borracha na simulação. Como a extrusão não é um processo isotérmico, a inclusão do balanço energético no conjunto de equações a resolver pelo *solver* ajudará certamente a obter melhores resultados. Como as propriedades da borracha dependem fortemente da temperatura, ao utilizar o balanço

energético vai-se conseguir utilizar as propriedades mais adequadas nas diferentes zonas da extrusora, que se encontram a diferentes temperaturas.

Apesar de já se ter encontrado um modelo que prevê adequadamente o inchamento do extrudido, ainda é possível testar outros modelos constitutivos que sejam ainda mais adequados. Tendo em conta os dados experimentais disponíveis, e os que seria possível obter, o modelo de White-Metzner tem relativamente poucos parâmetros a determinar e produziu resultados satisfatórios. No entanto, existe um modelo criado por Simhambhatla e Leonov (1995) que, através da utilização de um maior número de parâmetros, é adequado para prever o escoamento de um polímero com um enchedor. Para além das interações polímero-polímero, prevê também as interações polímero-enchedor. Dada a natureza complexa da borracha, este modelo pode representar muito bem o seu escoamento na extrusão.

6.3 Apreciação Final

O tempo passado na Continental Mabor foi extremamente enriquecedor e permitiu-me aprender e crescer muito. Ter a oportunidade de fazer a minha dissertação nesta empresa durante 6 meses permitiu-me observar de perto como funciona uma fábrica de grandes dimensões e toda a dinâmica de um departamento como a Direção de Industrialização do Produto. Como seria de esperar, trabalho em equipa é uma das qualidades necessárias para que um departamento de grandes dimensões atinja os objetivos pretendidos.

Pela primeira vez pude ver de perto os conhecimentos que adquiri, durante os últimos cinco anos, serem aplicados diretamente na linha de produção. Não só confirmei a importância do conhecimento que adquiri, mas também a importância da experiência obtida no tratamento e análise de dados. Em ambiente empresarial é necessário saber criticar os resultados obtidos para que, sempre que possível, se aumente ou melhore o rendimento do processo.

Espero que, futuramente, estes resultados, que se revelam promissores, possam vir a ter impacto na fábrica e melhorem o processo de extrusão da borracha. Será necessário mais algum desenvolvimento posterior ao meu trabalho, mas acredito que tem grande potencial para acontecer.

Referências

- Afonso, A., P. J. Oliveira, F. T. Pinho e M. A. Alves. 2011. "Dynamics of high-Deborah-number entry flows: a numerical study". *Journal of Fluid Mechanics* no. 677:272-304.
- Agassant, Jean-François, Dawn R. Arda, Christelle Combeaud, Armin Merten, Helmut Muenstedt, Malcolm R. Mackley, Laurent ROBERT e Bruno Vergnes. 2006. "Polymer processing extrusion instabilities and methods for their elimination or minimisation". *International Polymer Processing* no. 21 (3):Pages 239-255.
- Alves, M. A., P. J. Oliveira e F. T. Pinho. 2003. "A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection". *International Journal for Numerical Methods in Fluids* no. 41 (1):47-75.
- Barus, Carl. 1891. "Note on the Dependence of Viscosity on Pressure and Temperature". *Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences* no. 27:13-18. <http://www.jstor.org/stable/20020462>.
- Carvalho, Mariana. 2017. "Caracterização reológica de compostos de borracha no processo de extrusão por DMA (Dynamic Mechanical Analysis)", Departamento de Engenharia Química, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto. Acedido a 29/01/2018. <https://repositorio-aberto.up.pt/handle/102016/106055>.
- Comminal, Raphaël, Francisco Pimenta, Jesper H. Hattel, Manuel A. Alves e Jon Spangenberg. 2018. "Numerical simulation of the planar extrudate swell of pseudoplastic and viscoelastic fluids with the streamfunction and the VOF methods". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* no. 252:1-18. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025717304883>.
- Continental. 2015. Tire Construction PLT.
- Continental. 2018. "History of the Passenger Tyre". Acedido a 2018/02/28. www.continentaltire.com/content/history-passenger-tire.
- Coran, A. Y. 2013. "Chapter 7 - Vulcanization". Em *The Science and Technology of Rubber (Fourth Edition)*, 337-381. Boston: Academic Press.
- Cox, W. P. e E. H. Merz. 1958. "Correlation of dynamic and steady flow viscosities". *Journal of Polymer Science* no. 28 (118):619-622.
- Dealy, John M. e D. Plazek. 2009. "Time-Temperature Superposition - a Users Guide". *Rheology Bulletin* no. 78 (2):16-31.
- DIP, Continental. 2017. Materiais que constituem os pneus. Lousado: Continental.
- Donnet, Jean-Baptiste e Emmanuel Custodero. 2013. "Chapter 8 - Reinforcement of Elastomers by Particulate Fillers". Em *The Science and Technology of Rubber (Fourth Edition)*, 383-416. Boston: Academic Press.
- Giesekus, H. 1982. "A unified approach to a variety of constitutive models for polymer fluids based on the concept of configuration-dependent molecular mobility". *Rheologica Acta* no. 21 (4):366-375.
- Greenshields, Christopher J. 2011-2016. User Guide version 4.0. <http://openfoam.org>.
- Hamed, G. R. 2012. "Materials and Compounds A2 - Gent, Alan N". Em *Engineering with Rubber (Third Edition)*, 11-36. Hanser.
- M. Squires, Todd e Stephen R. Quake. 2005. *Microfluidics: Fluid physics at the nanoliter scale*. Vol. 77.

- Mabor, Continental. 2017a. "A Continental Mabor". Acedido a 28/03/2017. <http://contimaboronline/gca/?id=38>.
- Mabor, Continental. 2017b. "O Grupo Continental". Acedido a 28/03/2018. <http://contimaboronline/gca/?id=405>.
- Mabor, Continental. 2017c. "Our Basics". Acedido a 28/03/2018. <http://contimaboronline/gca/?id=299>.
- Morrison, F.A. 2001. *Understanding Rheology*. Oxford University Press.
- OpenCFD. 2004-2017a. "OpenFOAM History". Acedido a 10/04/2018. <https://www.openfoam.com/history/>.
- OpenCFD. 2004-2017b. "OpenFOAM The open source CFD toolbox". Acedido a 10/04/2018. <https://www.openfoam.com>.
- Pimenta, F. e M. A. Alves. 2017. "Stabilization of an open-source finite-volume solver for viscoelastic fluid flows". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* no. 239:85-104.
- Pimenta, F. e M. A. Alves. 2018. RheoTool User Guide, Version 2.0. <https://github.com/fppimenta/rheoTool>.
- Rauwendaal, Chris. 2014a. "1 - Introduction". Em *Polymer Extrusion (Fifth Edition)*, 1-10. Hanser.
- Rauwendaal, Chris. 2014b. "2 - Different Types of Extruders". Em *Polymer Extrusion (Fifth Edition)*, 11-47. Hanser.
- Rauwendaal, Chris. 2014c. "3 - Extruder Hardware". Em *Polymer Extrusion (Fifth Edition)*, 49-83. Hanser.
- Rauwendaal, Chris. 2014d. "4 - Instrumentation and Control". Em *Polymer Extrusion (Fifth Edition)*, 85-146. Hanser.
- Rauwendaal, Chris. 2014e. "7 - Functional Process Analysis". Em *Polymer Extrusion (Fifth Edition)*, 255-508. Hanser.
- Rauwendaal, Chris, Ruben Gonzalez-Nunez e Denis Rodrigue. 2002. "Polymer Processing: Extrusion". Em *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*. John Wiley & Sons, Inc.
- Rodgers, Brendan e Walter Waddell. 2013a. "Chapter 9 - The Science of Rubber Compounding". Em *The Science and Technology of Rubber (Fourth Edition)*, 417-471. Boston: Academic Press.
- Rodgers, Brendan e Walter Waddell. 2013b. "Chapter 14 - Tire Engineering". Em *The Science and Technology of Rubber (Fourth Edition)*, 653-695. Boston: Academic Press.
- Simhambhatla, M. e A. I. Leonov. 1995. "On the rheological modeling of filled polymers with particle-matrix interactions". *Rheologica Acta* no. 34 (4):329-338.
- Simpson, R. B. 2002. *Rubber Basics*. Smithers Rapra Technology.
- Tadmor, Z. e C. G. Gogos. 2006. *Principles of Polymer Processing*. SPE technical volume: Wiley.
- Thomson, Robert William. 1847. Improvement in carriage-wheels, &c., submetida em 1847/05/8. Acedido a 2018/02/22. <https://worldwide.espacenet.com/publicationDetails/biblio?CC=US&NR=5104A&KC=A&FT=D>.
- Wang, Kejian. 2012. "Die Swell of Complex Polymeric Systems". Em *Viscoelasticity - From Theory to Biological Applications*, editado por Juan de Vicente, Ch. 04. Rijeka: InTech. Acedido a 2018-03-21. <http://dx.doi.org/10.5772/50137>.
- White, J. L. e A. B. Metzner. 1963. "Development of constitutive equations for polymeric melts and solutions". *Journal of Applied Polymer Science* no. 7 (5):1867-1889.

Anexo 1 Ajuste ao modelo de Maxwell

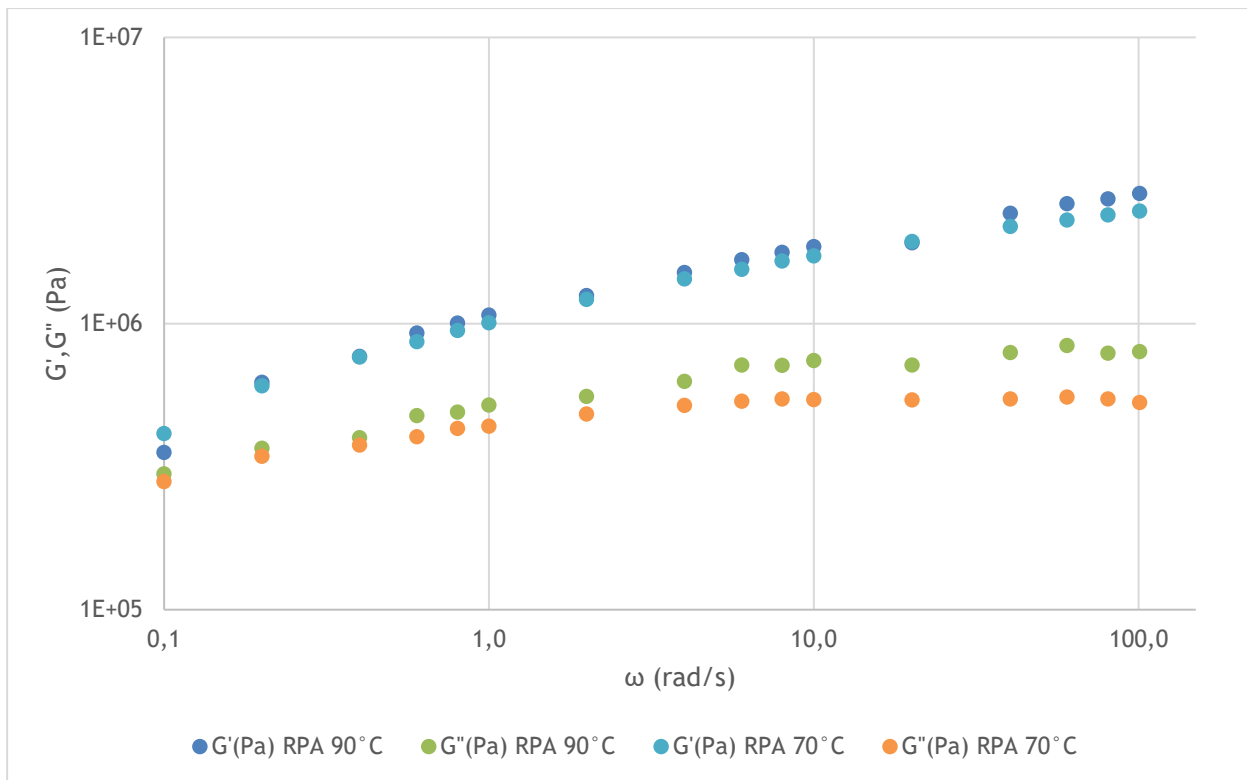


Figura A1.1 - Pontos experimentais obtidos com o composto T08846

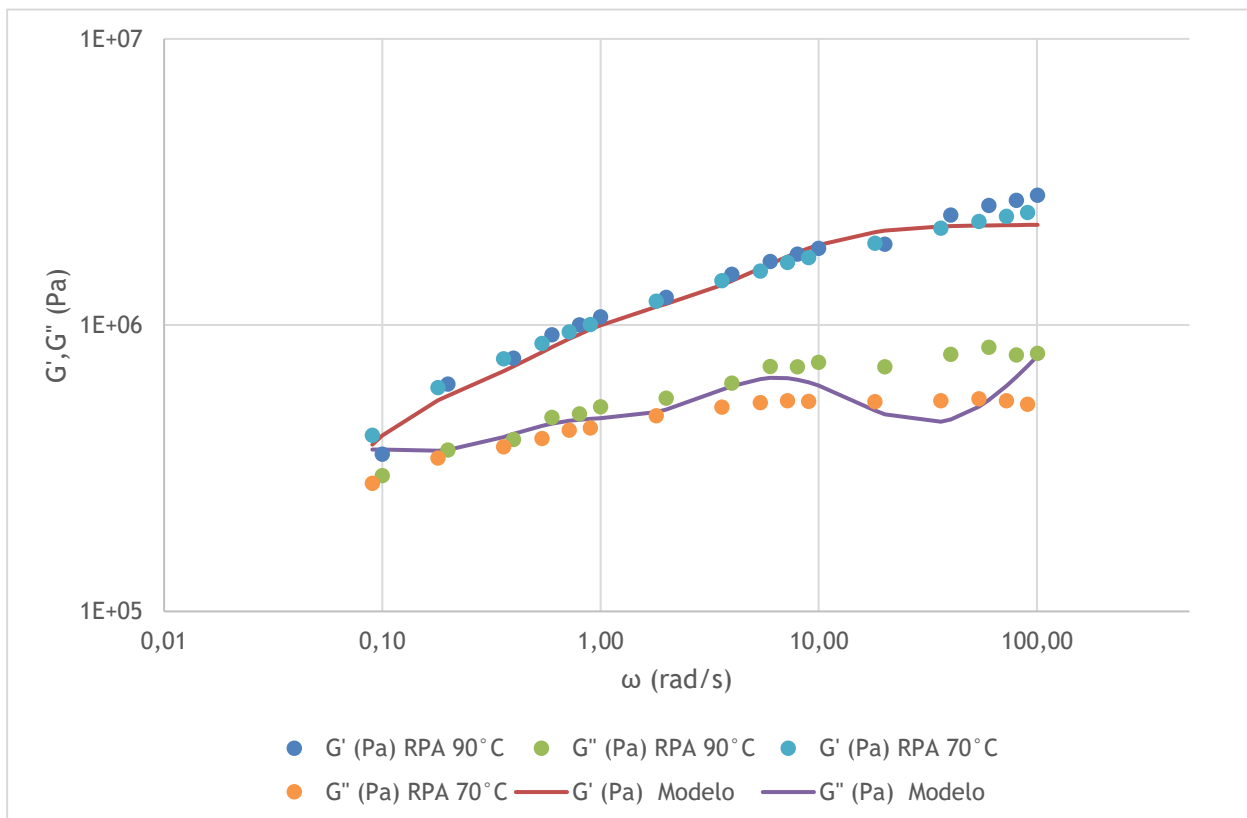


Figura A1.2 - Curva mestra a 90°C e respetiva curva de ajuste para o composto T08846

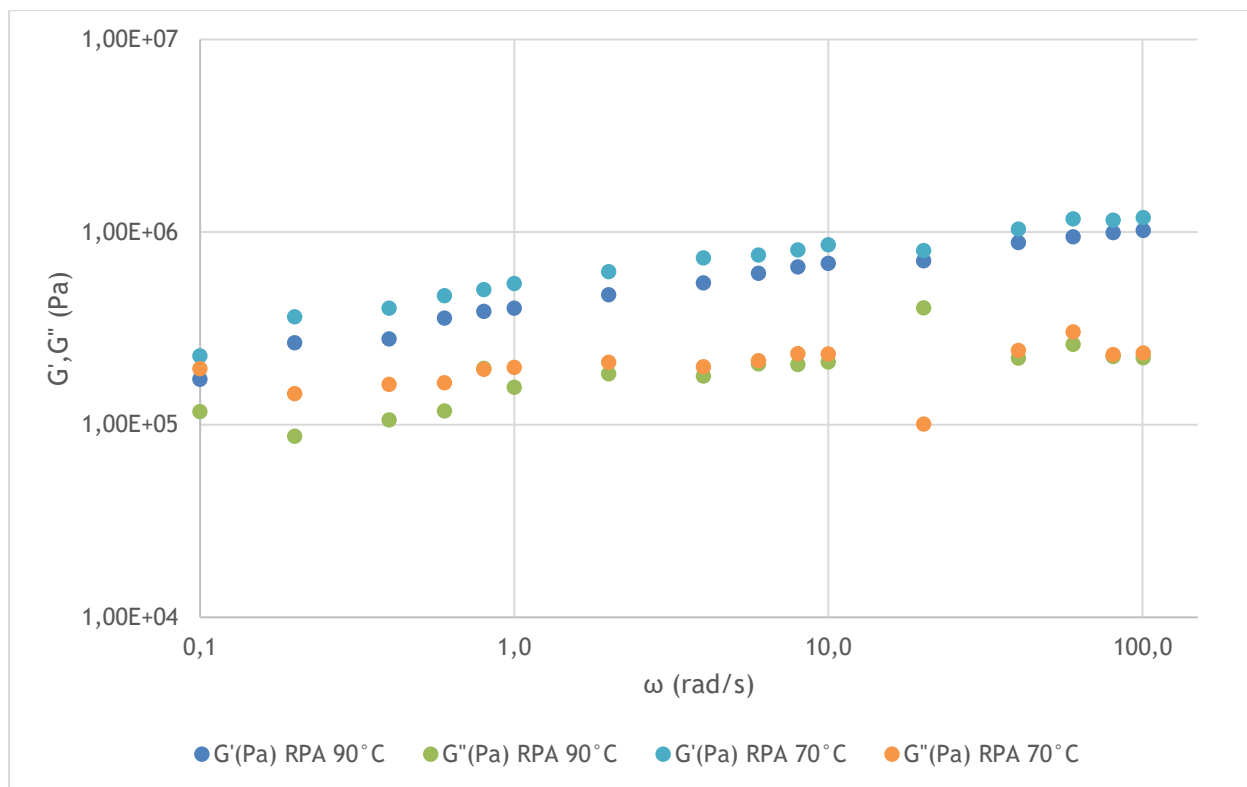


Figura A1.3 - Pontos experimentais obtidos com o composto T12301

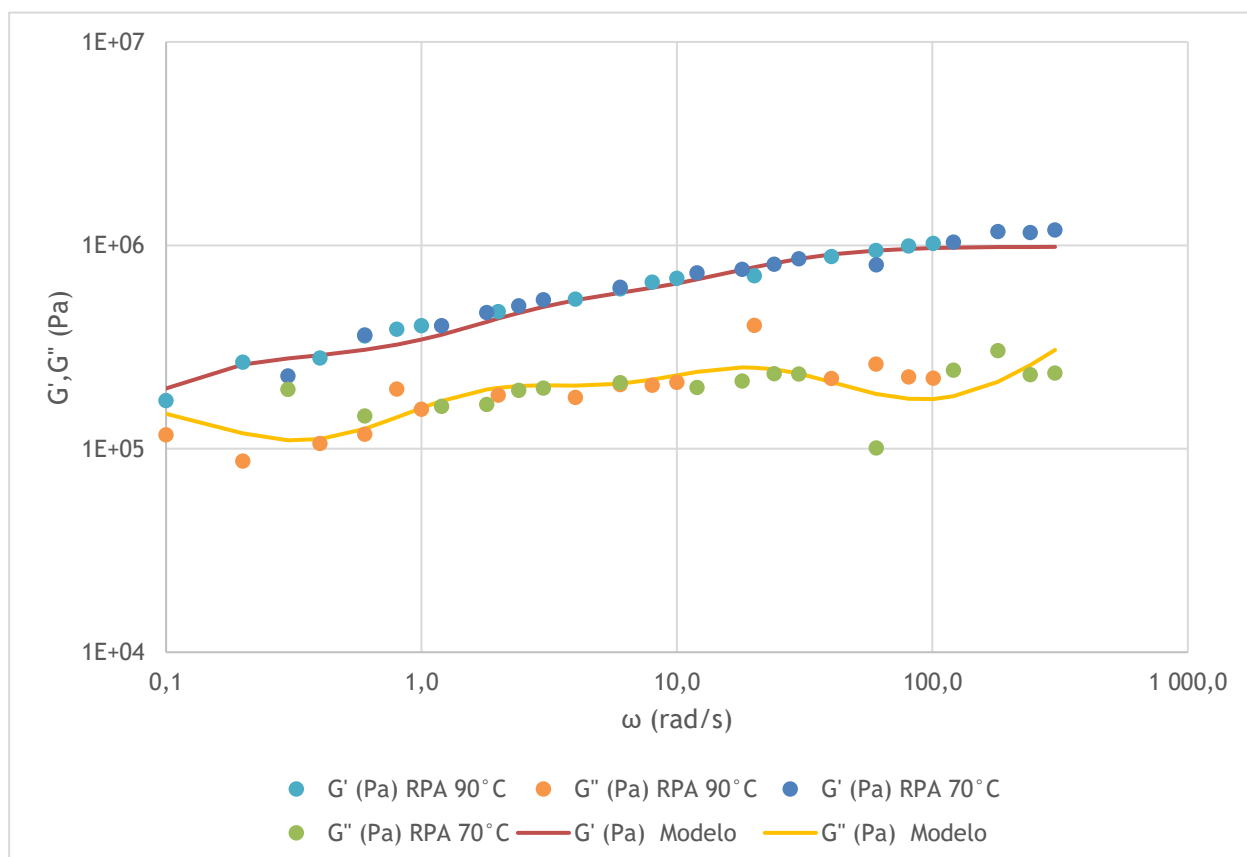


Figura A1.4 - Curva mestra a 90°C e respetiva curva de ajuste para o composto T12301

Anexo 2 Estimativa de parâmetros de Carreau-Yasuda para outros compostos

O ajuste aos pontos experimentais obtidos em ensaios oscilatórios ao modelo de Maxwell generalizado bem como a estimativa dos elementos de Maxwell para os seguintes compostos foi omitida, uma vez que pode ser encontrada em Carvalho (2017). A viscosidade de corte foi estimada usando a regra de Cox-Merz, e os resultados obtidos foram ajustados ao modelo de Carreau ($a = 2$), cujos parâmetros estimados encontram-se na Tabela A2.1. De notar que para estes compostos não foi realizado ensaio no RPA a 90°C pelo que só se utilizaram os pontos experimentais medidos a 70° , não sendo necessário utilizar o princípio da sobreposição tempo-temperatura.

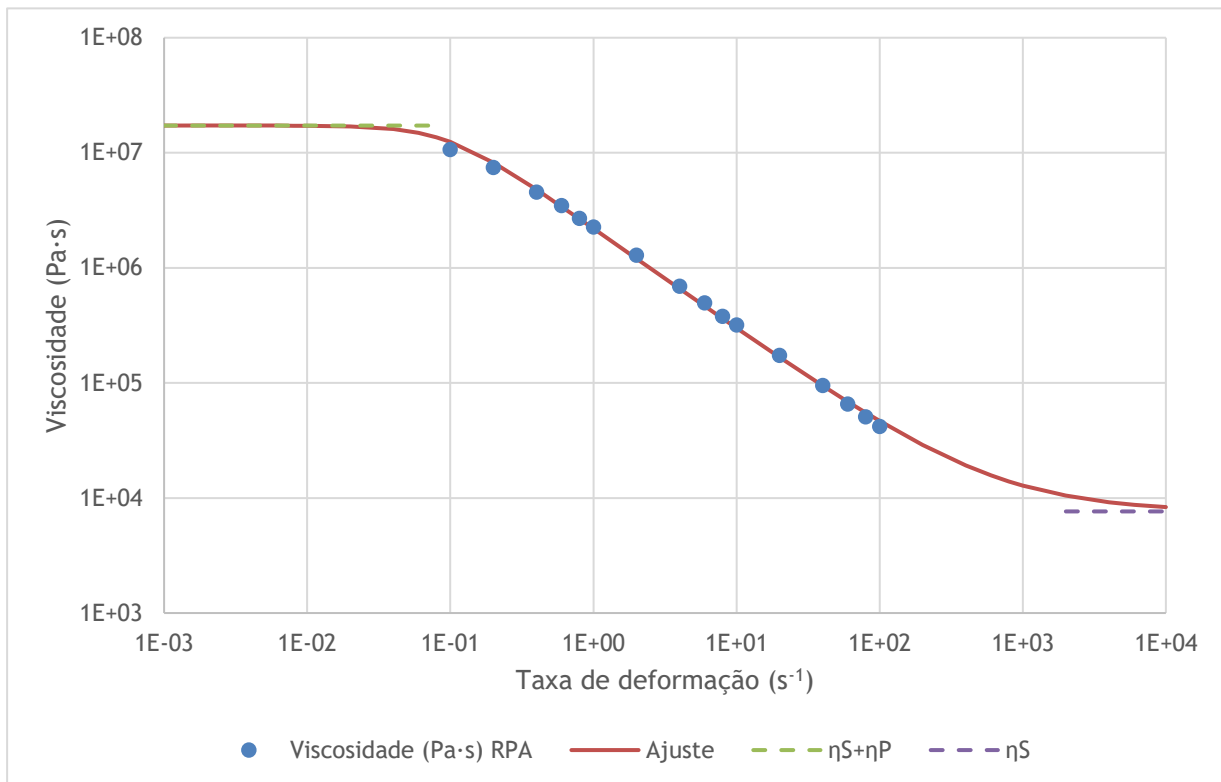


Figura A2.1 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T00991

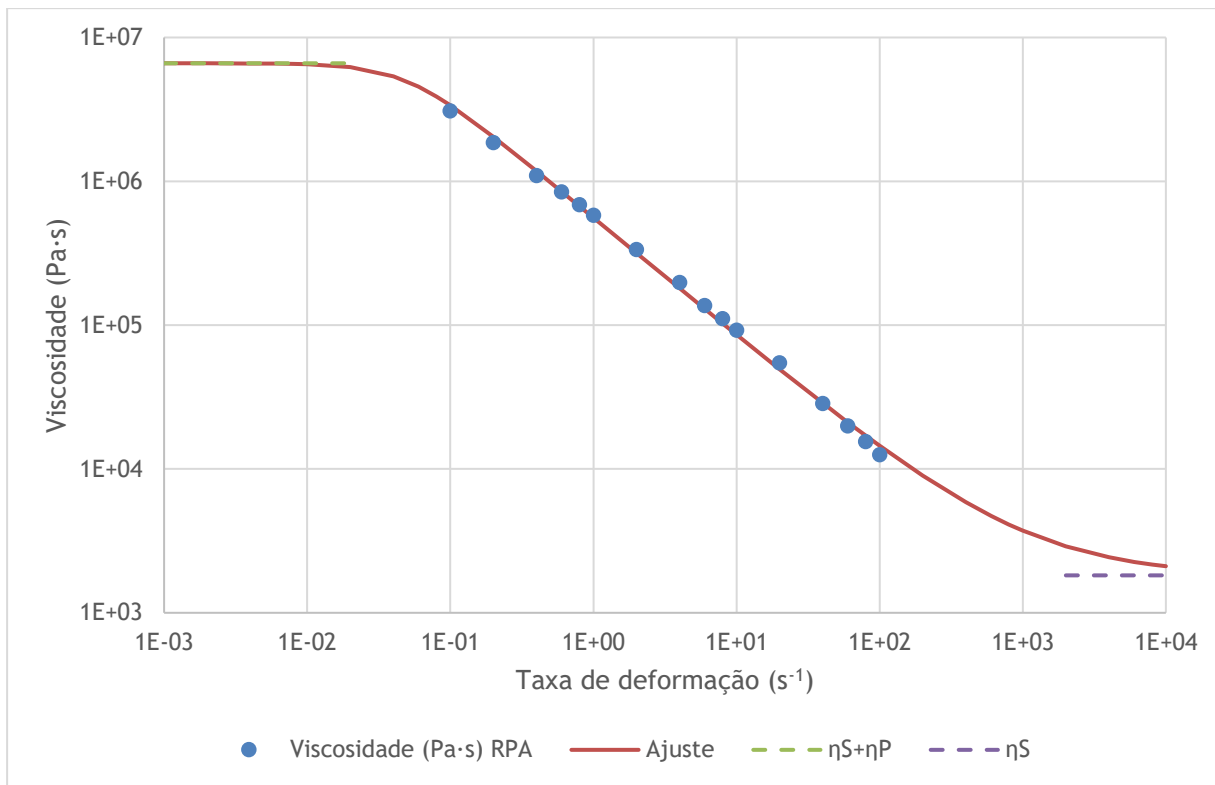


Figura A2.2 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T01102

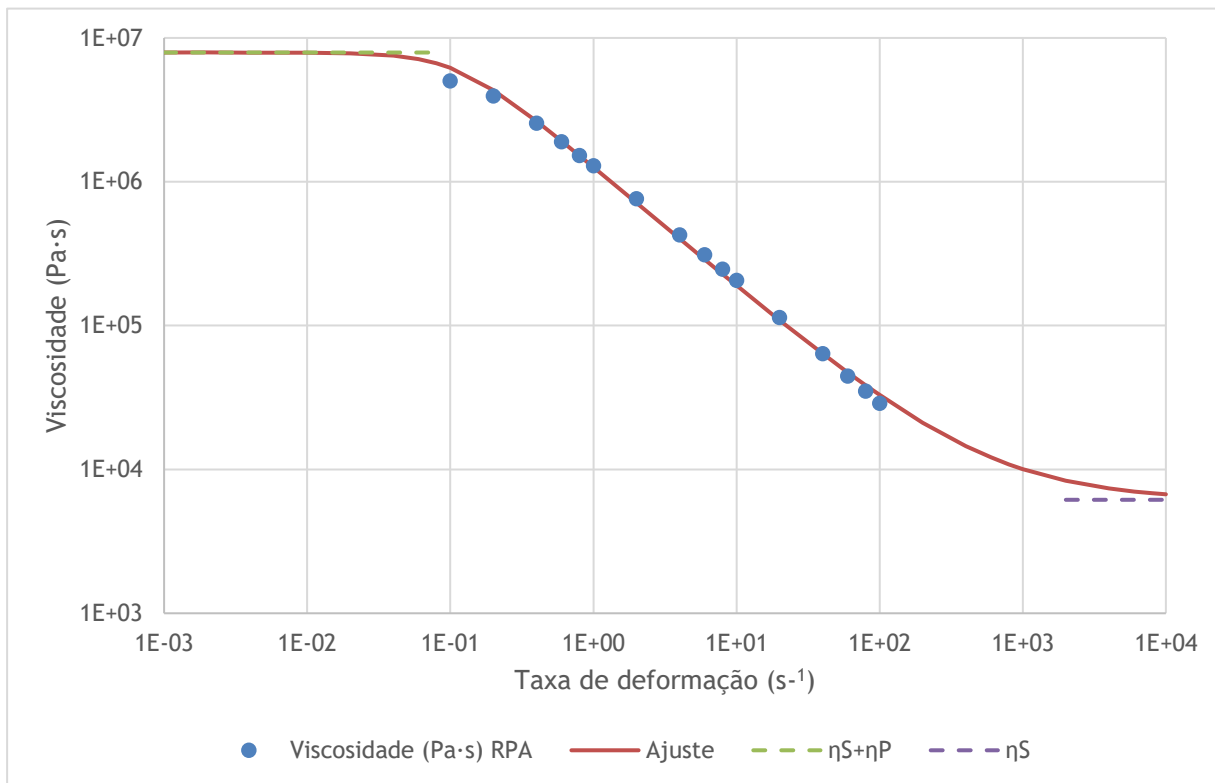


Figura A2.3 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T01297

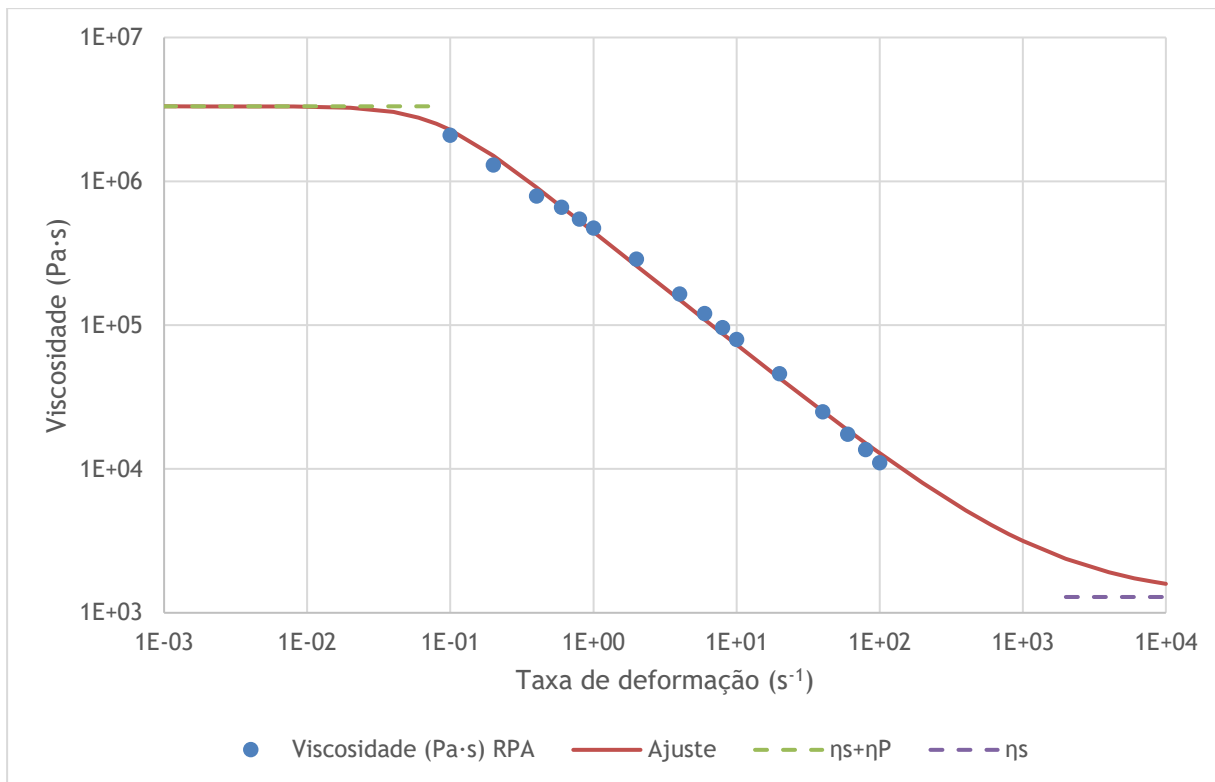


Figura A2.4 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T02128

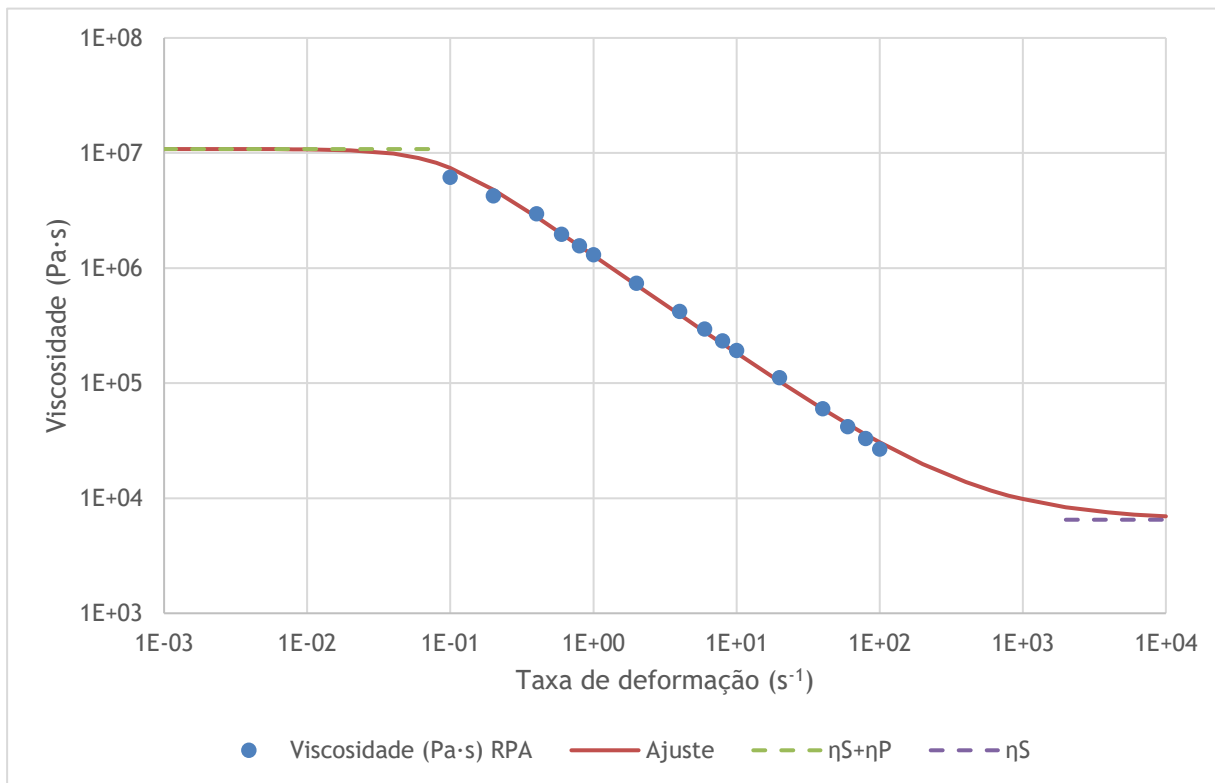


Figura A2.5 . Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T05750

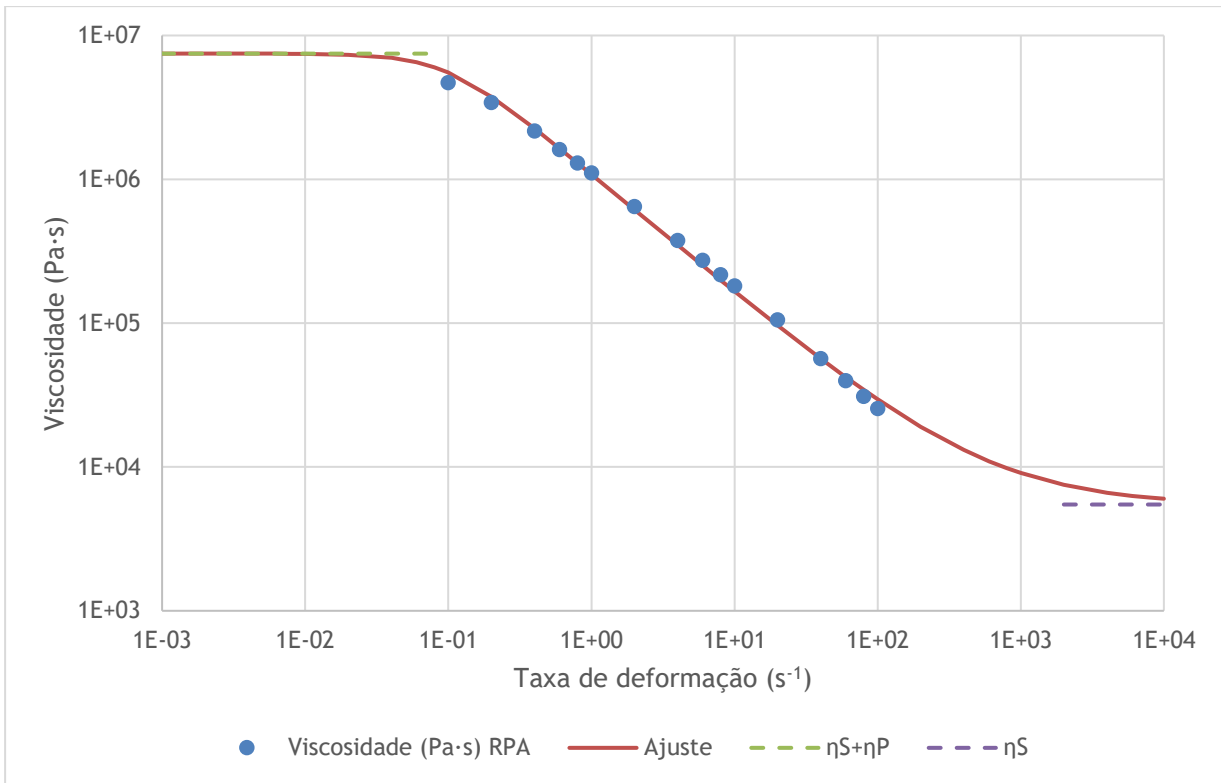


Figura A2.6 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T06865

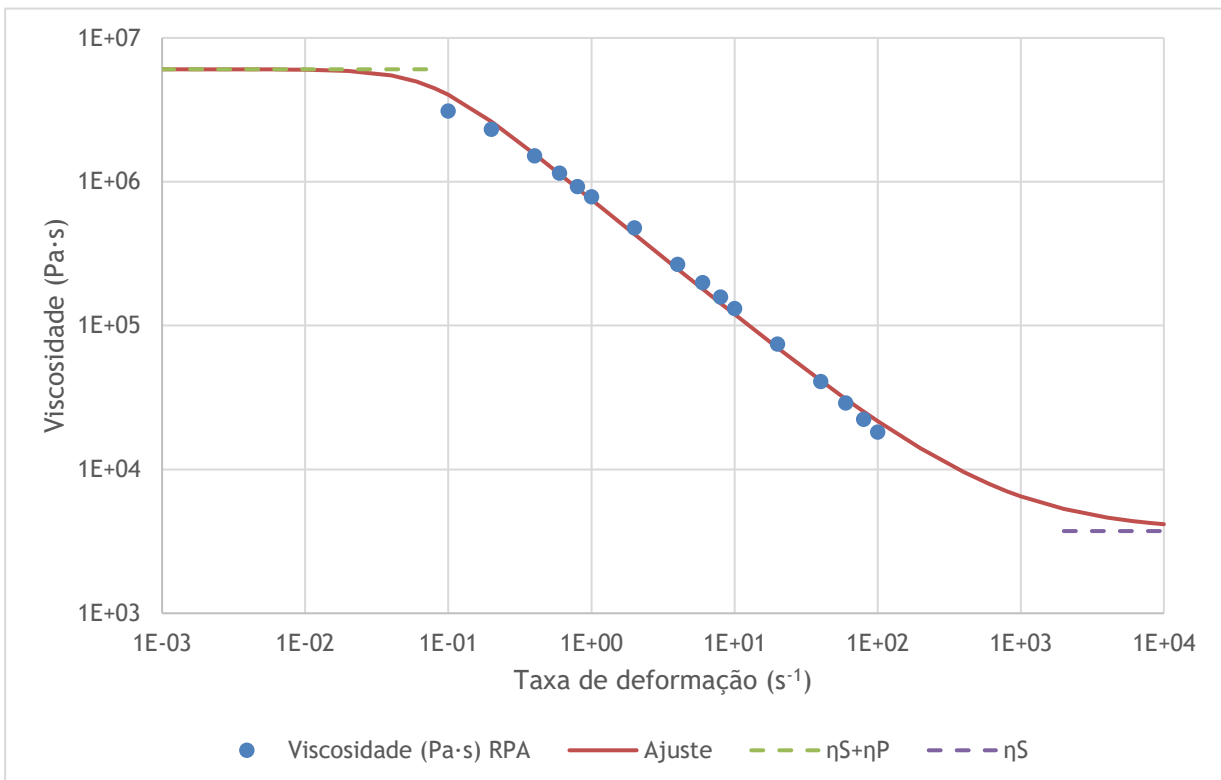


Figura A2.7 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T09501

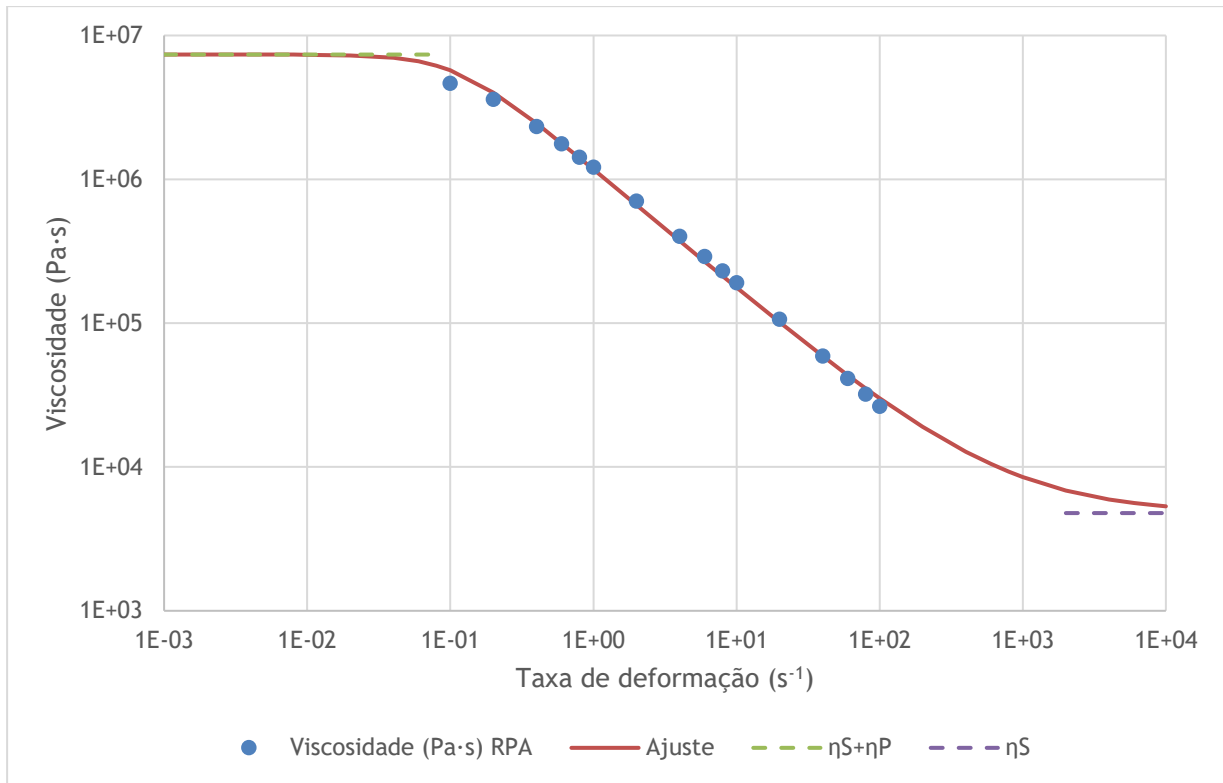


Figura A2.8 - Variação da viscosidade com a taxa de deformação para o composto T11200

Tabela A2.1 - Estimativa dos parâmetros para o modelo de Carreau para diferentes compostos de borracha

Composto	k	n	η_P (Pa·s)	η_S (Pa·s)
T00991	10,53	0,12	$7,64 \times 10^3$	$1,72 \times 10^7$
T01102	20,33	0,18	$1,82 \times 10^3$	$6,62 \times 10^6$
T01297	8,95	0,16	$6,15 \times 10^3$	$7,91 \times 10^6$
T02128	12,63	0,21	$1,29 \times 10^3$	$3,32 \times 10^6$
T05750	11,87	0,14	$6,50 \times 10^3$	$1,08 \times 10^7$
T06865	10,41	0,17	$5,48 \times 10^3$	$7,47 \times 10^6$
T09501	13,15	0,19	$3,73 \times 10^3$	$6,05 \times 10^6$
T11200	9,09	0,17	$4,78 \times 10^3$	$7,36 \times 10^6$