



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Mecânica

PETERSON PULGROSSI

Simulação Numérica de Extrusão de Compostos de Borracha

CAMPINAS

2017

PETERSON PULGROSSI

Simulação Numérica de Extrusão de Compostos de Borracha

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, na Área de Materiais e Processos de Fabricação.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO
FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO
ALUNO PETERSON PULGROSSI, E ORIENTADA
PELO PROF. DR. MARCOS AKIRA d'ÁVILA.

ASSINATURA DO ORIENTADOR

CAMPINAS

2017

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CNPq, 132723/2015-8

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

P966s Pulgrossi, Peterson, 1978-
Simulação numérica de extrusão de compostos de borracha / Peterson
Pulgrossi. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.

Orientador: Marcos Akira D'Ávila.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade
de Engenharia Mecânica.

1. Reologia. 2. Fluido dinâmica computacional (CFD). 3. Simulação
computacional. 4. Materiais viscoelástico. 5. Materiais viscoelástico -
Deformação. I. D'Ávila, Marcos Akira, 1972-. II. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Numerical simulation of rubber compound extrusion

Palavras-chave em inglês:

Rheology

Computational dynamic fluid (CFD)

Computer simulation

Viscoelastic materials

Viscoelastic materials – Deformation

Área de concentração: Materiais e Processos de Fabricação

Titulação: Mestre em Engenharia Mecânica

Banca examinadora:

Marcos Akira D'Ávila [Orientador]

Cecília Amélia de Carvalho Zavaglia

Carlos Henrique Scuracchio

Data de defesa: 22-02-2017

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Mecânica

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE MATERIAIS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO

Simulação Numérica de Extrusão de Compostos de Borracha

Autor: Peterson Pulgrossi

Orientador: Marcos Akira d'Ávila

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação:

Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila

Faculdade de Engenharia Mecânica - Unicamp

Prof^a. Dra. Cecília Amélia de Carvalho Zavaglia

Faculdade de Engenharia Mecânica - Unicamp

Prof. Dr. Carlos Henrique Scuracchio

Departamento de Engenharia de Materiais - UFSCar

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

Campinas, 22 de fevereiro de 2017.

Dedico este trabalho...

Ao meu filho Enzo, pelo carinho e ensinamentos de vida.

À minha esposa Camila, pelo amor, compreensão e apoio que sempre me dedicou.

Aos meu pais, Djalma e Bete, por estarem sempre presentes dando suporte a nossa família.

À minha irmã, Lizzie, por percorrer esse caminho comigo.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila, pela oportunidade e orientação, sem as quais a realização desse trabalho não seria possível.

Ao colega José Luis Dávila Sánchez, pelo apoio constante em todo o desenvolvimento dessa pesquisa.

Ao colega Nicolao Cerqueira Lima, pelo auxílio pontual em muitas fases do projeto.

Aos demais colegas, João, Rose, Geraldine, Taís e Ana Flávia, pela troca de conhecimentos e também pelos momentos de descontração.

Aos meus sogros, Osmar e Vera Lúcia, por estarem sempre presentes dando apoio e incentivando meus estudos.

Ao cunhado e amigo André Garrido, pela amizade a mim conferida.

À empresa Pirelli Pneus, especialmente ao Dr. Argemiro Costa, pelo importante auxílio financeiro ao programa e pelos dados experimentais.

À CNPQ, pelo financiamento da pesquisa que propiciou a construção desse trabalho.

O universo pode ser uma complexa simulação, composto por inúmeras malhas, regido por diversas condições de contorno imutáveis, que vai, aos poucos, sendo reveladas ao ser humano.

Peterson Pulgrossi

“Possuímos em nós mesmos, pelo pensamento e a vontade, um poder de ação que se estende muito além dos limites de nossa esfera corpórea.”

Allan Kardec

Resumo

Na grande maioria das operações de processamento de polímeros, como extrusão e moldagem por injeção, o polímero está no estado fundido e é submetido a um determinado tipo de escoamento. Devido ao caráter viscoelástico dos fluidos poliméricos, esses exibem certos fenômenos característicos dos fluidos complexos. No caso do processo de extrusão, na saída da matriz, ocorre o “inchamento do extrudado”, que é um efeito viscoelástico de grande relevância no projeto de matrizes, sendo esse fenômeno de importância fundamental no processamento de compostos de borracha, como, por exemplo, na extrusão de perfis de bandas de rodagem na indústria de pneus. Neste cenário, a simulação computacional de um perfil de extrusão na qual são utilizadas as equações que regem o escoamento de fluidos viscoelásticos tem grande valia. No presente trabalho, este fenômeno foi investigado utilizando os modelos constitutivos de Giesekus e PTT (Phan-Thien and Tanner) que descrevem o comportamento reológico viscoelástico de fluidos poliméricos. Para isso foi utilizado um *solver* viscoelástico do pacote aberto de fluidodinâmica computacional (CFD) OpenFOAM, que utiliza o método dos volumes finitos na realização das simulações. Adotou-se a geometria de um capilar, com seção transversal circular. Visando validar as simulações, casos publicados na literatura foram simulados, onde foi observada uma boa concordância entre os resultados das simulações com os resultados publicados na literatura. Foram avaliados também os resultados do inchamento do extrudado obtidos pelos dois modelos constitutivos, para um conjunto de parâmetros constitutivos típicos de um composto de borracha, onde para ambos os casos foram observados resultados fisicamente consistentes.

Palavras-chave: CFD; Simulação; Reologia; Fluido viscoelástico; OpenFOAM

Abstract

In most polymer processing operations, such as extrusion and injection molding, a polymer melt is submitted to a characteristic flow. Due to viscoelastic effects of polymeric fluids, specific viscoelastic phenomena can be observed. Considering the extrusion process, the viscoelastic effect of die swell, which occurs at the die exit, is of great importance on extrusion die projects. On this scenario, computer simulations of an extrusion die considering the equations that describe viscoelastic polymer flow is of great value. In this work, die swell was investigated using the Giesekus and PTT (Phan-Thien and Tanner) non-linear viscoelastic constitutive models. A computational fluid dynamics (CFD) open source package OpenFOAM was used, which is based on the finite volume method. The geometry of a capillary with a circular cross-section was adopted. To evaluate the simulations, the results were compared with published work from the literature and good agreement was observed between the simulations and the literature data. Die swell results obtained using both constitutive models, for a set of constitutive parameter typical of a rubber compound presented physically consistent results.

Key-words: CFD; Simulation; Rheology; Viscoelastic fluid; OpenFOAM

Lista de Ilustrações

Figura 1: Esquema de extrusora monorroscas e suas zonas.	22
Figura 2: Esquema do fenômeno do inchamento do extrudado em uma extrusora com matriz circular.	23
Figura 3. Geometria do capilar	42
Figura 4. Malha 1 selecionada para representar a geometria do capilar.	45
Figura 5. Inchamento máximo do extrudado para simulações realizadas com o modelo de Giesekus em diferentes vazões: (a) $Q=1,57 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (b) $Q=3,14 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (c) $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$	46
Figura 6. Inchamento máximo do extrudado para simulações realizadas com o modelo PTT em diferentes vazões: (a) $Q=1,57 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (b) $Q=3,14 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (c) $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$	47
Figura 7: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes vazões.....	49
Figura 8: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes comprimentos do capilar.....	49
Figura 9: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes tempos de relaxação.....	50
Figura 10: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes α do modelo de Giesekus.	51
Figura 11: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes vazões.....	52
Figura 12: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes comprimentos do capilar.....	52
Figura 13: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes tempos de relaxação.....	53
Figura 14: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes ε do modelo PTT.	53
Figura 15: Gráfico mostrando a concordância entre a curva de ajuste com os valores dos dados experimentais para o G^* de cada composto de borracha. (Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste).	55

Figura 16. Gráfico mostrando a concordância entre a curva de ajuste com os valores dos dados experimentais para a η^* de cada composto de borracha. A extrapolação da frequência permitiu encontrar o platô newtoniano. (Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste).	55
Figura 17. Escoamento do composto de borracha ERG-3 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.	57
Figura 18. Escoamento do composto de borracha ERG-4 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.	57
Figura 19. Escoamento do composto de borracha 145E pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.	58
Figura 20. Escoamento do composto de borracha 165E pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.	58
Figura 21. Escoamento do composto de borracha 145E2 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.	59
Figura 22. Escoamento do composto de borracha 165E2 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.	59

Lista de Tabelas

Tabela 1: Parâmetros do material utilizado nas simulações.....	43
Tabela 2: Características das malhas para o caso da literatura.....	44
Tabela 3: Raio do inchamento em milímetros para as respectivas vazões e modelos constitutivos: (MU et al., 2013) e OpenFOAM.	48
Tabela 4: Parâmetros encontrados para os compostos de borracha.....	56

Lista de Abreviaturas e Siglas

Letras Latinas

De	Número de Deborah	–
D_C	Diâmetro do capilar	(mm)
D_E	Diâmetro do extrudado	(mm)
D_R	Diâmetro do reservatório	(mm)
\mathbf{g}	Vetor aceleração gravitacional	(m.s ⁻²)
$ G^* $	Módulo complexo	(MPa)
G'	Módulo de armazenamento da componente elástica	(MPa)
G''	Módulo de armazenamento da componente viscosa	(MPa)
G	Módulo de relaxação	(MPa)
L	Comprimento do capilar	(mm)
p	Pressão	(Pa)
Q	Vazão	(m ³ /s)
R	Raio	(mm)
\mathbf{S}	Tensor taxa de deformação	(s ⁻¹)
t	Tempo	(s)
\mathbf{U}	Vetor velocidade	(m.s ⁻¹)
\mathbf{U}_r	Vetor de velocidade relativa	(m.s ⁻¹)
We	Número de Weissenberg	–

Letras Gregas

α	Fator adimensional de mobilidade	–
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação ou Taxa de cisalhamento	(s ⁻¹)
δ	Fração do fluido	–
ε	Parâmetro do modelo PTT relacionado à viscosidade extensional	–
η	Viscosidade	(Pa · s)
$ \eta^* $	Viscosidade complexa	(Pa · s)
η'	Componente elástica da viscosidade	(Pa · s)
η''	Componente viscosa da viscosidade	(Pa · s)
η_0	Viscosidade à taxa de deformação nula	(Pa · s)

η_s	Viscosidade do solvente	(Pa · s)
λ	Tempo de relaxação	(s)
ξ	Parâmetro do modelo PTT relacionado à segunda diferença de tensões normais	–
ρ	Densidade	(Kg/m ³)
$\boldsymbol{\tau}$	Tensão	(Pa)
$\boldsymbol{\tau}_p$	Tensor Tensão da contribuição polimérica	(Pa)
$\boldsymbol{\tau}_s$	Tensor Tensão da contribuição do solvente	(Pa)
φ	Propriedade genérica	–
ω	Frequência angular	(rad/s)

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	17
1.1 Objetivos.....	18
2. REVISÃO DA LITERATURA	19
2.1 Fluidos Viscoelásticos	19
2.2 Extrusão	21
2.3 O inchamento do extrudado.....	23
2.4 Simulação do inchamento do extrudado de fluidos viscoelásticos.....	24
3. MODELAGEM MATEMÁTICA	27
3.1 Equações de Conservação	27
3.2 Modelos Constitutivos Viscoelásticos.....	28
4. OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS DOS MODELOS	32
4.1 Funções Materiais.....	32
4.2 Roteiro para obtenção dos parâmetros.....	36
5. SIMULAÇÃO	38
5.1 Método VOF.....	38
5.2 Equipamento e o programa OpenFOAM	39
5.3 Métodos Numéricos utilizados na resolução de problemas de fluido-dinâmica computacional.....	40
5.4 Descrição do Problema.....	41
5.5 Casos com os compostos de borracha	43
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES	44
6.1 Análise de Convergência de Malha	44
6.2 Validação Numérica	45

6.3	Influência da variação de parâmetros no inchamento do extrudado	48
6.3.1	Influência dos parâmetros para o modelo de Giesekus	48
6.3.2	Influência dos parâmetros para o modelo PTT.....	51
6.4	Resultados - compostos de borracha	54
6.4.1	Parâmetros do Modelo de Giesekus e PTT	54
6.4.2	Simulação do inchamento do extrudado.....	56
7.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS.....	60
	Referências Bibliográficas	61

1. INTRODUÇÃO

Compostos de borracha são utilizados por vários tipos de indústrias que fabricam inúmeros produtos provenientes deste material. Dentre elas, um dos setores que se destaca é a indústria de pneus. A maioria dos veículos que possuem rodas utilizam pneu de borracha para sua locomoção, por exemplo, bicicletas, carros, caminhões, motocicletas, tratores, aviões, ônibus espaciais, etc. Esse, de fabricação complexa, chega a ter mais de 200 componentes na sua montagem. Por ser uma indústria muito lucrativa, da ordem de bilhões de dólares, investe-se muito em pesquisa e desenvolvimento nessa área.

Pneus são produtos de alta performance, que devem suportar milhares de quilômetros e variados tipos de solicitações mecânicas, como o próprio peso do carro em repouso, uma aceleração, curvas e frenagens. De fato, todo o tipo de força entre o veículo e o solo se dá através do pneu, numa área de contato relativamente pequena, aproximadamente do tamanho de um cartão postal. Vários testes são realizados para certificar e garantir a qualidade do produto, desde sobrecarga e temperatura elevada até teste de rodagem envolvendo análise de ruído, aderência em pista seca e molhada, resistência ao rolamento que é o atrito entre o pneu e o solo, etc. Como pode-se constatar, muitos destes efeitos se dão na banda de rodagem, pois é a região do pneu que está em contato com o solo.

A produção da banda de rodagem é feita pela extrusão de um composto de borracha através de uma ferramenta que contém o perfil que se quer fabricar. Na saída do perfil ocorre com o composto de borracha um fenômeno chamado “inchamento do extrudado”, causado pela relaxação de cadeias poliméricas estendidas à medida que a tensão exercida nesse composto é reduzida (Morrison, 2001). Este inchamento provoca alteração nas dimensões desejadas para o perfil extrudado, dificultando o processo de fabricação, pois faz-se necessário vários ajustes na matriz de extrusão até que se obtenha as dimensões projetadas para o perfil do produto. Nesse cenário, a simulação computacional do inchamento do extrudado, onde são utilizadas as leis físicas e equações que regem o escoamento de um polímero viscoelástico tem grande valia.

Neste trabalho foi realizado um estudo de simulação do inchamento do extrudado de fluidos viscoelásticos, visando aplicações no campo do processamento de borrachas. Foi

utilizado o *software* de *CFD* OpenFOAM, onde foram estudados casos publicados na literatura e também foram realizadas simulações a partir de parâmetros de modelos constitutivos obtidos experimentalmente de compostos de borracha.

Os modelos constitutivos utilizados foram os modelos de Giesekus e PTT. O objetivo de um modelo constitutivo é representar matematicamente a contribuição polimérica do fluido para o tensor das tensões num determinado escoamento. Isso se dá através da solução de complexas equações diferenciais, as quais geralmente possuem termos que foram criados a partir da teoria dos materiais. Devido a essa complexidade, poucos são os estudos disponíveis na literatura que abordam esse tema.

Visando avaliar os modelos constitutivos, bem como a metodologia de simulação apresentada neste trabalho, a geometria considerada foi a de um capilar de seção circular constante. Os resultados obtidos para o inchamento do extrudado mostraram-se fisicamente consistentes para os casos estudados.

1.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho foi a realização de simulações numéricas da extrusão de compostos de borracha, especificamente o inchamento do extrudado, utilizando dois modelos constitutivos viscoelásticos não-lineares: Giesekus e Phan-Thien-Tanner (PTT).

Para atingir esse objetivo, as seguintes etapas foram realizadas:

- Validação do *solver* ViscoelasticInterFoam do *software* de *CFD* OpenFOAM, através da comparação de casos publicados na literatura utilizando os modelos de Giesekus e PTT.
- Determinação dos parâmetros dos modelos de Giesekus e PTT através de dados experimentais de propriedades reológicas de compostos de borracha fornecidos por uma indústria do setor de borracha.
- Realização de simulações do inchamento do extrudado desses compostos para o caso de extrusão, em diferentes condições.

2. REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Fluidos Viscoelásticos

Fluidos viscoelásticos são aqueles que apresentam simultaneamente propriedades viscosas e elásticas. Polímeros fundidos ou soluções poliméricas possuem essas características e são materiais formados por moléculas complexas e com elevada massa molar. O escoamento desse tipo de material pode ser descrito utilizando-se as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento e uma equação constitutiva, necessária para o campo de tensões. Bird *et al* (1987) reúne em seu livro as características para esses tipos de fluidos e alguns experimentos, assim como boa parte dos diversos modelos constitutivos existentes (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

Uma dessas características é a chamada memória do fluido, que pode ser verificada quando se impõe uma taxa de deformação constante até que o regime permanente do fluxo seja atingido, e num determinado instante este fluxo é interrompido. Para um fluido viscoelástico será observado nesse momento que a tensão terá um determinado valor e diminuirá com o passar do tempo. Essa tensão interna remanescente se deve ao estiramento e alinhamento das cadeias poliméricas quando submetidas a uma força de deformação. Esse tempo necessário para que a tensão seja dissipada é definido como tempo de relaxação das moléculas.

A relação entre o tempo de relaxação das moléculas (λ) e o intervalo de tempo (t) de aplicação da tensão no material é conhecida como Número de Deborah (De), conforme **Equação 1**

$$De = \frac{\lambda}{t} \quad \text{Equação 1}$$

Esse número adimensional De exprime uma relação entre as forças elásticas e viscosas que operam no material, ou seja, saberemos o quão acentuado será o comportamento elástico (se $De \rightarrow \infty$) ou o viscoso (se $De \rightarrow 0$) (BRETAS; D'ÁVILA, 2005).

Outro fenômeno característico dos fluidos viscoelásticos é o efeito Weissenberg, cujo experimento consiste em agitar um fluido por um rotor imerso nele, em um recipiente. Quando realizado com um fluido newtoniano, este é lançado contra as paredes do recipiente por resultado do efeito centrífugo, criando uma depressão junto ao eixo do rotor. Quando realizado com fluido viscoelástico, este sobe junto ao eixo do rotor, cobrindo-o. Isto se deve ao fato de a rotação constante do rotor criar camadas concêntricas do fluido com aumento da velocidade linear, partindo-se do centro em direção à extremidade do recipiente. As moléculas então alinham e orientam-se na direção do fluxo destas camadas. Desta forma, as que estão mais afastadas do rotor sofrerão maior deformação do que as que estão mais próximas.

Consequentemente as moléculas que receberam maior deformação, ou seja, as que foram mais estiradas, armazenaram maior quantidade de energia elástica. Esta energia acumulada impõe à molécula que volte ao seu estado original, relaxado e enovelado. A única forma de isto acontecer é com o retorno da molécula da extremidade do recipiente em direção ao eixo do rotor, onde a força da tensão de cisalhamento é menor. Nesta região elas se aglomeram e sobem pelo eixo do rotor. Essa subida é provocada pela tensão normal que as impelem para cima, se opondo à força gravitacional. Esse experimento é chamado de “*rod-climbing*” e o número de Weissenberg (We) é representado pela seguinte **Equação 2**, onde λ é o tempo de relaxação das moléculas e $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação característica (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987; SCHRAMM, 2000).

$$We = \lambda \dot{\gamma} \quad \text{Equação 2}$$

Dois outros fenômenos característicos da grande maioria dos fluidos viscoelásticos referem-se ao efeito viscoso não-Newtoniano, classificando-os como fluidos pseudoplásticos ou dilatantes. São assim denominados pois possuem uma viscosidade dependente da taxa de cisalhamento. Os chamados pseudoplásticos apresentam uma elevada diminuição da viscosidade ao serem submetidos a uma alta taxa de cisalhamento. Neste caso, ocorre que os entrelaçamentos das moléculas do fluido polimérico no estado fundido são desfeitos, permitindo que elas alinham e orientem-se na direção do fluxo, fazendo com que escoreguem entre si com mais facilidade. Para a maioria desses fluidos que possuem este comportamento, o efeito do cisalhamento é reversível (apesar de demorar algum tempo), ou seja, eles recuperam o valor da sua viscosidade original.

Já os chamados dilatantes são aqueles que aumentam a viscosidade quando submetidos a uma elevada taxa de cisalhamento. Esse comportamento é encontrado em soluções altamente concentradas de partículas sólidas, como em suspensões e emulsões. Nelas, as partículas estão densamente empacotadas e o solubilizante adicionado é o necessário para somente preencher os vazios entre as partículas. À baixas taxas de cisalhamento ou em repouso o fluido se comporta como um líquido, pois o solubilizante lubrifica a superfície de cada partícula, possibilitando uma fácil mudança de posição entre elas no momento em que forças são aplicadas. Quando altas taxas de deformação são aplicadas, as partículas se separam provocando um aumento do volume total e parte do volume total do solubilizante diminui, tornando-o insuficiente para o preenchimento dos vazios entre as partículas, resultando no aumento da viscosidade (BRETAS; D'ÁVILA, 2005; SCHRAMM, 2000).

Outro fenômeno interessante dos fluidos viscoelásticos, que ocorre no processo de extrusão, e que corresponde ao fenômeno abordado neste trabalho, é o inchamento do extrudado, que será tratado na **seção 2.3**.

2.2 Extrusão

Extrusão é o nome dado ao processo pelo qual um material é forçado a passar através de um orifício, com o objetivo de se obter um produto com comprimento contínuo e seção transversal constante. Esse processo pode ser considerado, nos dias atuais, como um dos processos de transformação de termoplásticos e borrachas mais utilizados na indústria. É empregado na fabricação de tubos, revestimento de fios elétricos, chapas e perfis em geral, filmes plásticos, entre outros.

O equipamento que realiza esse processo chama-se extrusora e o tipo mais usado é a que consiste de uma rosca sem fim ou parafuso de Arquimedes de seção variável, cujos canais diminuem sua profundidade em direção à matriz. Esse parafuso rotaciona dentro de um cilindro oco estacionário transportando o material em seu interior, que é aquecido através de resistências elétricas com o objetivo de fundir o material nele inserido na forma de grãos, através de um funil de alimentação. A extrusora pode ser do tipo monorosca ou duplarosca. A **Figura 1** ilustra o esquema de uma extrusora monorosca, a qual processa em três zonas por

onde o material é transportado, que são: alimentação, compressão e dosagem. Na zona de alimentação, normalmente o material está no estado sólido e o fuso possui canais mais profundos e constantes. Essa região também possui um sistema de refrigeração destinado a evitar que ocorra prematuramente a fusão do material no interior do cilindro (TADMOR; GOGOS, 2006).

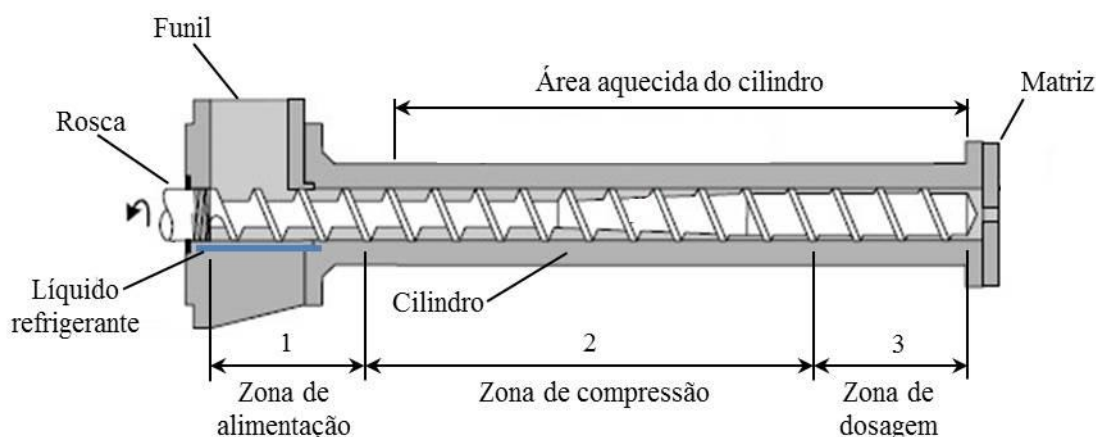


Figura 1: Esquema de extrusora monorrosca e suas zonas.

Fonte: Adaptado de *Principles of polymer processing* - Zehev Tadmor, Costas G. Gogos

A zona de compressão é a região onde acontece a maior parte da fusão do material. No decorrer do comprimento do fuso os canais ficam mais rasos gradativamente, ocasionando a compactação e geração da força de atrito entre os grãos e o cilindro da extrusora, devido à rotação do fuso. O material funde-se, pois recebe calor do atrito gerado e da área aquecida do cilindro e à medida que o material avança uma película de polímero é formada na parede interna do cilindro da extrusora. O material então chega quase completamente fundido na zona de dosagem encontrando nessa região uma alta taxa de cisalhamento devido à acentuada diminuição da profundidade do canal, ocasionando a completa fusão do material. Uma vez no estado fundido o material flui através da matriz da extrusora, devido à pressão gerada pela rosca, adquirindo o formato da seção transversal da mesma (BRETAS; D'ÁVILA, 2005; RAUWENDAAL, 2013).

Esse processo se dá após a fusão e homogeneização do material a uma determinada vazão, pressão e temperatura. Na extrusora, cada zona pode ser aquecida independentemente, sendo

normalmente utilizado na zona de alimentação a menor temperatura e a maior na zona de dosagem (CHARRIER, 1990).

A qualidade do perfil extrudado é diretamente influenciada pela temperatura de processamento. Baixas temperaturas dificultam e prejudicam a mistura e a compactação do material, enquanto que altas temperaturas afetam a estabilidade geométrica do perfil extrudado devido à diminuição da viscosidade do material (MANRICH, 2005). No caso de extrusão de materiais poliméricos, outro fator que influencia nas dimensões do perfil desejado é o inchamento do extrudado, característico dos materiais viscoelásticos.

2.3 O inchamento do extrudado

Entre os fenômenos provenientes dos materiais viscoelásticos, um dos mais conhecidos é o inchamento do extrudado, verificado na extrusão de polímeros fundidos ou massas poliméricas e caracterizado pelo aumento das dimensões da seção transversal do perfil extrudado ao sair da matriz e ocasionado pela recuperação elástica do material, conforme **Figura 2**.

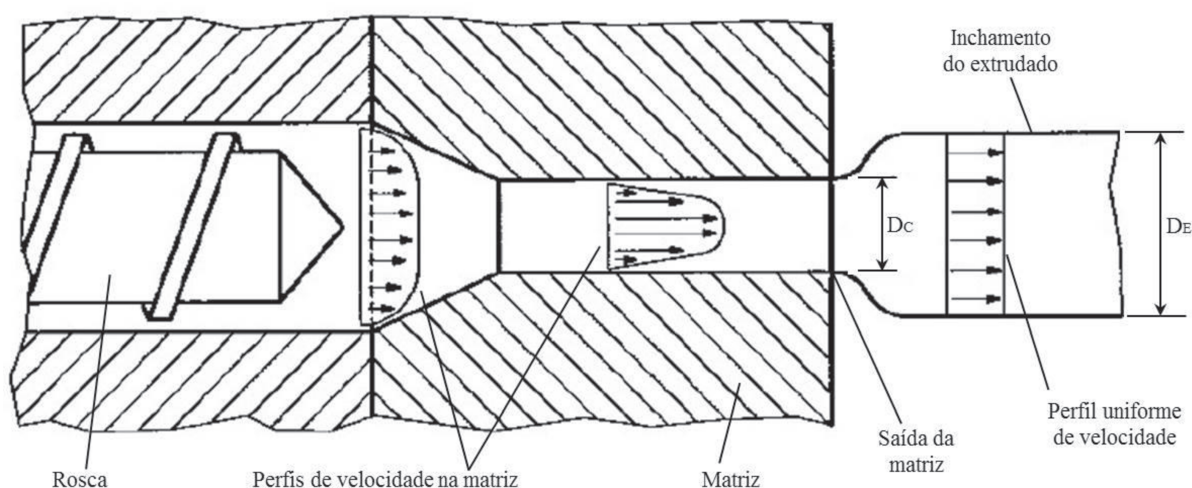


Figura 2: Esquema do fenômeno do inchamento do extrudado em uma extrusora com matriz circular.

Fonte: Adaptado de *A Practical Approach to Rheology and Rheometry* – Schramm, G.

As cadeias poliméricas, que se encontravam enoveladas antes de passar pela matriz, estendem e alinham-se na direção do escoamento nas paredes do interior da matriz, devido às forças elongacionais. Ao sair dessa, o movimento browniano que ocasiona o emaranhamento das cadeias poliméricas, faz com que elas enovelem-se novamente à medida em que a tensão exercida no polímero é reduzida. Isto faz com que ocorra um encolhimento longitudinal e uma expansão lateral. No caso de uma matriz circular, ou capilar, a análise quantitativa do inchamento do extrudado pode ser feita através da razão entre o diâmetro do extrudado (D_E) pelo diâmetro da matriz ou capilar (D_C). (BRETAS; D'ÁVILA, 2005; MORRISON, 2001).

A medição do inchamento do extrudado normalmente é feita próximo à matriz, no seu ponto máximo, pois o material ainda está plenamente no seu estado fundido (SCHRAMM, 2000). Outros fatores que influenciam no inchamento do extrudado são a temperatura, o comprimento L da matriz, o tempo de residência dentro da matriz e o diâmetro do reservatório (D_R) quando se trata da razão D_R/D_C (BRETAS; D'ÁVILA, 2005).

2.4 Simulação do inchamento do extrudado de fluidos viscoelásticos

Estudos relacionados à simulação de fluidos viscoelásticos vêm sendo desenvolvidos por diversos pesquisadores. Estes trabalhos abordam diferentes modelos constitutivos, métodos numéricos, métodos de discretização, etc. O caso do inchamento do extrudado é um escoamento que envolve duas fases, sendo uma fase o polímero e a outra fase o ar, pois se dá em superfície livre. Muitos são os fluidos estudados, desde simples polímeros até compostos de borracha.

Um trabalho cujos dados experimentais são bastante utilizados por outros pesquisadores é o de Quinzani *et al* (1994). Nele foi obtido, para uma solução polimérica concentrada cujos parâmetros reológicos foram completamente caracterizados, dados experimentais de um escoamento planar abrupto 4:1 (QUINZANI; ARMSTRONG; BROWN, 1994).

O trabalho de Azaiez *et al* (1996) buscou reproduzir os resultados experimentais obtidos por Quinzani *et al* (1994), através de simulação numérica utilizando os modelos constitutivos de Giesekus, FENE-P e PTT. Apesar de os resultados das simulações predizerem coerentemente as observações experimentais abordadas, pode-se notar a presença de algumas

diferenças de caráter quantitativo. Essas diferenças podem ser atribuídas ao fato de que os parâmetros adimensionais utilizados não foram provenientes de um bom ajuste de curvas, pois foi considerado apenas 1 modo de relaxação. Isto se deve também ao custo e às limitações computacionais existentes na época da realização do trabalho. O autor concorda que para melhores resultados quantitativos é necessário realizar simulações com mais modos de relaxação (AZAIEZ; GUÉNETTE; AÏT-KADI, 1996).

Baseando-se no trabalho acima citado, Yue Mu *et al* (2013) realizaram a simulação tridimensional do inchamento do extrudado utilizando os mesmos modelos constitutivos de Giesekus, FENE-P e PTT. A interface foi ajustada utilizando o método *streamface-streamline* de modo que não foi necessária a construção de uma malha externa. No problema foi considerada uma geometria circular de raio $R = 1\text{mm}$. Foi utilizado um quarto da geometria considerando condições de simetria. A malha foi refinada no centro do capilar e nele há a condição de não escorregamento até certo ponto, onde ocorre a transição para a condição de superfície livre, local onde se dá o inchamento do extrudado.

Para cada modelo foram utilizados os parâmetros de acordo com o trabalho de Azaiez *et al.* (1996). Os efeitos da força de tensão superficial e da aceleração da gravidade foram desconsiderados. Foi observado que o modelo constitutivo de FENE-P prevê um inchamento menor do que os modelos de Giesekus e PTT. Foi variada também a vazão e foi observado que o inchamento aumenta com o aumento da vazão. Para vazões baixas as previsões dos três modelos para o inchamento é muito parecida, enquanto que para vazões maiores o inchamento previsto pela equação de Giesekus é maior do que os outros. O raio do tubo também foi modificado e foi observado que a porcentagem do inchamento aumenta com a diminuição do raio, uma vez que o canal com o menor raio provoca uma maior deformação molecular das cadeias poliméricas, causando assim uma recuperação elástica mais acentuada (MU *et al.*, 2013).

Outro trabalho desenvolvido foi o de Ghoreishy, M.H.R. *et al* (2012), no qual foi realizada a simulação de um composto de borracha natural de alta viscosidade passando por uma extrusora monorosca. As simulações foram feitas considerando três modelos constitutivos diferentes: os modelos de fluido Newtoniano generalizado de lei das potências, o de Carreau e o modelo viscoelástico CEF (Criminale-Ericksen-Fillbey). Essas simulações foram realizadas utilizando um código próprio baseado em FORTRAN, considerando condições isotérmicas e em regime permanente. Os resultados das simulações foram

comparados com resultados experimentais realizados pelo próprio grupo. As equações foram solucionadas pelo método de elementos finitos de Galerkin enquanto que a técnica de “penalty” foi utilizada para gerenciar a incompressibilidade imposta pela equação da continuidade. Os parâmetros dos modelos constitutivos foram determinados por meio de tentativa e erro, tentando reduzir ao máximo o erro com relação a cada simulação feita, ou seja, as simulações foram utilizadas para aproximar o resultado simulado ao resultado experimental, encontrando assim os parâmetros dos modelos. A segunda diferença de tensões normais foi desconsiderada. Os resultados mostram que o modelo de Carreau forneceu resultados mais precisos do que o modelo do fluido Newtoniano generalizado. Mesmo assim os erros ainda foram altos, o que pode se dar pelo fato do modelo de Carreau não descrever os fenômenos de alongamento das cadeias poliméricas. Já o modelo CEF foi capaz de prever a vazão mássica e o perfil de velocidades com maior precisão. Isso se dá, devido à sua capacidade de prever a primeira diferença de tensões normais. Com relação ao perfil de velocidades, o modelo de CEF previu um perfil mais acentuado de velocidades enquanto o de lei das potências previu um perfil menor parabólico (GHOREISHY et al., 2012).

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1 Equações de Conservação

As equações que regem o escoamento laminar e isotérmico de um fluido são as equações que descrevem a conservação da massa e a conservação da quantidade de movimento (FOX; PRITCHARD; MCDONALD, 2009). A equação da conservação da massa é dada pela **Equação 3**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad \text{Equação 3}$$

a qual, por estar considerando fluidos incompressíveis onde o termo $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ é igual a zero devido a não variação da massa específica em relação ao tempo, assume a forma da **Equação 4**.

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{Equação 4}$$

A equação da conservação da quantidade de movimento é dada pela **Equação 5**

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad \text{Equação 5}$$

onde ρ é a densidade do fluido, t é o tempo, \mathbf{U} é o vetor velocidade, p é a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão e \mathbf{g} é o vetor aceleração gravitacional. Para fluidos newtonianos incompressíveis, o termo referente à tensão ($\boldsymbol{\tau}$) pode ser substituído pela **Equação 6**.

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta \mathbf{S} \quad \text{Equação 6}$$

onde η representa a viscosidade newtoniana e \mathbf{S} representa o tensor taxa de deformação, que devido ser um tensor simétrico pode ser expresso pela **Equação 7**.

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{U} + [\nabla \mathbf{U}]^T) \quad \text{Equação 7}$$

Entretanto, para os fluidos viscoelásticos, o termo referente à tensão ($\boldsymbol{\tau}$) é descrito pelo que é denominado de equação ou modelo constitutivo. O modelo constitutivo é uma equação que faz a relação entre tensão e taxa de deformação, que é não-linear para os fluidos viscoelásticos, fornecendo uma solução para a tensão ($\boldsymbol{\tau}$) para um dado campo de escoamento. Esse modelo é consideravelmente mais complexo quando comparado à equação da tensão para fluidos newtonianos (**Equação 6**) e normalmente é expresso na forma de equações diferenciais.

3.2 Modelos Constitutivos Viscoelásticos

Considerando-se fluidos viscoelásticos e incompressíveis, a **Equação 4** não sofre alteração, porém a equação da conservação da quantidade de movimento (**Equação 5**) tem o termo que corresponde à tensão, reescrito conforme a **Equação 8**:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s \quad \text{Equação 8}$$

onde $\boldsymbol{\tau}_p$ representa a contribuição do polímero e $\boldsymbol{\tau}_s$ a contribuição do solvente para o tensor das tensões. Para soluções poliméricas, onde há a presença de solvente, o termo referente à tensão é representado pela **Equação 8**. O solvente, por sua vez, pode ser considerado como um fluido newtoniano e representado pela **Equação 9**, onde η_s representa a viscosidade do solvente. (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987)

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\eta_s \mathbf{S} \quad \text{Equação 9}$$

Neste trabalho, utilizou-se a forma para polímeros fundidos, pois os materiais analisados dispensam o uso de solvente. Desta maneira, para polímeros fundidos nos quais não há a presença de solvente, o termo referente a tensão (τ) é dado somente pela contribuição do polímero (τ_p), conforme **Equação 10**.

$$\tau = \tau_p \quad \text{Equação 10}$$

No entanto, o valor de τ_p advém de modelos constitutivos desenvolvidos com o objetivo de descrever o comportamento reológico de polímeros. Os modelos constitutivos não-lineares utilizados foram os modelos de Giesekus e Phan-Thien-Tanner (PTT). Esses foram escolhidos por serem modelos que descrevem comportamentos característicos de fluidos viscoelásticos, como a pseudoplasticidade, o inchamento do extrudado e efeitos de tensões normais em cisalhamento.

O modelo constitutivo de Giesekus, utilizado para descrever o comportamento viscoelástico de polímeros fundidos, é dado pela **Equação 11** (GIESEKUS, 1982).

$$\tau_p + \lambda \dot{\tau}_p + \alpha \frac{\lambda}{\eta_0} (\tau_p \cdot \tau_p) = 2\eta_0 S \quad \text{Equação 11}$$

onde τ_p é o tensor tensão do polímero, λ é o tempo de relaxação, η_0 é a viscosidade à taxa de deformação nula e α é um fator adimensional de mobilidade relacionado ao arrasto hidrodinâmico anisotrópico das moléculas do polímero. A **Equação 11** pode ser estendida para um caso geral, considerando que a tensão total τ_p é igual à soma de N tensões τ_{p_K} referente aos parâmetros de cada modo λ_K , α_K e η_{0_K} . Assim, a tensão τ_p é expressa pela **Equação 12**,

$$\tau_p = \sum_{K=1}^N \tau_{p_K} \quad \text{Equação 12}$$

onde,

$$\boldsymbol{\tau}_{p_K} + \lambda_K \check{\boldsymbol{\tau}}_{p_K} + \alpha_K \frac{\lambda_K}{\eta_{0K}} (\boldsymbol{\tau}_{p_K} \cdot \boldsymbol{\tau}_{p_K}) = 2\eta_{0K} \boldsymbol{S} \quad \text{Equação 13}$$

Na **Equação 13**, $\check{\boldsymbol{\tau}}_{p_K}$ é a derivada convectiva superior no tempo (**Equação 14**) do tensor $\boldsymbol{\tau}_{p_K}$ (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987)

$$\check{\boldsymbol{\tau}}_{p_K} = \frac{D\boldsymbol{\tau}_{p_K}}{Dt} - [\nabla \boldsymbol{U}^T \cdot \boldsymbol{\tau}_{p_K}] - [\boldsymbol{\tau}_{p_K} \cdot \nabla \boldsymbol{U}] \quad \text{Equação 14}$$

sendo que $D\boldsymbol{\tau}_{p_K}/Dt$ é a derivada material dada pela **Equação 15** e \boldsymbol{S} é o tensor taxa de deformação exposto pela **Equação 7**.

$$\frac{D\boldsymbol{\tau}_{p_K}}{Dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_{p_K}}{\partial t} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_{p_K} \quad \text{Equação 15}$$

Esse modelo constitutivo, que é muito utilizado na literatura, possui termos não-lineares dados pelos produtos dos tensores das tensões. Nesse modelo, quando os parâmetros $\alpha = \lambda = 0$, tem-se a equação constitutiva de um fluido Newtoniano com viscosidade $\eta = \eta_0$. No caso em que $\alpha = 0$, o modelo se reduz ao modelo de Maxwell Convectivo Superior (UCM), que não prediz o comportamento viscoso não-Newtoniano. Assim, o arraste hidrodinâmico anisotrópico está associado à orientação das macromoléculas devido às tensões do escoamento, resultando no comportamento não-Newtoniano pseudoplástico característico do escoamento de sistemas poliméricos. Para casos onde $0 \leq \alpha_K \leq 0,5$, previsões fisicamente coerentes foram observadas (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987; SCHLEINIGER; WEINACHT, 1991).

O modelo PTT (Phan-Thien and Tanner), proveniente da teoria de rede de polímeros fundidos e soluções concentradas, é dado pela **Equação 16**: (THIEN; TANNER, 1977)

$$\left(1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta_0} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p)\right) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \hat{\boldsymbol{\tau}}_p = 2\eta_0 \boldsymbol{S} \quad \text{Equação 16}$$

onde $\boldsymbol{\tau}_p$ é o tensor tensão do polímero, λ é o tempo de relaxação, η_0 é a viscosidade à taxa de deformação nula e \boldsymbol{S} , expresso pela **Equação 7**, é o tensor taxa de deformação. A **Equação 16** pode ser estendida para um caso geral, considerando que a tensão total $\boldsymbol{\tau}_p$ é igual à soma de N tensões $\boldsymbol{\tau}_{p_K}$ referente aos parâmetros de cada modo λ_K , ε_K e η_{0_K} . Assim, a tensão $\boldsymbol{\tau}_p$ que é expressa conforme **Equação 12**, tem o termo $\boldsymbol{\tau}_{p_K}$ expresso para o modelo PTT, conforme **Equação 17**.

$$\left(1 + \frac{\varepsilon_K \lambda_K}{\eta_{0_K}} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_{p_K})\right) \boldsymbol{\tau}_{p_K} + \lambda_K \hat{\boldsymbol{\tau}}_{p_K} = 2\eta_{0_K} \boldsymbol{S} \quad \text{Equação 17}$$

Na **Equação 17**, o termo não-linear que contém $\text{tr}(\boldsymbol{\tau}_{p_K})$ considera a energia elástica da rede e $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{p_K}$ é a derivada de Gordon-Schowalter expressa pela **Equação 18**:

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{p_K} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_{p_K}}{\partial t} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_{p_K} - (\nabla \boldsymbol{U} - \xi_K \boldsymbol{S}) \cdot \boldsymbol{\tau}_{p_K} - \boldsymbol{\tau}_{p_K} \cdot (\nabla \boldsymbol{U} - \xi_K \boldsymbol{S})^T \quad \text{Equação 18}$$

No modelo acima, o parâmetro ε_K está relacionado com a viscosidade extensional e o parâmetro ξ_K relaciona a segunda diferença de tensões normais (MU et al., 2013), que por ser um efeito muito pequeno em comparação aos efeitos de cisalhamento e aos da primeira diferença de tensões normais, usualmente é considerado com o valor zero. Assim, a **Equação 18** foi simplificada e expressa pela **Equação 19**:

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{p_K} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_{p_K}}{\partial t} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_{p_K} - \nabla \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{\tau}_{p_K} - \boldsymbol{\tau}_{p_K} \cdot (\nabla \boldsymbol{U})^T \quad \text{Equação 19}$$

4. OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS DOS MODELOS

4.1 Funções Materiais

Os modelos constitutivos apresentados podem ser aplicados para qualquer tipo de escoamento. No caso de escoamentos simples, encontrados em medições de propriedades reológicas, expressões analíticas desses modelos para as funções materiais podem ser determinadas e aplicadas para encontrar as constantes desses modelos. No caso de um experimento de cisalhamento em regime oscilatório de pequena amplitude (*SAOS*), define-se o módulo complexo $|G^*|$ pela **Equação 20**: (MORRISON, 2001)

$$|G^*| = (G'^2 + G''^2)^{0,5} \quad \text{Equação 20}$$

No caso do modelo de Maxwell generalizado as funções materiais G' e G'' , que são respectivamente o módulo de armazenamento da componente elástica e módulo de armazenamento da componente viscosa, são expressas pelas **Equação 21** e **Equação 22** na sua forma geral: (MORRISON, 2001)

$$G'(\omega) = \frac{G \lambda^2 \omega^2}{1 + \lambda^2 \omega^2} \quad \text{Equação 21}$$

$$G''(\omega) = \frac{G \lambda \omega}{1 + \lambda^2 \omega^2} \quad \text{Equação 22}$$

Para mais modos de relaxação, as equações para o cálculo de G' e G'' assumem a forma das **Equação 23** e **Equação 24**, sendo N a quantidade de modos de relaxação e $1 \leq K \leq N$.

$$G'(\omega) = \sum_{k=1}^N \frac{G_k \lambda_k^2 \omega^2}{1 + \lambda_k^2 \omega^2} \quad \text{Equação 23}$$

$$G''(\omega) = \sum_{k=1}^N \frac{G_k \lambda_k \omega}{1 + \lambda_k^2 \omega^2} \quad \text{Equação 24}$$

onde G_K é o módulo de relaxação, λ_K é o tempo de relaxação e ω é a frequência angular.

A viscosidade newtoniana de cada modo pode ser calculada utilizando a **Equação 25**.

$$\eta_{0K} = G_K \lambda_K \quad \text{Equação 25}$$

A viscosidade complexa de cada modo calcula-se com a **Equação 26**:

$$|\eta^*|_K = (\eta'_{K^2} + \eta''_{K^2})^{0,5} \quad \text{Equação 26}$$

Para utilizar as **Equação 25** e **Equação 26** para mais modos de relaxação, foram reescritas na forma das **Equação 27** e **Equação 28**, sendo N a quantidade de modos de relaxação e $1 \leq K \leq N$.

$$\eta_0 = \sum_{k=1}^N \eta_{0K} \quad \text{Equação 27}$$

$$|\eta^*| = \sum_{k=1}^N |\eta^*|_K \quad \text{Equação 28}$$

onde a componente elástica da viscosidade η' e a componente viscosa da viscosidade η'' são dadas, na sua forma geral, pelas **Equação 29** e **Equação 30** (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987)

$$\frac{\eta'}{\eta_0} = \frac{1 + \lambda_1 \lambda_2 \omega^2}{1 + \lambda_1^2 \omega^2} \quad \text{Equação 29}$$

$$\frac{\eta''}{\eta_0 \omega} = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)}{1 + \lambda_1^2 \omega^2} \quad \text{Equação 30}$$

nas quais λ_1 representa o tempo de relaxação, λ_2 o tempo de retardação e ω a frequência angular. Para mais modos de relaxação, foi necessário fazer o somatório para estas duas variáveis, ou seja, $\eta' = \sum_{k=1}^N \eta'_k$ e $\eta'' = \sum_{k=1}^N \eta''_k$ sendo N a quantidade de modos de relaxação e $1 \leq K \leq N$. Assim, as **Equação 29** e **Equação 30** são reescritas conforme as **Equação 31** e **Equação 32**.

$$\frac{\eta'_k}{\eta_{0k}} = \frac{1 + \lambda_{1k} \lambda_2 \omega^2}{1 + \lambda_{1k}^2 \omega^2} \quad \text{Equação 31}$$

$$\frac{\eta''_k}{\eta_{0k} \omega} = \frac{(\lambda_{1k} - \lambda_2)}{1 + \lambda_{1k}^2 \omega^2} \quad \text{Equação 32}$$

As funções materiais de um escoamento em regime permanente para o modelo de Giesekus, para obtenção do parâmetro adimensional α , são representadas pelas **Equação 33**, **Equação 34** e **Equação 35** em suas formas gerais, como seguem:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} + \left(1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right) \frac{(1 - f)^2}{1 + (1 - 2\alpha)f} \quad \text{Equação 33}$$

$$f = \frac{1 - x}{1 + (1 - 2\alpha)x} \quad \text{Equação 34}$$

$$x^2 = \frac{(1 + 16\alpha(1 - \alpha)(\lambda_1 \dot{\gamma})^2)^{1/2} - 1}{8\alpha(1 - \alpha)(\lambda_1 \dot{\gamma})^2} \quad \text{Equação 35}$$

onde $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento. Para o caso multimodo as **Equação 33**, **Equação 34** e **Equação 35** são reescritas conforme **Equação 36**, **Equação 37** e **Equação 38**. (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987)

$$\frac{\eta_k}{\eta_{0k}} = \frac{\lambda_2}{\lambda_{1k}} + \left(1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_{1k}}\right) \frac{(1-f)^2}{1 + (1-2\alpha_k)f} \quad \text{Equação 36}$$

$$f = \frac{1-x}{1 + (1-2\alpha_k)x} \quad \text{Equação 37}$$

$$x^2 = \frac{\left(1 + 16\alpha_k(1-\alpha_k)(\lambda_{1k}\dot{\gamma})^2\right)^{1/2} - 1}{8\alpha_k(1-\alpha_k)(\lambda_{1k}\dot{\gamma})^2} \quad \text{Equação 38}$$

Para o modelo PTT a função material de um escoamento em regime permanente, para obtenção do parâmetro adimensional ε , é representado pela **Equação 39** na sua forma geral (BAIRD; COLLIAS, 1998).

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \varepsilon(2 - \varepsilon)(\lambda\dot{\gamma})^2} \quad \text{Equação 39}$$

Considerando o caso multimodo, a **Equação 39** é reescrita conforme **Equação 40**, sendo N a quantidade de modos de relaxação e $1 \leq K \leq N$.

$$\eta = \sum_{k=1}^N \frac{\eta_{0k}}{1 + \varepsilon_k(2 - \varepsilon_k)(\lambda_k\dot{\gamma})^2} \quad \text{Equação 40}$$

As **Equação 20** a **Equação 40** foram utilizadas para a determinação dos parâmetros do modelo de Giesekus e do modelo de PTT de um composto de borracha a partir dos resultados de reometria em regime oscilatório. O procedimento para a determinação dos parâmetros está descrito na **seção 4.2**, que trata das medições reológicas e determinação dos parâmetros dos modelos a partir dos dados experimentais de compostos de borracha.

4.2 Roteiro para obtenção dos parâmetros

Para o cálculo dos parâmetros não-lineares para os modelos constitutivos de Giesekus e PTT, foram utilizados os resultados experimentais de compostos de borracha. Esses resultados foram obtidos no regime oscilatório em pequena amplitude (*SAOS – Small Amplitude Oscillatory Shear flow*), medidos com o reômetro *RPA (Rubber Process Analyser)*, na empresa Pirelli Pneus em Santo André - SP. A geometria utilizada foi bicônica com diâmetro de 41,26mm e ângulo de 7,169°. O equipamento possui uma faixa de frequência de 0,0016 a 33Hz, deformação de 0,07% a 1255% e temperatura de 60°C a 230°C. No experimento a faixa de frequência utilizada foi de 0,1 a 30Hz, com deformação de 1% a uma temperatura de 100°C. Esse nível de deformação foi escolhido por estar dentro do regime de viscoelasticidade linear. Os dados obtidos experimentalmente foram G' , G'' e $|\eta^*|$.

Para obter os parâmetros do modelo de Giesekus e PTT, o roteiro a seguir foi estabelecido, começando-se pelo cálculo do Módulo Complexo $|G^*|$, definido pela **Equação 20**. Utilizando-se o valor de $|G^*|$ e as **Equação 41** e **Equação 42**, que são análogas às **Equação 21** e **Equação 22** (MACOSKO, 1994; MORRISON, 2001), substituídas na **Equação 20**, juntamente com a frequência usada para os dados experimentais transformada em frequência angular (ω), faz-se o ajuste de curva para obter os valores de a_k e t_k , variáveis das **Equação 41** e **Equação 42**.

$$G'(\omega) = \sum_{k=1}^N \frac{\omega^2 \exp[a_k + 2t_k]}{[1 + \omega^2 \exp(2t_k)]} \quad \text{Equação 41}$$

$$G''(\omega) = \sum_{k=1}^N \frac{\omega \exp[a_k + t_k]}{[1 + \omega^2 \exp(2t_k)]} \quad \text{Equação 42}$$

Devido ao ajuste de curva ser sensível à escala dos parâmetros, é desejável que todos eles tenham a mesma ordem de grandeza. Por este motivo o cálculo acima foi realizado através do artifício matemático de transformá-los em escala logarítmica, pois é numericamente mais adequado para trabalhar com estes ajustes. A combinação destas equações foram inseridas no *software* MATLAB, do qual utilizou-se a ferramenta *CFTOOL*

(*Curve Fitting Toolbox*) que possibilita fazer uma regressão não-linear pelo método dos mínimos quadrados, para realizar o ajuste da curva com os dados experimentais.

Esses valores de a_k e t_k são substituídos nas **Equação 43** e **Equação 44** (MACOSKO, 1994), fornecendo os valores do Módulo (G_k) e do Tempo de Relaxação (λ_k) para o Espectro de Relaxação referente ao composto de borracha em análise.

$$a_k = \ln G_k \quad \text{Equação 43}$$

$$t_k = \ln \lambda_k \quad \text{Equação 44}$$

Em posse de G_k e λ_k para os k-modos de relaxação estimados para o composto de borracha analisado, calculou-se a viscosidade Newtoniana η_{0k} , obtida através da **Equação 25** para cada modo encontrado.

Para o cálculo do parâmetro do modelo PTT utilizou-se a **Equação 40**, substituindo os resultados η_{0k} , λ_k e os valores para ω extrapolados (BAIRD; COLLIAS, 1998). Para o valor da viscosidade (η), assumiu-se que o composto de borracha segue a regra de Cox-Merz, a qual diz que a $\eta \approx |\eta^*|$ e que a taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) pode ser substituída pela frequência angular (ω) (COX; MERZ, 1958). Foi utilizado então a η^* obtida experimentalmente no lugar da η . Este cálculo fornece o resultado para o parâmetro ε do modelo PTT.

Para o cálculo do parâmetro do modelo de Giesekus foi necessário utilizar os resultados η_{0k} , λ_k e os valores para ω extrapolados, para obter os valores da viscosidade da componente elástica η'_k e da viscosidade da componente viscosa η''_k , através da **Equação 31** e da **Equação 32** respectivamente, considerando que o tempo de retardação $\lambda_2 = 0$. Com η'_k e η''_k obtêm-se a $|\eta^*|_k$ para todos os modos e os valores extrapolados da ω conforme **Equação 26**. A soma de todas as $|\eta^*|_k$ através da **Equação 28** chamaremos de $|\eta^*|_{ajustada}$. Assumindo-se que este composto de borracha segue a regra de Cox-Merz, assumiu-se que $\eta \approx |\eta^*|$ e que a taxa de cisalhamento ($\dot{\gamma}$) pode ser substituída pela frequência angular (ω) (COX; MERZ, 1958). Substituiu-se os valores encontrados para η_k , η_{0k} , λ_k e os valores para ω extrapolados nas **Equação 36**, **Equação 37** e **Equação 38** (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987), considerando que o tempo de retardação $\lambda_2 = 0$ e obtêm-se o valor do parâmetro adimensional α_k para cada modo do espectro de relaxação, utilizando para este ajuste a ferramenta *CFTOOL* do *software* MATLAB.

5. SIMULAÇÃO

5.1 Método VOF

O estudo da simulação do inchamento do extrudado, por se tratar de um escoamento bifásico, necessita que o *software* faça uso de uma metodologia de captura da interface entre os fluidos. O método *VOF* (*Volume of Fluid*), desenvolvido por Hirt e Nichols (1981), é uma técnica de modelamento numérico de superfícies livres para malhas computacionais bidimensionais e tridimensionais para descrição de um escoamento bifásico. Esse método consiste na resolução de uma função fracionária que determinará se um volume de controle está preenchido com um fluido A ou B ou simultaneamente por ambos. Deste modo, pode-se definir o volume de fluido numa célula (C_{VOF}) fazendo $C_{VOF} = \delta V_{cel}$, onde V_{cel} representa o volume da célula e δ a fração do fluido contido nesta célula (HIRT; NICHOLS, 1981).

Uma célula plenamente preenchida pelo fluido A exibe $\delta = 0$ ou se preenchida pelo fluido B terá $\delta = 1$. O delineamento da interface entre os dois fluidos é obtido através de um valor intermediário entre 0 e 1, que satisfaça a **Equação 45**

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} + \nabla \cdot (\delta \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\delta(1 - \delta) \mathbf{U}_r) = 0 \quad \text{Equação 45}$$

na qual \mathbf{U}_r denota o vetor de velocidade relativa referente aos dois fluidos (RUSCHE, 2002).

Na **Equação 45** o último termo atua somente na zona de interface dos fluidos através do termo $\delta(1 - \delta)$ sem influenciar o resultado calculado fora dessa zona. O método *VOF* possibilita que as mesmas equações sejam solucionadas para os dois fluidos simultaneamente, baseando-se apenas na quantidade de um dos fluidos.

Ainda é necessário que, neste escoamento bifásico, as propriedades físicas de cada fluido sejam consideradas. Isto se dá através da correspondência entre a fração volumétrica de cada fluido com suas respectivas propriedades físicas em cada volume de controle do domínio. Matematicamente isto é obtido, considerando uma propriedade genérica ϕ , pela **Equação 46**.

$$\varphi = \delta \varphi_{fluidoA} + (1 - \delta) \varphi_{fluidoB} \quad \text{Equação 46}$$

Em casos bifásicos também é necessário que um termo relacionado à tensão superficial na interface entre os dois fluidos seja considerado na equação da conservação da quantidade de movimento, para que os valores de velocidade e pressão nos fluidos em análise sejam calculados.

Contudo, nesta metodologia de captura da interface entre fluidos, esta interface não é estritamente enfatizada e como consequência não se define com exatidão sua forma e localização. Para tratar este problema, Brackbill *et al* (1992) criou seu modelo *CSF* (*Continuum Surface Force*), que representa os efeitos de tensão superficial como uma força (F_σ) de valor constante agindo na região de interface entre os dois fluidos. Este modelo é dado pela **Equação 47** (BRACKBILL; KOTHE; ZEMACH, 1992)

$$F_\sigma = \sigma k \nabla \delta \quad \text{Equação 47}$$

na qual σ representa o valor da tensão superficial, δ é a fração do fluido contido na célula e k refere-se à curvatura da interface, dado pela **Equação 48**.

$$k = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \delta}{|\nabla \delta|} \right) \quad \text{Equação 48}$$

O *software* OpenFOAM contém um código que simula escoamentos bifásicos baseado no método *VOF*, onde a equação de transporte para uma função fracionária que representa a fração volumétrica de uma das fases dentro do volume de controle é resolvida simultaneamente com as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento.

5.2 Equipamento e o programa OpenFOAM

As simulações foram realizadas utilizando um computador do tipo *desktop*, com processador Intel I7 com 4GHz de frequência, placa mãe Gigabyte GA-H97M-D3H-64bits,

memória RAM DDR3-16Gb-1600MHz, disco rígido de 2Tb-Sata 3-7200rpm, placa de vídeo GTX960-2Gb, fonte EVGA 750W e dissipador de calor à água Corsair Hydro-Series H55, com o sistema operacional Linux-Ubuntu 15.10.

O programa OpenFOAM é proveniente do programa FOAM (*Field Operation and Manipulation*) criado por Henry Weller e Hrvoje Jasak em 1993, que teve seu código liberado no ano 2004, tornando-se de domínio público através da licença GLP (Gnu Public License). Ele é um *software* escrito em C++ e que utiliza o método dos volumes finitos, destinado a solucionar complexos problemas de engenharia que envolvam operações e resoluções de campos tensoriais (FAVERO, 2009).

Do *software* OpenFOAM foi utilizado um *solver* viscoelástico para escoamentos multifásicos, desenvolvido por Favero (2009). Outro trabalho realizado utilizando este *solver* é o de Lima (2013) que pesquisou e realizou simulações que envolviam o escoamento eletrohidrodinâmico de fluidos newtonianos e viscoelásticos. Nele é analisado a deformação de uma gota newtoniana provocada por tensões elétricas exercidas na superfície e também a formação de um jato newtoniano na saída de um tubo capilar (LIMA, 2013; LIMA; D'AVILA, 2014).

5.3 Métodos Numéricos utilizados na resolução de problemas de fluido-dinâmica computacional

Como apresentado anteriormente, as equações que representam matematicamente os fluidos viscoelásticos consistem na equação da conservação da massa (**Equação 4**), na equação da conservação da quantidade de movimento (**Equação 5**) e nas equações constitutivas. Portanto, um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares precisa ser solucionado. Todavia, a obtenção da solução analítica para tais equações costuma ser em geral, inviável ou até impossível, fazendo-se necessário a utilização de métodos numéricos para que uma solução aproximada destas equações seja obtida.

Dos métodos numéricos, os que tradicionalmente são mais utilizados para a solução de equações diferenciais são os métodos de diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos. Eles consistem na discretização das equações diferenciais parciais, aproximando-as

através de um sistema de equações algébricas para um determinado número de pontos discretizados no espaço. Para a mecânica dos fluidos computacional, o método dos volumes finitos é o mais utilizado em virtude de seu bom desempenho computacional, se comparado aos demais. Ele exige um menor uso de memória, produz soluções em menos tempo computacional e possui boa estabilidade numérica (XUE; PHAN-THIEN; TANNER, 1995).

O método dos volumes finitos consiste na obtenção da aproximação numérica de uma equação diferencial parcial, partindo-se da integração desta equação no volume de controle elementar. Após a execução da integração de todos os termos da equação para todos os volumes de controle do domínio, obtêm-se como resultado a equação discretizada para um conjunto de pontos de uma malha computacional, definindo assim um sistema de equações algébricas a ser resolvido (PATANKAR, 1980).

Todavia, para que a integração seja realizada, faz-se necessário que uma função que descreva o comportamento do fluxo das variáveis ao longo da superfície do volume de controle elementar seja escolhida. Esta função, conhecida como função de interpolação, é importante para proporcionar mais exatidão na aproximação dos valores das variáveis no volume de controle (MALISKA, 2004). Neste trabalho, foram utilizados como método de interpolação o *upwind*, que é um método de 1ª ordem e como método de solução dos sistemas lineares, o de Gauss-Seidel, pois foram os que apresentaram melhores resultados de convergência para as simulações.

5.4 Descrição do Problema

Inicialmente, foram simulados casos publicados na literatura, a fim de avaliar os resultados obtidos pelo OpenFOAM, visando assegurar a validade dos resultados. O artigo de MU *et al.*, (2013), aborda a extrusão de um composto viscoelástico em uma geometria de um capilar, onde foi estudado o fenômeno do inchamento do extrudado para diferentes vazões. Assim, este artigo foi utilizado com o intuito de realizar avaliações consistentes de refinamento de malha e estabilidade numérica das simulações, tendo como principal objetivo validar as simulações realizadas no OpenFOAM. Foram testados os modelos viscoelásticos de Giesekus e PTT (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

O caso simulado consistiu em uma geometria axissimétrica, com um eixo de simetria passando pelo centro do capilar. Esse possui uma entrada com diâmetro $A=4\text{mm}$, comprimento $B=2\text{mm}$, raio constante $R=1\text{mm}$ e comprimento $L=10\text{mm}$. Na entrada do capilar foi aplicada uma velocidade constante U para obter uma vazão constante na saída. A região onde ocorre o escoamento livre possui as dimensões $H=15\text{mm}$ e $C=20\text{mm}$ conforme **Figura 3**.

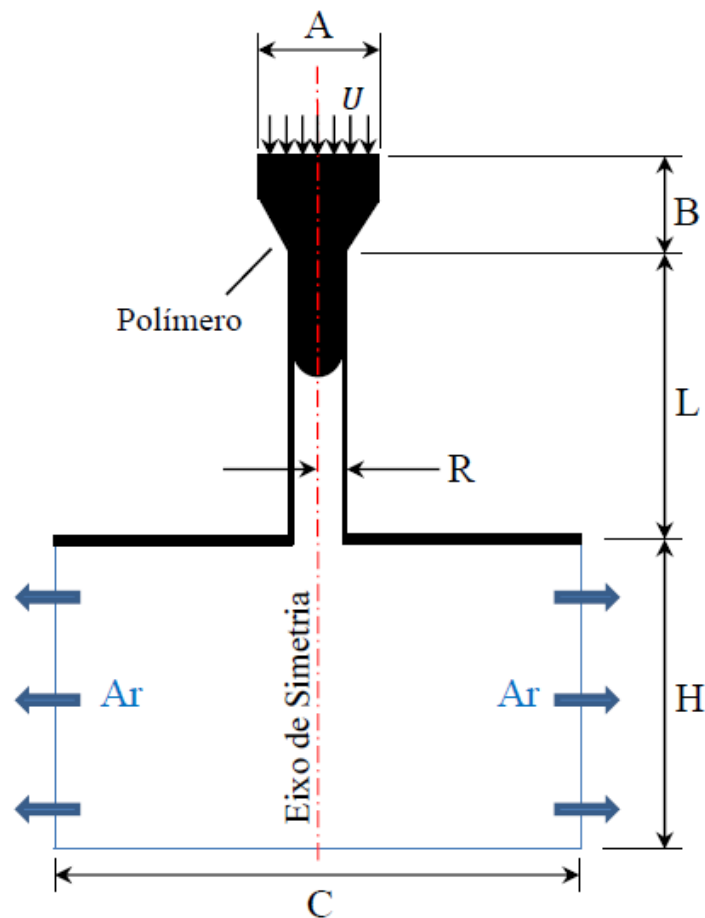


Figura 3. Geometria do capilar

A viscosidade utilizada para o ar foi $\eta_{ar} = 1,48 \times 10^{-5} \text{Pa.s}$ e a densidade $\rho_{ar} = 1 \text{Kg/m}^3$. Para o polímero a densidade foi $\rho_p = 803,87 \text{Kg/m}^3$ e os demais parâmetros estão relacionados na **Tabela 1**. A aceleração da gravidade foi $g = 0 \text{m/s}^2$ (MU et al., 2013; QUINZANI; ARMSTRONG; BROWN, 1994).

Tabela 1: Parâmetros do material utilizado nas simulações.

Modelo	Parâmetro Não Linear	λ (s)	η_p (Pa.s)	η_s (Pa.s)
Giesekus	$\alpha = 0,15$	0,03	1,422	0,002
PTT	$\varepsilon = 0,25$, $\xi = 0$	0,03	1,422	0,002

As condições de contorno na região do capilar foram definidas com a condição de não escorregamento nas paredes, ou seja, velocidade zero e para a fronteira superior a condição de entrada uniforme de fluido para o escoamento. Para a fronteira inferior do capilar foi definido a condição de saída. Para a região do escoamento livre as fronteiras do topo foram definidas como parede e as suas laterais e o fundo definidas como abertas, de maneira que o ar pudesse fluir para fora e para dentro do domínio. Por ser uma malha axissimétrica, para o eixo de revolução da geometria foi definida a condição *empty*. Esta condição é aplicada em fronteiras cuja normal está alinhada à direção geométrica que não constitui solução (OPENFOAM_USERGUIDE, 2008).

Um teste de convergência de malha com o intuito de se obter resultados concisos e com um custo computacional menor foi realizado. O refinamento da malha concentrou-se na região da saída do capilar, por ser a região do domínio onde os resultados de inchamento do extrudado serão analisados.

5.5 Casos com os compostos de borracha

As simulações dos casos com compostos de borracha foram realizadas utilizando-se a mesma geometria e mesma malha selecionada para o caso apresentado na **seção 5.4**, e consequentemente as mesmas condições de contorno. Novamente, o refinamento da malha concentrou-se na região da saída do capilar, por ser a região do domínio onde efetivamente ocorre o inchamento do extrudado. Outras variáveis como ρ , λ , η_p e os resultados da obtenção dos parâmetros e das simulações para os modelos constitutivos de Giesekus e PTT estão descritos na **Tabela 4** e na **seção 6.4.2**.

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1 Análise de Convergência de Malha

Para a análise de convergência de malha e estimativa de erro foi utilizado o método GCI (*Grid Convergence Index*) (CELIK et al., 2008), que consiste em quantificar a incerteza de malhas menos refinadas comparadas com as mais refinadas. O método foi feito considerando três malhas diferentes com razão de crescimento r conhecida. Os parâmetros do método GCI obtidos estão relacionados na **Tabela 2**, onde N_k é o número de células de cada malha utilizada na análise, r_{yk} é a razão de crescimento entre uma malha grosseira e outra mais refinada, \emptyset_k é a variável importante para o objetivo do estudo da simulação, e_a^{21} é o erro relativo e GCI_{fine}^{21} é o grau de incerteza para a solução da malha mais refinada.

Tabela 2: Características das malhas para o caso da literatura.

N_1, N_2, N_3 (nº células)	19627, 10584, 3036
r_{21}	1,3618
r_{32}	1,8671
\emptyset_1 (mm)	1,5298
\emptyset_2 (mm)	1,7382
\emptyset_3 (mm)	1,9762
e_a^{21} (%)	13,62
GCI_{fine}^{21} (%)	1,47

A escolha da malha mais apropriada se deu baseado no resultado do grau de incerteza ($GCI_{fine}^{21}=1,47\%$) para a malha 1 que, mesmo sendo a malha mais refinada, apresentou um custo computacional aceitável. A malha 1 escolhida, é representada pela **Figura 4**, na qual pode-se observar o refinamento concentrado na região do capilar, por ser a região de maior importância do domínio onde ocorre o fenômeno estudado. Todos os estudos foram realizados utilizando-se a malha acima selecionada.

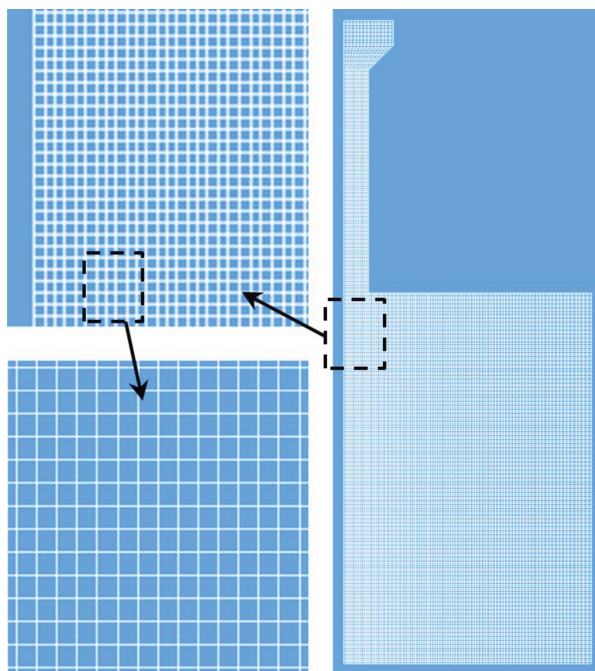


Figura 4. Malha 1 selecionada para representar a geometria do capilar.

6.2 Validação Numérica

Para se certificar da efetividade do *solver* ViscoelasticInterFoam, uma validação numérica foi realizada. Utilizando-se os modelos de Giesekus e PTT com as respectivas vazões Q , fez-se a comparação do raio do inchamento do extrudado, entre os resultados obtidos nas simulações e no trabalho de MU *et al.*, 2013.

As **Figura 5** e **Figura 6** mostram os resultados obtidos para os modelos de Giesekus e PTT respectivamente. Pode-se observar que o inchamento do extrudado aumenta com o aumento da vazão. Esse resultado é esperado, devido ao aumento das tensões de cisalhamento no capilar com o aumento da vazão.

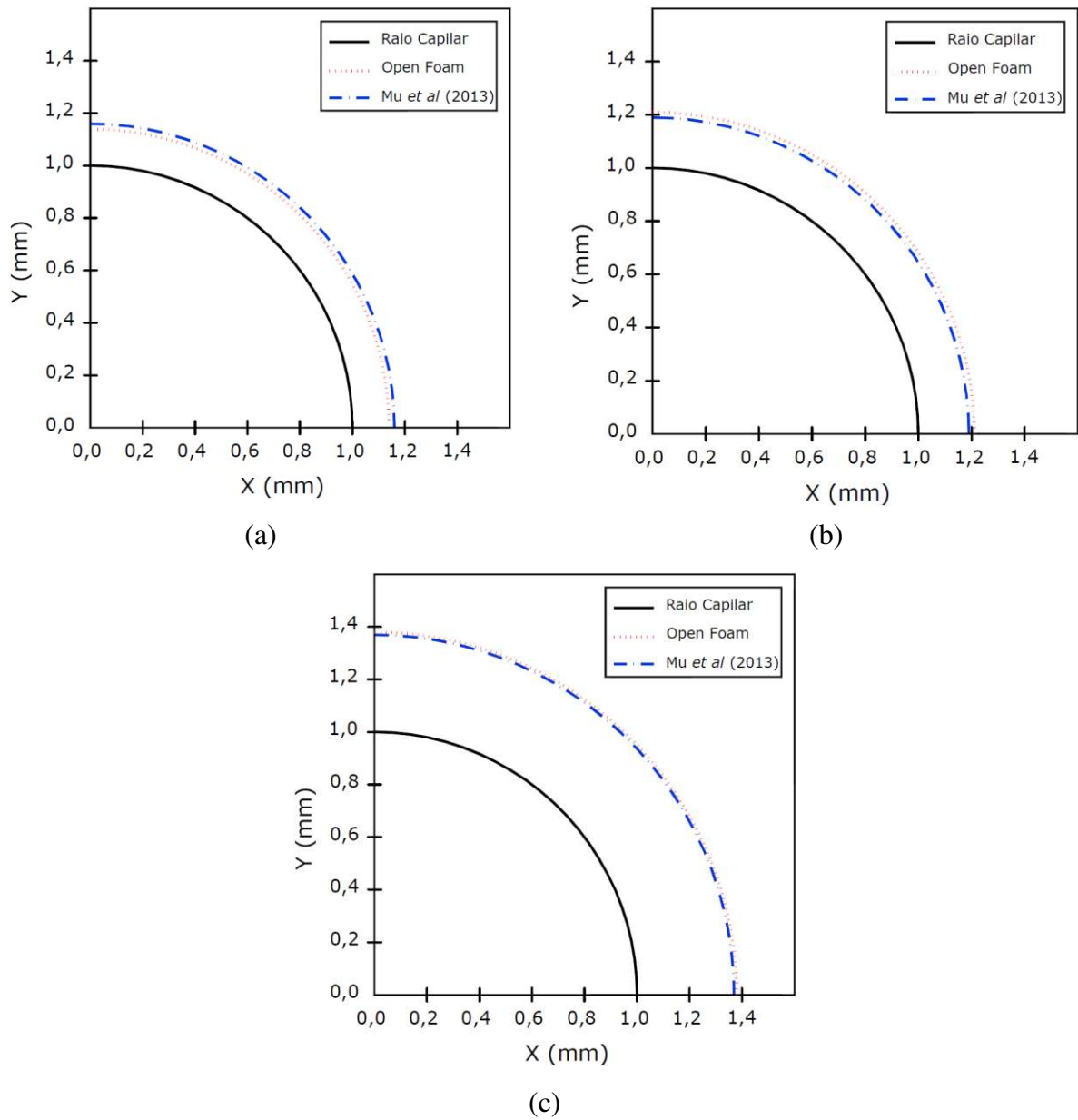


Figura 5. Inchamento máximo do extrudado para simulações realizadas com o modelo de Giesekus em diferentes vazões: (a) $Q=1,57 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (b) $Q=3,14 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (c) $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$.

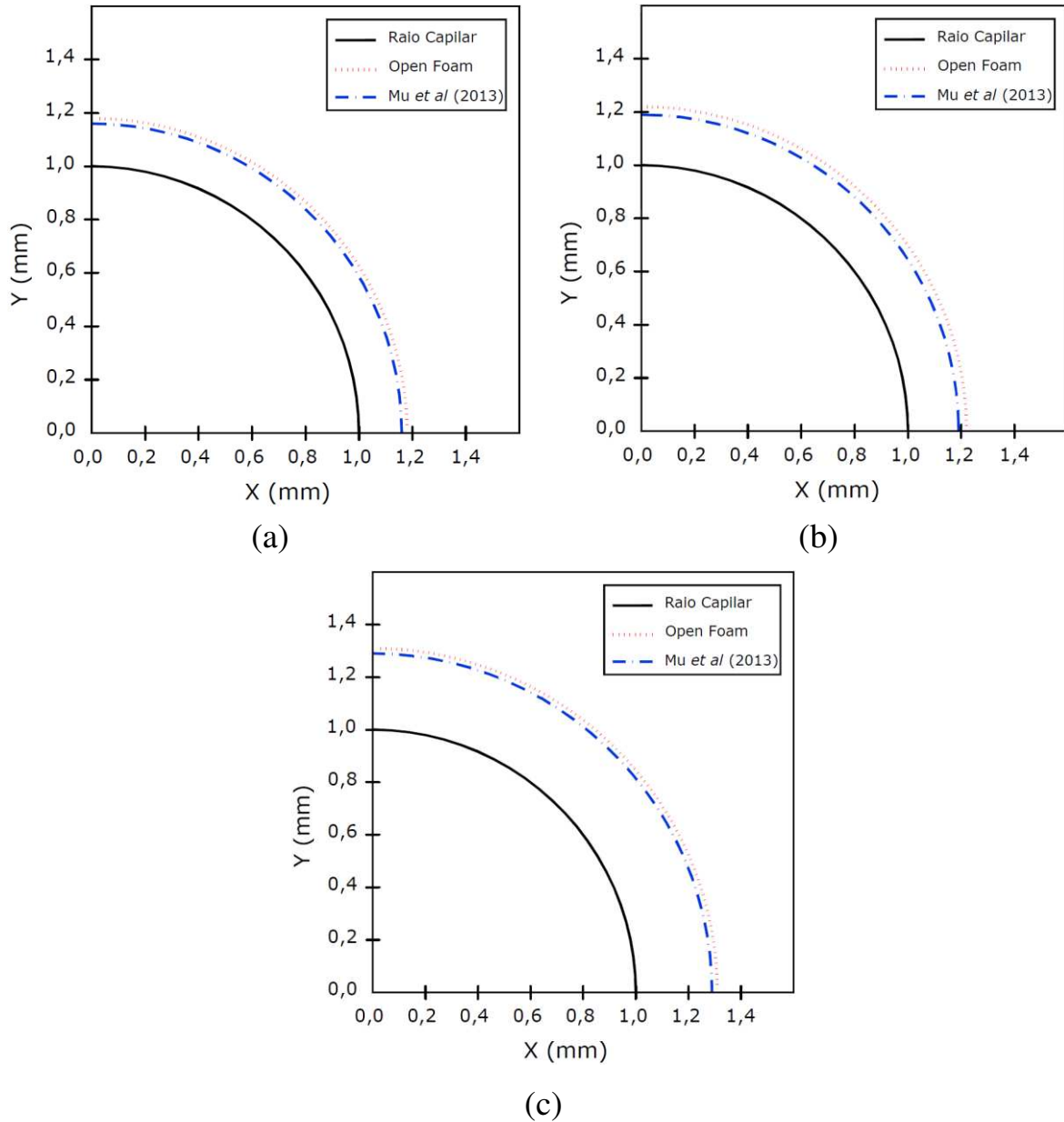


Figura 6. Inchamento máximo do extrudado para simulações realizadas com o modelo PTT em diferentes vazões: (a) $Q=1,57 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (b) $Q=3,14 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, (c) $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$.

Os valores dos raios do inchamento do extrudado encontrados para cada vazão e modelo constitutivo estão apresentados na **Tabela 3**. As dimensões dos raios em todos os casos foram colhidos no ponto máximo do inchamento e na condição de escoamento plenamente desenvolvido, ou seja, após o escoamento ter atingido a condição de regime permanente.

Tabela 3: Raio do inchamento em milímetros para as respectivas vazões e modelos constitutivos: (MU et al., 2013) e OpenFOAM.

Casos Vazões (m ³ /s)	Mu et al		OpenFOAM	
	Giesekus	PTT	Giesekus	PTT
$1,57 \times 10^{-8}$	1,16	1,16	1,14	1,18
$3,14 \times 10^{-8}$	1,19	1,19	1,21	1,22
$6,28 \times 10^{-8}$	1,37	1,29	1,38	1,31

Pode-se observar pelas figuras que, apesar dos pequenos desvios, a metodologia de simulação utilizada no presente trabalho forneceu resultados próximos aos da literatura para os modelos de Giesekus e PTT nas diferentes condições avaliadas. Desta forma, podemos dizer que o *solver* foi capaz de prever inchamentos semelhantes.

6.3 Influência da variação de parâmetros no inchamento do extrudado

Antes de prosseguirmos para um problema fisicamente real como o caso da borracha, é interessante analisar a influência de cada parâmetro no inchamento do extrudado. Portanto, quatro parâmetros foram variados, sendo eles a vazão (Q), o comprimento do capilar (L), o tempo de relaxação (λ) e os parâmetros dos modelos de Giesekus (α) e PTT (ε). Os valores utilizados como base para as variações foram $Q = 6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$, $L = 10\text{mm}$, $\lambda = 0,1\text{s}$, $\alpha = 0,1$ e $\varepsilon = 0,1$. O parâmetro ξ do modelo PTT foi considerado igual a zero. As variáveis η_{ar} , ρ_{ar} , η_p , ρ_p e η_s foram as mesmas utilizadas na Tabela 1 e na seção 5.4. Os resultados serão analisados para cada modelo constitutivo.

6.3.1 Influência dos parâmetros para o modelo de Giesekus

Conforme podemos observar na **Figura 7**, o aumento da vazão no capilar provoca um aumento da taxa de cisalhamento, ocasionando um aumento no diâmetro do inchamento. Isso se deve à recuperação elástica das cadeias poliméricas após o alívio das tensões exercidas no interior do capilar.

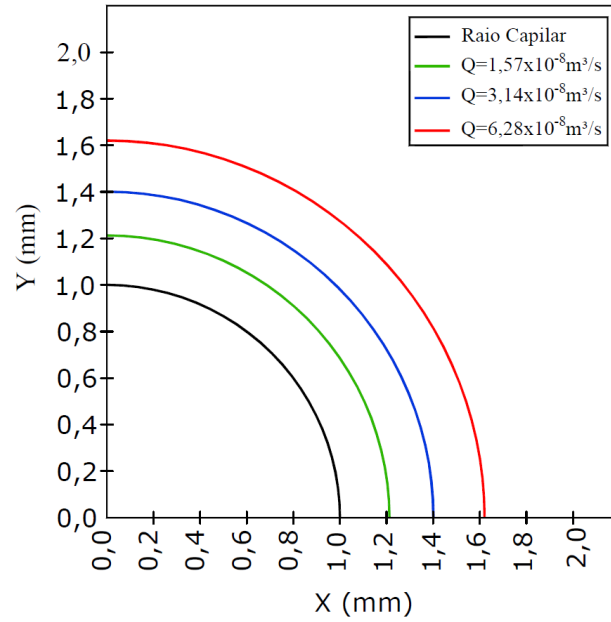


Figura 7: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes vazões.

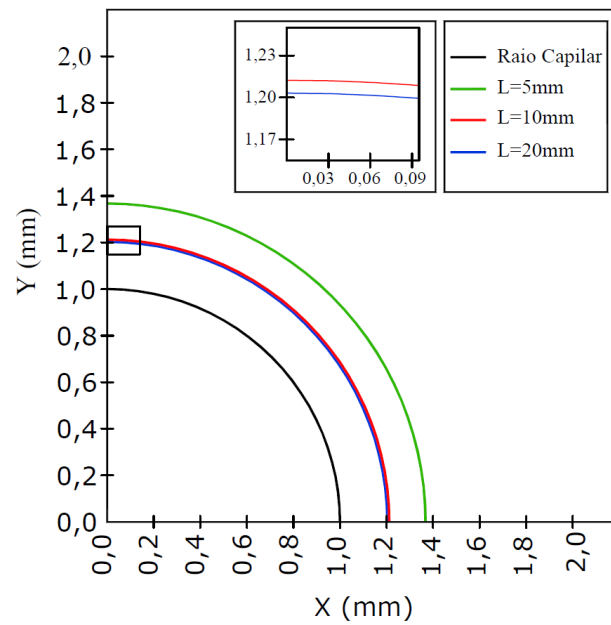


Figura 8: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes comprimentos do capilar.

A influência do tempo de residência pode ser observado na **Figura 8**, que nos permite visualizar os diferentes diâmetros de inchamento encontrados para os diferentes comprimentos do capilar. Para uma taxa de cisalhamento fixa, o inchamento decresce com o aumento do comprimento L do capilar. O inchamento para o capilar mais curto foi o maior, pois devido o tempo de residência ser menor quando comparado aos outros dois, a relaxação das cadeias poliméricas também é menor, resultando em uma recuperação elástica maior. Os capilares com comprimentos de 10 e 20mm mostraram uma pequena diferença de inchamento entre eles, sendo ainda a maior relaxação para o capilar de 20mm. Os diâmetros de inchamento muito próximos nos permite presumir que a relaxação, devido ao tempo de residência no capilar, poderia estar associado a um comportamento não linear.

A **Figura 9** mostra a influência do tempo de relaxação ou recuperação da deformação. Tempos de relaxação maiores estão associados a maiores armazenamentos de energia elástica. Podemos observar que o inchamento aumenta à medida que o λ aumenta, ou seja, a velocidade de deformação é maior que a capacidade de recuperação do material. Para o modelo de Giesekus, quanto mais próximo o valor de λ estiver de zero, mais semelhante será o comportamento do material ao de um fluido newtoniano.

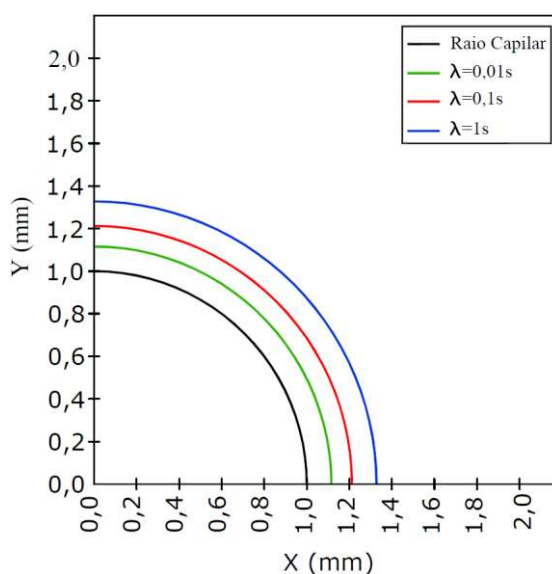


Figura 9: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes tempos de relaxação.

A **Figura 10** mostra o resultado do inchamento para a variação do parâmetro α . Pode-se constatar que com a diminuição do valor de α , o inchamento também sofreu diminuição. Isso era esperado pois, o modelo de Giesekus prevê o comportamento de um fluido newtoniano, quando o valor de α aproxima-se de zero.

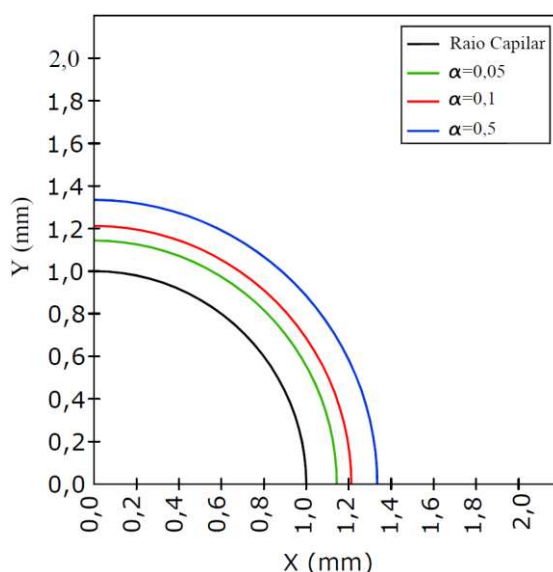


Figura 10: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes α do modelo de Giesekus.

6.3.2 Influência dos parâmetros para o modelo PTT

Como pode ser observado na **Figura 11**, o aumento da vazão no capilar também causou um aumento da taxa de cisalhamento, resultando em um aumento no diâmetro do inchamento. O padrão do inchamento, para a variação da vazão no modelo PTT, comportou-se da mesma maneira que para o modelo de Giesekus. Porém, para esta variação os resultados tiveram um comportamento menos linear que os observados para o modelo de Giesekus. É possível notar também que as três variações mostraram um inchamento ligeiramente maior que os observados no outro modelo utilizado. Isso poderia estar relacionado ao significado dos parâmetros específicos para cada um dos modelos ou mesmo à teoria em que cada modelo foi baseado.

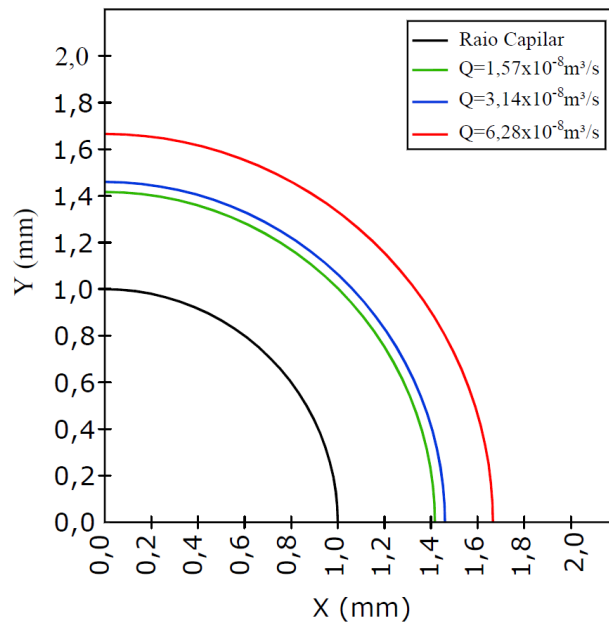


Figura 11: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes vazões.

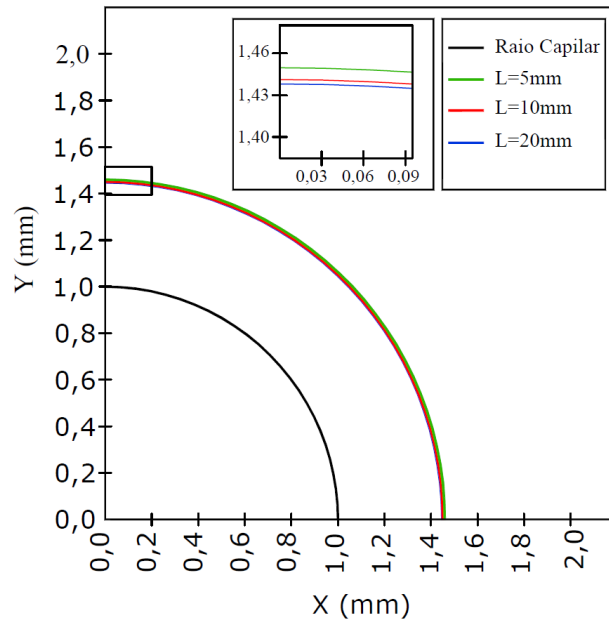


Figura 12: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes comprimentos do capilar.

A **Figura 12** chama a atenção pelo fato de mostrar que não houve diferença significativa entre os inchamentos para os diferentes comprimentos do capilar. Seriam necessários mais simulações e inclusive testes experimentais, para verificar se o modelo PTT não prevê adequadamente esta variação de parâmetro. Mesmo assim, os tempos de residência

nos maiores comprimentos do capilar resultaram em menores inchamentos, o que era esperado. Foi observado também uma não linearidade nos valores dos diâmetros de inchamento, à medida que foi aumentando-se o comprimento do capilar.

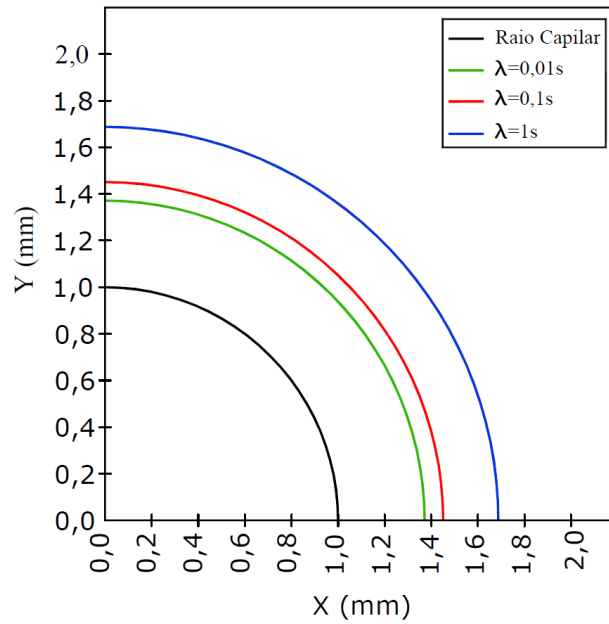


Figura 13: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes tempos de relaxação.

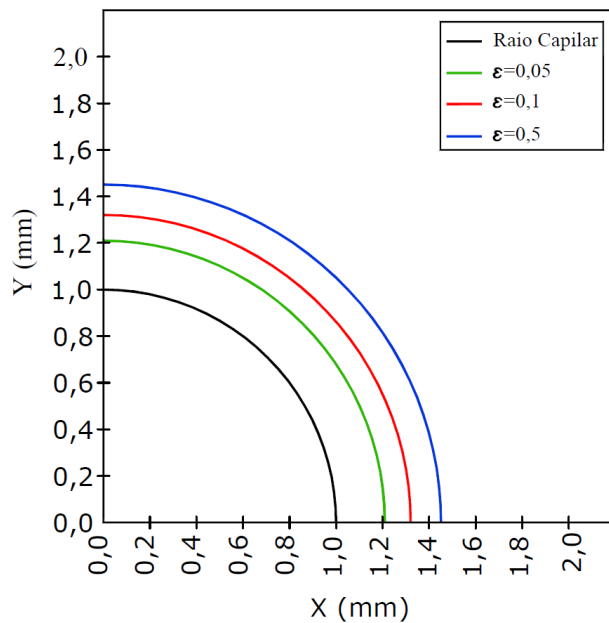


Figura 14: Comparação da dimensão da seção transversal do inchamento máximo para diferentes ϵ do modelo PTT.

A influência do tempo de relaxação pode ser observada na **Figura 13**. É possível verificar também que o inchamento do extrudado é maior ao passo que o λ aumenta. O modelo PTT também prevê um comportamento de fluido newtoniano conforme os valores para λ aproximam-se de zero.

A **Figura 14** mostra o resultado do inchamento para a variação do parâmetro ε . É possível visualizar que com a diminuição do valor de ε , o inchamento também diminui. Isso é esperado pois, no modelo PTT quando os parâmetros do modelo tendem a zero, obtemos o comportamento de um fluido newtoniano.

6.4 Resultados - compostos de borracha

Nesta seção estão descritos os resultados obtidos para os ajustes de curvas e os parâmetros para os modelos de Giesekus e PTT, provenientes de dados experimentais extraídos de compostos de borracha. Por último, serão apresentadas as simulações realizadas considerando esses parâmetros.

6.4.1 Parâmetros do Modelo de Giesekus e PTT

A **Figura 15** mostra os resultados do ajuste das curvas para G^* pelo modelo de Maxwell para os compostos de borracha fornecidos pela empresa Pirelli. Pode-se observar que o modelo de Maxwell foi capaz de descrever adequadamente o comportamento em regime oscilatório para a faixa de frequências avaliadas. O modelo foi ajustado para 3 modos de relaxação.

A **Figura 16** mostra o ajuste do modelo de Giesekus para a viscosidade, considerando que os compostos seguem a regra de Cox-Merz (1958). Os dados foram ajustados com 3 modos de viscosidade, de acordo com o procedimento descrito na **seção 4.2**. Pode-se também constatar um bom ajuste do modelo com os resultados experimentais.

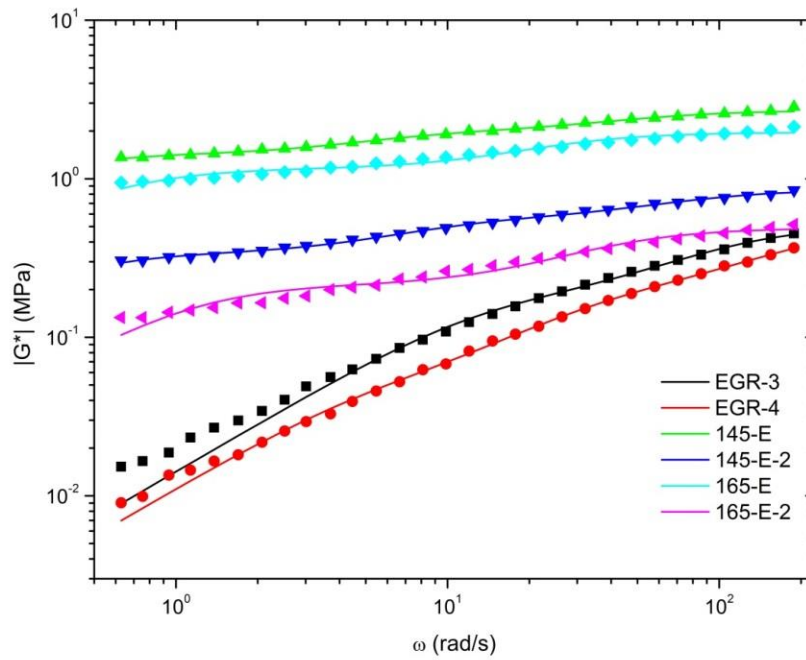


Figura 15: Gráfico mostrando a concordância entre a curva de ajuste com os valores dos dados experimentais para o $|G^*|$ de cada composto de borracha. (Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste).

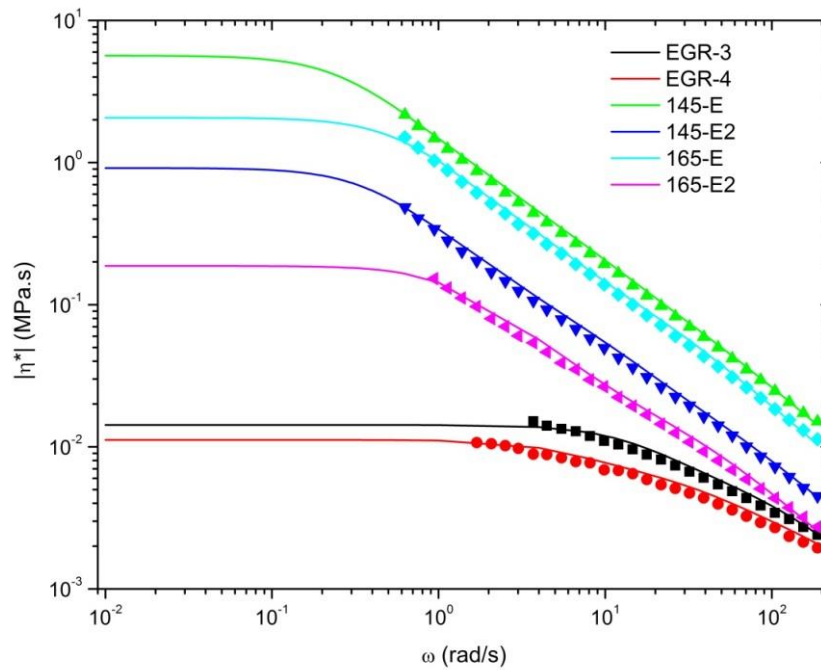


Figura 16. Gráfico mostrando a concordância entre a curva de ajuste com os valores dos dados experimentais para a $|\eta^*|$ de cada composto de borracha. A extrapolação da frequência permitiu encontrar o platô newtoniano. (Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste).

A **Tabela 4** mostra os valores dos parâmetros do modelo de Giesekus e PTT para os compostos de borracha analisados. Esses valores foram utilizados nas simulações de inchamento do extrudado apresentados na **seção 6.4.2**.

Tabela 4: Parâmetros encontrados para os compostos de borracha

Materiais	ρ (Kg/m ³)	K	λ_k (s)	η_{0k} (MPa · s)	α_k	ϵ_k
ERG-3	1105	1	0,008703761	0,003160579	0,3023	0,05
		2	0,075471513	0,011086801	0,3827	0,1501
		3	5,212189411	2,39711x10 ⁻⁹	0,25	0,9989
ERG-4	1105	1	0,027214646	0,003701563	0,3458	0,09949
		2	0,004228111	0,001543041	0,4638	0,00001393
		3	0,202503117	0,005940274	0,3772	0,1746
145-E		1	3,935350695	5,535600214	0,2982	0,1891
		2	0,175169711	0,102858605	0,3987	0,009346
		3	0,020650825	0,014527673	0,3277	0,0311
145-E2	1184	1	0,119432968	0,027241874	0,3933	0,0179
		2	0,01324679	0,003922602	0,2985	0,03433
		3	2,676740974	0,883910028	0,2709	0,2151
165-E		1	1,7855027	2,035822675	0,2473	0,2394
		2	0,089725524	2,54683x10 ⁻¹⁰	0,25	0,003567
		3	0,04113072	0,033742402	0,3632	0,01666
165-E2		1	0,001244527	1,55585x10 ⁻¹²	0,25	0,03433
		2	0,025097175	0,007062191	0,3427	0,03413
		3	0,872057428	0,180522474	0,2556	0,2314

6.4.2 Simulação do inchamento do extrudado

Para os compostos de borracha foram realizadas simulações com as mesmas condições de contorno e a mesma malha axissimétrica utilizados anteriormente, aplicando o modelo de Giesekus e PTT com os parâmetros mostrados na **Tabela 4**, considerando-se a vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. As **Figuras 17, 18, 19, 20, 21 e 22** apresentam os resultados das simulações para os parâmetros mencionados. Pode-se observar a presença do inchamento do extrudado na saída do capilar, mostrando que os resultados são fisicamente consistentes.

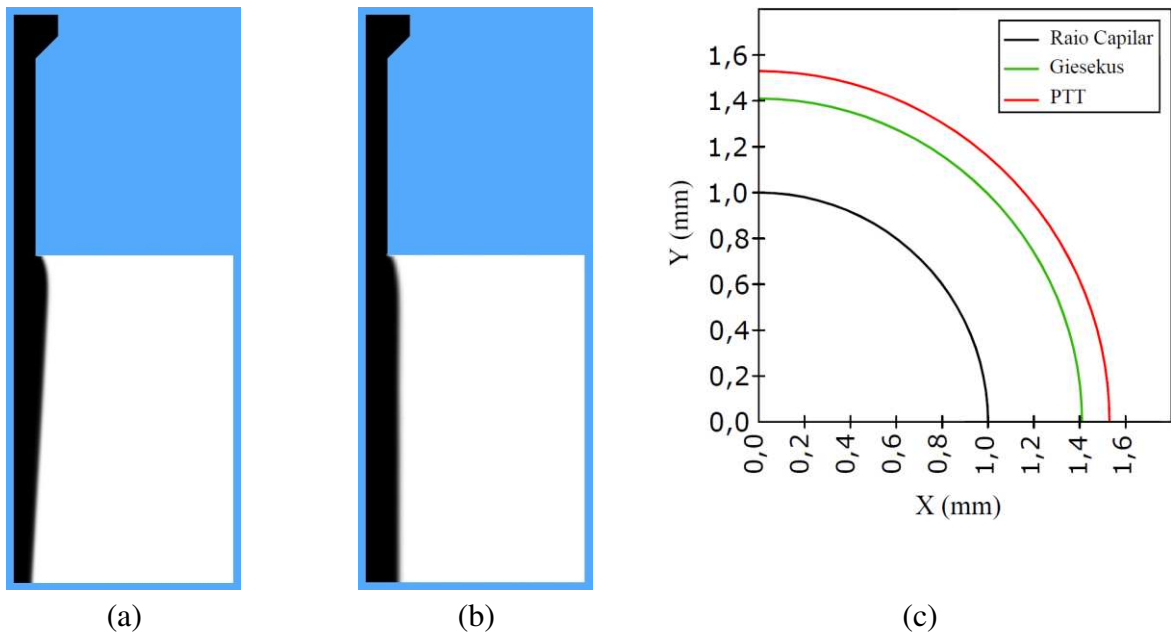


Figura 17. Escoamento do composto de borracha ERG-3 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.

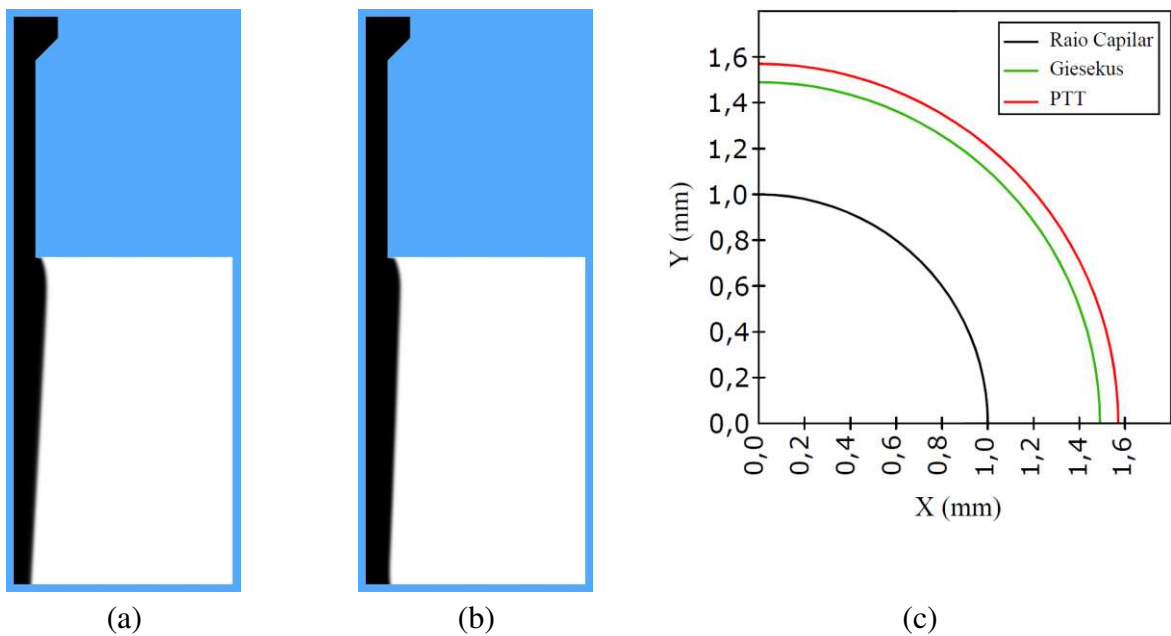


Figura 18. Escoamento do composto de borracha ERG-4 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.

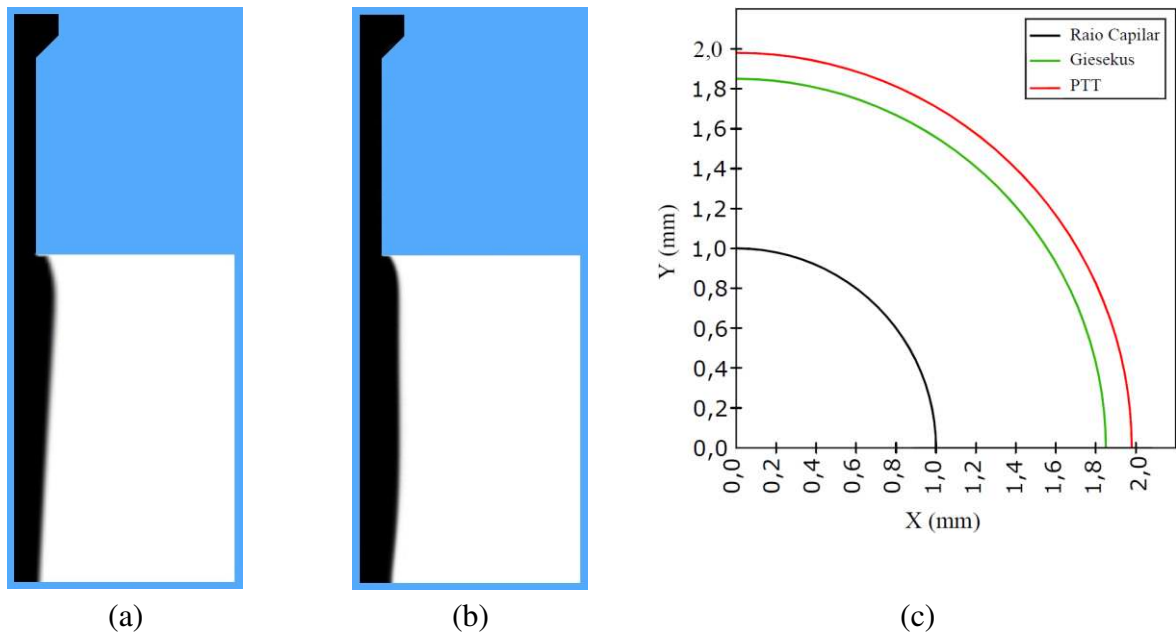


Figura 19. Escoamento do composto de borracha 145E pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.

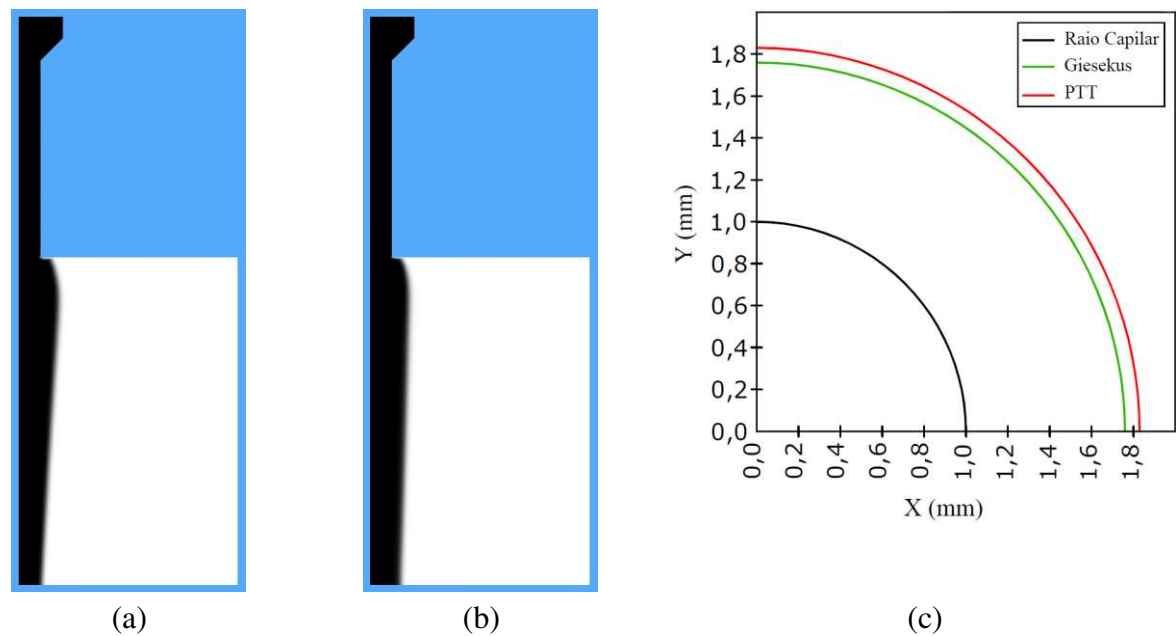


Figura 20. Escoamento do composto de borracha 165E pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.

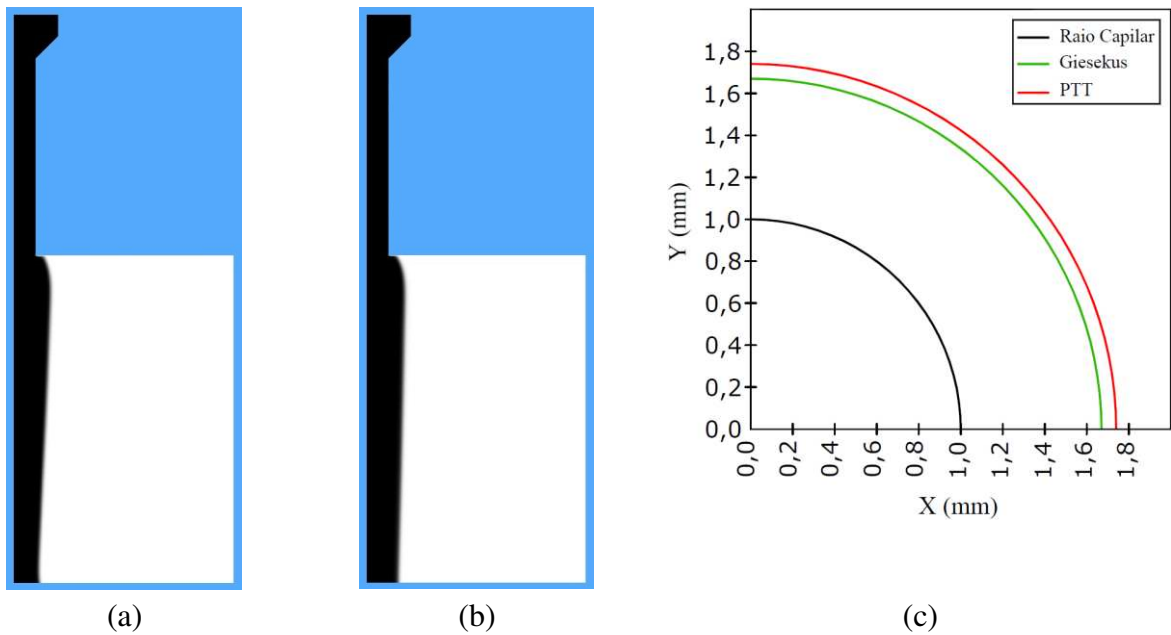


Figura 21. Escoamento do composto de borracha 145E2 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.

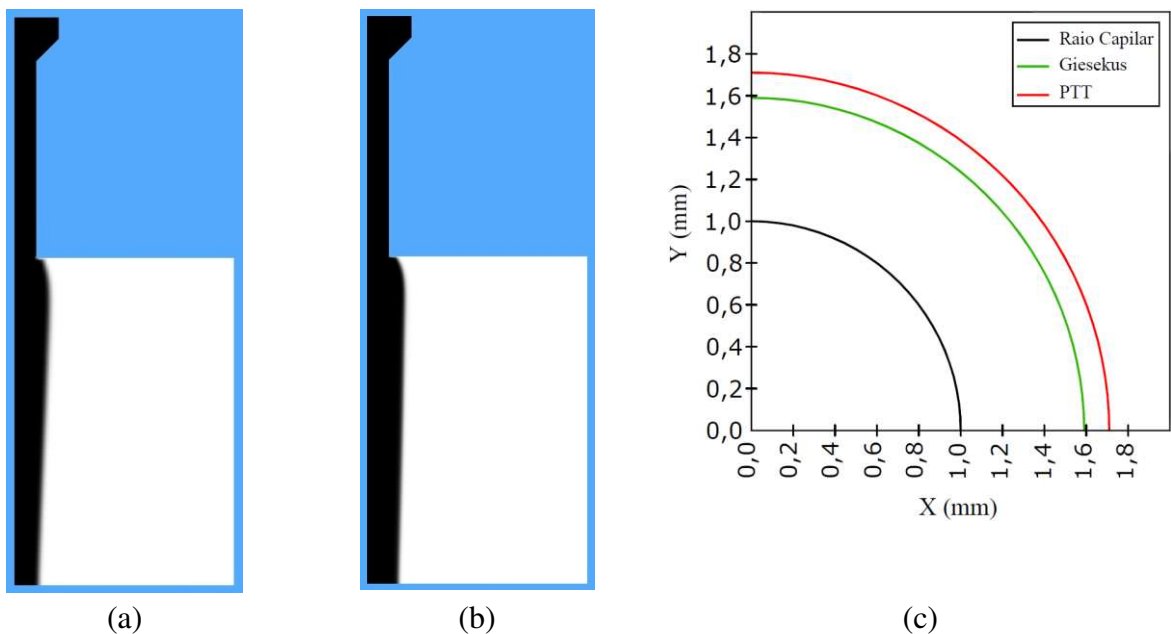


Figura 22. Escoamento do composto de borracha 165E2 pelo capilar de 1mm de raio a uma vazão $Q=6,28 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$. (a) Giesekus, (b) PTT, (c) Dimensão da seção transversal do inchamento máximo.

Estudos estão sendo realizados em outras condições e pretende-se, futuramente, corroborar os resultados das simulações com os dados experimentais de inchamento do extrudado na saída de capilares.

7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS

Foram realizadas simulações do inchamento do extrudado com o *software* de *CFD* OpenFOAM, considerando a viscoelasticidade não-linear através dos modelos de Giesekus e PTT. A validação do *solver* ViscoelasticInterFoam foi realizada, para a qual observamos boa concordância entre os valores de inchamento obtidos nas simulações com resultados publicados na literatura (MU et al., 2013).

A verificação da influência da variação dos parâmetros auxiliou na compreensão do comportamento do inchamento do extrudado na saída do capilar. Efeitos do tempo de residência, tempo de relaxação, aumento da vazão e alteração dos parâmetros constitutivos puderam ser avaliados.

A determinação de parâmetros para os modelos de Giesekus e PTT, a partir de dados experimentais obtidos de compostos de borracha fornecidos pela empresa Pirelli, também foi realizada. O método apresentado no presente trabalho, proporcionou a especificação desses valores para a realização das simulações dos compostos de borracha. O método pode ainda ser aplicado para a obtenção de mais de um modo de relaxação, possibilitando a representação da reologia do material de forma mais adequada.

Constatou-se também a eficiência do *software* OpenFOAM em descrever o comportamento de um escoamento viscoelástico de um composto de borracha para diferentes modelos constitutivos.

Para futuros trabalhos, sugere-se a corroboração dos resultados do inchamento do extrudado obtidos nas simulações com os resultados experimentais de extrusão dos compostos de borracha, o que não foi possível devido à falta de recursos técnicos e financeiros para se realizar tais experimentos.

Referências Bibliográficas

AZAIEZ, J.; GUÉNETTE, R.; AÏT-KADI, A. Numerical simulation of viscoelastic flows through a planar contraction. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 62, n. 2–3, p. 253–277, 1996.

BAIRD, D. G.; COLLIAS, D. I. **Polymer Processing - Principles and Design**. New York: Wiley & Sons, Inc, 1998.

BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O. **Dynamics of polymeric liquids**. 2. ed. New York: Jhon Wiley & Sons, 1987.

BRACKBILL, J. U.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, n. 2, p. 335–354, 1992.

BRETAS, R.; D'ÁVILA, M. **Reologia de polímeros fundidos**. 2. ed. São Carlos: EdUFScar, 2005.

CELIK, I. B. et al. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering**, v. 130, n. 7, p. 78001, 2008.

CHARRIER, J. M. **Polymeric materials and processing**. New York: Hanser Publishers, 1990.

COX, W. P.; MERZ, E. H. Correlation of dynamic and steady flow viscosities. **Journal of Polymer Science**, v. 28, n. 118, p. 619–622, abr. 1958.

FAVERO, J. L. **Simulação de escoamentos viscoelásticos: Desenvolvimento de uma Metodologia de Análise utilizando o Software OpenFOAM e Equações Constitutivas Diferenciais**. UFRGS, Dissertação de Mestrado, Porto Alegre, RS, 2009.

FOX, R. W.; PRITCHARD, P. J.; MCDONALD, A. T. **Introduction to fluid mechanics**. 7. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2009.

GHOREISHY, M. H. R. et al. Finite element modeling of the flow of a rubber compound through an axisymmetric die using the CEF viscoelastic constitutive equation. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 125, p. 3648–3657, 2012.

GIESEKUS, H. A SIMPLE CONSTITUTIVE EQUATION FOR POLYMER FLUIDS BASED ON THE CONCEPT OF DEFORMATION-DEPENDENT TENSORIAL MOBILITY Summary Some time ago a theory of elastic fluids such as concentrated polymer solutions and melts was presented based on the concept of a μ . **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 11, n. 1–2, p. 69–109, 1982.

HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981.

LIMA, N. C. **Simulação de Escoamentos Eletrohidrodinâmicos de Fluidos Newtonianos e Viscoelásticos**. [s.l.] Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, 2013.

LIMA, N. C.; D'AVILA, M. A. Numerical simulation of electrohydrodynamic flows of Newtonian and viscoelastic droplets. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 213, p. 1–14, 2014.

MACOSKO, C. W. **Rheology: Principles, Measurements and Applications**. New York: Wiley-VCH, 1994.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MANRICH, S. **Processamento de termoplásticos: Rosca única, extrusão e matrizes, injeção e moldes**. São Carlos: Artliber, 2005.

MORRISON, F. A. **Understanding rheology**. New York: Oxford University Press, 2001.

MU, Y. et al. Modeling and simulation of three-dimensional extrusion swelling of viscoelastic fluids with PTT, Giesekus and FENE-P constitutive models. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, 2013.

OPENFOAM_USERGUIDE. **OpenFOAM**. UK: Free Software Foundation, 2008.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. [s.l.] Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

QUINZANI, L. M.; ARMSTRONG, R. C.; BROWN, R. A. Birefringence and laser-Doppler velocimetry (LDV) studies of viscoelastic flow through a planar contraction. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 52, n. 1, p. 1–36, 1994.

RAUWENDAAL, C. **Polymer Extrusion**. 5. ed. Auburn: Hanser, 2013.

RUSCHE, H. **Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions**. [s.l.] University of London, 2002.

SCHLEINIGER, G.; WEINACHT, R. J. A remark on the Giesekus viscoelastic fluid. **Journal of Rheology**, v. 35, n. 6, p. 1157–1170, 1 ago. 1991.

SCHRAMM, G. **A Practical Approach to Rheology and Rheometry**. 2. ed. Karlsruhe: Haake, 2000.

TADMOR, Z.; GOGOS, C. G. **Principles of Polymer Processing**. 2. ed. New Jersey: Jhon Wiley & Sons, 2006.

THIEN, N. P.; TANNER, R. I. A new constitutive equation derived from network theory. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 2, n. 4, p. 353–365, jul. 1977.

XUE, S.-C.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. I. Numerical study of secondary flows of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 59, n. 1995, p. 191–213, 1995.