



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TÉCNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**IAN PETROS BRITO GUERREIRO**

**COMPATIBILITY PREDICTION OF THE BASE OIL-ADDITIVES MIX**  
**IN LUBRICANTS**

**FORTALEZA**

**2018**

IAN PETROS BRITO GUERREIRO

COMPATIBILITY PREDICTION OF THE BASEOIL-ADDITIVES MIX IN LUBRICANTS.

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Química do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Sebastião Mardônio

Pereira de Lucena

FORTALEZA

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

G965c Guerreiro, Ian Petros Brito.  
Compatibility prediction of the base oil-additives mix in lubricants / Ian Petros Brito Guerreiro. – 2018.  
73 f. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia,  
Curso de Engenharia Química, Fortaleza, 2018.  
Orientação: Prof. Dr. Sebastião Mardônio Pereira Lucena.

1. Lubrificantes. 2. Modelização Química. 3. Aditivos. 4. Polimeros. 5. Oleos. I. Título.

CDD 660

---

IAN PETROS BRITO GUERREIRO

COMPATIBILITY PREDICTION OF THE BASEOIL-ADDITIVES MIX IN LUBRICANTS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Química do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Engenharia Química.

Aprovada em:

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Sebastiao Mardônio Pereira de Lucena (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Profa. Dr. Rílvia Saraiva de Santiago Aguiar  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Pedro Felipe Gadelha Silvino  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

## RESUMO

O projeto tratou de fazer três diferentes estudos de casos sobre alguns lubrificantes para diferentes aplicações, como motores térmicos e lubrificantes industriais. O primeiro estudo é sobre a validação de alguns métodos para prever a compatibilidade de olefinas com óleos de base chamados YB4+, usando modelização molecular dinâmica para comparar os parâmetros de solubilidade. O segundo estudo é sobre o raio de giração, uma propriedade ligada à viscosidade de materiais. Então, por fim, a metodologia foi aplicada à um sistema real industrial, mensuração dos impactos da concentração de aditivos por uma análise energética, observando-se uma possibilidade da simulação de moléculas reais e de que havia a possibilidade da criação de um lubrificante ótimo definido por essa abordagem.

**Palavras-chave:** Lubrificantes. Óleos de Base. Polímeros. Tribologia. Modelização Molecular

## ABSTRACT

The project has treated three study cases about some challenges for different lubricant applications including thermal engines and industrial lubricants. The first study case is about the validation of some methods which predict the compatibility of Olefin Copolymers and a Base Oil Called YB4+ using Molecular Dynamic procedure, by a comparison of Solubility Parameters. The Second is about Gyration Radius, a property linked with the Viscosity. Then, at the end, the methodology is applied to real system for industrial applications, e.g. compatibility in terms of solubility parameters and the impact of the concentration of additives using an energetic approach looking for study the impact caused by the concentration of the additive, it was observed that it could be possible to model big real molecules with little ones and then find a optimum lubricant defined by the method.

**Keywords:** Lubricants. Base Oil. Polymers. Tribology. Molecular Modelling.

## SUMMARY

<b>1</b>	<b>INTRODUCTION .....</b>	<b>01</b>
<b>1.1</b>	<b>Company Presentation .....</b>	<b>01</b>
<i>1.1.1</i>	<i>Company's organization.....</i>	<i>02</i>
<i>1.1.2</i>	<i>Total Marketing Services .....</i>	<i>02</i>
<i>1.1.3</i>	<i>CREC.....</i>	<i>03</i>
<b>1.2</b>	<b>Internship Description.....</b>	<b>04</b>
<i>1.2.1</i>	<i>Scope of Work .....</i>	<i>04</i>
<b>2</b>	<b>GENERALITIES.....</b>	<b>07</b>
<b>2.1</b>	<b>Lubricants .....</b>	<b>07</b>
<i>2.1.1</i>	<i>Polymers.....</i>	<i>08</i>
<i>2.1.1.1</i>	<i>Structural Groups .....</i>	<i>08</i>
<i>2.1.1.2</i>	<i>Type of Polymers.....</i>	<i>09</i>
<i>2.1.1.3</i>	<i>Average Mass and Chain Length .....</i>	<i>11</i>
<i>2.1.2</i>	<i>Base Oils.....</i>	<i>12</i>
<i>2.1.3</i>	<i>Additives .....</i>	<i>13</i>
<b>2.2</b>	<b>Materials Studio.....</b>	<b>13</b>
<i>2.2.1</i>	<i>Materials Visualizer.....</i>	<i>13</i>
<i>2.2.1.1</i>	<i>Draw Tool .....</i>	<i>13</i>
<i>2.2.1.2</i>	<i>Building Polymer Tool.....</i>	<i>15</i>
<i>2.2.2</i>	<i>Forcite .....</i>	<i>16</i>
<i>2.2.2.1</i>	<i>Forcite Analyzing Tool.....</i>	<i>17</i>
<i>2.2.3</i>	<i>Amorphous Cell .....</i>	<i>18</i>
<i>2.2.4</i>	<i>Scripting Tool and the Cluster.....</i>	<i>19</i>
<b>3</b>	<b>PREDICTION METHODS .....</b>	<b>21</b>
<b>3.1</b>	<b>Molecules Modeling .....</b>	<b>21</b>
<i>3.1.1</i>	<i>Polymers Modeling Criteria .....</i>	<i>22</i>
<i>3.1.1.1</i>	<i>Size.....</i>	<i>23</i>
<i>3.1.1.2</i>	<i>Composition.....</i>	<i>23</i>
<i>3.1.1.3</i>	<i>Conformation.....</i>	<i>23</i>
<i>3.1.2</i>	<i>Modeled Molecules .....</i>	<i>23</i>

## SUMMARY

<b>3.1.3</b>	<b><i>Geometry Optimization</i></b> .....	24
<b>3.1.3.1</b>	<i>Molecular Dynamic</i> .....	25
<b>3.1.4</b>	<b><i>Base Oil Modeling</i></b> .....	26
<b>3.2</b>	<b>Constructing the Cells</b> .....	28
<b>3.2.1</b>	<b><i>Mixing Cells</i></b> .....	29
<b>3.3</b>	<b>The Script</b> .....	30
<b>3.3.1</b>	<b><i>Solubility Parameter</i></b> .....	31
<b>3.4</b>	<b>The Methods</b> .....	32
<b>3.4.1</b>	<b><i>First Method</i></b> .....	32
<b>3.4.1.1</b>	<i>Gettind the Individual Cell Solubility Parameter</i> .....	33
<b>3.4.1.2</b>	<i>Density Comparison</i> .....	33
<b>3.4.1.3</b>	<i>Statitic Analysis</i> .....	34
<b>3.4.1.4</b>	<i>Flory Huggins Parameter</i> .....	34
<b>3.4.2</b>	<b><i>Second Method</i></b> .....	36
<b>3.4.2.1</b>	<i>Comparison</i> .....	36
<b>3.5</b>	<b>Influence of Different Parameters</b> .....	37
<b>3.6</b>	<b>Conclusion</b> .....	38
<b>4</b>	<b>RADIUS OF GYRATION</b> .....	39
<b>4.1</b>	<b>Definition</b> .....	39
<b>4.2</b>	<b>Viscosity Relation</b> .....	39
<b>4.3</b>	<b>Method</b> .....	40
<b>4.4</b>	<b>Results</b> .....	40
<b>4.5</b>	<b>Rate of Swelling</b> .....	41
<b>4.6</b>	<b>Difficulties</b> .....	42
<b>4.7</b>	<b>Conclusion</b> .....	43
<b>5</b>	<b>INDUSTRIAL LUBRICANTS</b> .....	45
<b>5.1</b>	<b>Method</b> .....	45
<b>5.2</b>	<b>Modeling the Molecules</b> .....	46
<b>5.2.1</b>	<i>DEV 1763</i> .....	46
<b>5.2.2</b>	<i>PAO2+</i> .....	47
<b>5.2.3</b>	<i>OCP: Lucant</i> .....	48
<b>5.3</b>	<b>Models</b> .....	49



## SUMMARY

5.4	Results .....	50
5.4.1	<i>Density Verification</i> .....	50
5.4.2	<i>Flory Huggins</i> .....	51
5.5	Real OCP .....	53
5.6	Conclusion .....	53
6	ADDITIVES .....	55
6.1	Molecule Modeling.....	55
6.1.1	<i>Additive 1</i> .....	55
6.1.2	<i>Additive 2</i> .....	56
6.1.3	<i>EP Additive</i> .....	57
6.1.4	<i>Another Base Oil</i> .....	57
6.2	Method .....	58
6.2.1	<i>Mixing Method</i> .....	58
6.3	Result .....	59
6.4	Conclusion .....	59
7	FINAL CONCLUSION.....	61
7.1	Difficulties.....	61
7.2	Knowledge Acquired .....	62
	REFERENCES .....	63

# TERMO DE CONFIDENCIALIDADE E SIGILO

O Trabalho Final de Curso, apresentado na forma de documento monográfico intitulado **Compatibility Prediction of the Base Oil-Additives mix in Lubricants**, volume constante como um dos requisitos para obtenção do grau de Engenheiro Químico pela Universidade Federal do Ceará, orientado pelo **Prof. Dr. Sebastião Mardônio Pereira Lucena**, defendido no dia 26 de dezembro de 2018, foi depositado pelo autor **Ian Petros Brito Guerreiro** sob o compromisso de confidencialidade e sigilo sobre todas as informações técnicas relacionadas às suas pesquisas. Por este termo de confidencialidade e sigilo **são vedadas as seguintes práticas:**

1. **Disponibilização** do documento integral em plataformas públicas ou repositórios acadêmicos;
2. **A utilização das informações**, aqui protegidas por sigilo, e doravante constantes como informações confidenciais, a quem tiver acesso;
3. **Gravação ou cópia da documentação** confidencial a que tiver acesso, excetuando as cópias e/ou documentos originais AUTORIZADOS;
4. **A apropriação** para si ou para outrem do material confidencial e/ou sigiloso da tecnologia que venha a ser disponível;
5. **Repasse** de conhecimento das informações confidenciais;

Neste Termo, as seguintes **expressões serão assim definidas:**

**Informação Confidencial** significará toda informação revelada através da apresentação da tecnologia, a respeito de, ou, associada com dados obtidos para elaboração da monografia, sob a forma escrita, verbal ou por quaisquer outros meios. Informação Confidencial inclui, mas não se limita, à informação relativa às operações, processos, planos ou intenções, informações sobre produção, instalações, equipamentos, sistemas, dados, habilidades especializadas, projetos, métodos e metodologia, fluxogramas, especializações, componentes, fórmulas, produtos e questões relativas ao desempenho das atividades laborais.

A vigência da obrigação de confidencialidade e sigilo, assumida por meio deste termo, terá a validade enquanto a informação não for tornada de conhecimento público por direta autorização dos seus autores, mediante autorização escrita.


**Ian Petros Brito Guerreiro**

Autor



**Prof. Dr. Sebastião Mardônio Pereira Lucena**

Orientador



**Profa. Dra. Rílvia Saraiva de Santiago Aguiar**

Docente Responsável pela disciplina



**Prof. Dr. Pedro Felipe Gadelha Silvino**

Componente da Banca

