UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

LIZANDRO DE SOUSA SANTOS

SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE PULTRUSÃO

RIO DE JANEIRO

JULHO DE 2009

Lizandro de Sousa Santos

SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE PULTRUSÃO

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos.

Orientador: Verônica Maria de Araújo Calado

RIO DE JANEIRO

JULHO DE 2009

Santos, Lizandro de Sousa.
Simulação e Otimização do Processo de Pultrusão / Lizandro de Sousa Santos. – 2009.
VIII. 140 p. 29.7 cm.

Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Rio de Janeiro, 2009.

Orientador: Verônica Maria de Araújo Calado
Co-orientador: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Dissertação – Universidade Federal do Rio de Janeiro.
I. UFRJ II. Título (série)

Lizandro de Sousa Santos

SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE PULTRUSÃO

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos.

Aprovada em

Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc., UFRJ

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., D.Sc., UFRJ

Mirabel Cerqueira Rezende, D.Sc., ITA

Carlos Eduardo Fontes da Costa e Silva, D.Sc., ESSS

Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc., UFRJ

RIO DE JANEIRO

JULHO DE 2009

RESUMO

A pultrusão consiste em um processo contínuo automatizado para produção de compósitos poliméricos com seção transversal constante. Nesse processo uma mistura de fibra/resina é continuamente puxada à velocidade constante através de um molde metálico aquecido. O molde geralmente é aquecido por resistências elétricas acopladas em sua superfície para aquecer o material de modo a ativar a reação de polimerização (cura). Os principais objetivos do processo de pultrusão são obter materiais com elevada resistência mecânica, ausência de falhas e fissuras, cura uniforme, e com baixo custo de energia. Uma das maneiras de reduzir o custo energético do processo é dispor de um arranjo de aquecedores que possibilite aquecer o material de forma a minimizar o desperdício de energia ou aquecimento incorreto do molde. Em vista disso, o objetivo deste trabalho é propor uma ferramenta computacional capaz de simular e otimizar o processo de pultrusão. O programa desenvolvido envolve um software comercial de fluidodinâmica computacional para simular o processo, acoplada a um algoritmo de enxame de partículas para a otimização do mesmo. A metodologia proposta consiste em aplicar essa ferramenta a um caso já estudado na literatura e também propor modificações na configuração térmica do processo com objetivo de reduzir o consumo de energia. Os resultados obtidos indicam que a ferramenta de otimização pode ser bastante útil para projetar uma configuração de aquecimento mais econômica.

Palavras-chave: Compósitos poliméricos, Fluidodinâmica Computacional.

ABSTRACT

Pultrusion is a continuous polymeric manufacture process for producing composite parts with constant cross-sectional profiles. In this process, the fiber/resin mixture is continuously pulled through a heated die at constant speed. The pultrusion die generally is heated by electrical heaters coupled on die surface in order to heat the material and to start the cure reaction. One of the main purposes of pultrusion is to obtain materials with high mechanical resistance, no fissures, uniform degree of cure and low process cost. In this way, there is necessity of a heating arrangement capable to provide process aims, by reducing process cost and to heat material in the correct way. The goal of this present work is to develop a computational tool able to simulate and optimize pultrusion process. The program involves a fluid dynamics commercial software for process simulation coupled to particle swarm optimization algorithm. The proposed methodology consists in application of this tool in a case study of reported literature and to suggest modifications in thermal configuration of the process with the aim of reducing the energy consumption. The obtained results showed that the energy consumption may be considerably reduced producing a significant decrease in process cost.

Key-Words: Polymer Composites, Computer Fluid-dynamics.

Aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

À minha noiva Marie Julie, pelos anos de amor, companheirismo, paciência e incentivo.

Ao professor Rogério Pagano, devo agradecer todo o aprendizado que tive ao longo desse período (como aluno de iniciação científica e mestrado), e por ser exemplo de dedicação e profissionalismo.

Aos professores Verônica Calado e Evaristo Biscaia, pela grande oportunidade que me ofereceram e confiança que depositaram em minha capacidade.

Aos colegas do LADEQ - LABTER os quais convivi ao longo desse período.

Aos companheiros do LADES, pela oportunidade de aprendizado diário, confiança e crescimento profissional.

Aos meus familiares e colegas de faculdade e mestrado que conviveram comigo durante essa etapa de minha vida.

Aos meus colegas de moradia os quais convivi durante o período de faculdade e mestrado; com certeza me ajudaram a amadurecer e enfrentar as adversidades da vida.

Aos professores da Escola de Química.

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Parâmetros físicos	55
Tabela 4.2	Parâmetros cinéticos	55
Tabela 4.3	Parâmetros do algoritmo de otimização	67
Tabela 4.4	Resultados da otimização a 4 $mm \cdot s^{-1}$	69
Tabela 4.5	Resultado da otimização do processo à velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$	69
Tabela 4.6	Resultados da otimização a 5 $mm \cdot s^{-1}$	74
Tabela 4.7	Resultado da otimização do processo à velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$	74
Tabela 4.8	Resultados da otimização a 4 $mm \cdot s^{-1}$	83
Tabela 4.9	Resultado da otimização do processo à velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$	83
Tabela 4.10	Resultados da otimização a 5 $mm \cdot s^{-1}$	89
Tabela 4.11	Resultado da otimização do processo à velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$	89

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Estrutura do compósito polimérico pultrudado. 9

Figura 2.2(a) Pultrusão por injeção. 9

Figura 2.2(b) Pultrusão em banho aberto. 9

Figura 2.3 Tanque aberto de saturação da resina. 10

Figura 2.4 Sistema de guias que direcionam as fibras para o molde. 10

Figura 2.5 Moldes de pultrusão com cavidades de diferentes geometrias. 11

Figura 2.6 Seções transversais típicas de compósitos pultrudados. 12

Figura 2.7 . Principais etapas do processo de pultrusão [1] fibras, [2] molde, [3] sistema de tração, [4] sistema de corte. 13

Figura 2.8 Espaço viável, representado pela região escura, delimitado pela velocidade (u) e temperatura (T). 13

Figura 2.9 Fórmula estrutural do grupo epoxídrico. 15

Figura 2.10 Fórmula estrutural da resina éster-vinílica. 16

Figura 2.11 Representação de um molde de pultrusão com cavidade cilíndrica. 19

Figura 2.12 Problema estudado por HAN *et al.* (1986). 25

Figura 2.13 Perfil térmico e cinético do processo de pultrusão em função da direção de puxamento (x) de tração da fibra. 27

Figura 2.14 Imagens do molde de pultrusão da empresa ECO Compósitos Engenharia. 30

Figura 2.15 Valores diferentes de grau de cura na seção de saída do molde. 32

Figura 2.16 Proposta de aquecedores distribuídos internamente no molde: **(a)** Perfil de temperatura (condição de contorno), **(b)** molde com três regiões de temperatura. 34

Figura 3.1 Desenho da estrutura (um quarto de um molde com cavidade de geometria “I”). 40

Figura 3.2 Geração da malha para o cálculo. 40

Figura 3.3 Volume finito de cálculo em coordenadas cartesianas. 43

Figura 3.4 Molde de pultrusão com três aquecedores. 48

Figura 3.5 Esquema da interface de comunicação. 51

Figura 4.1 Molde de pultrusão estudado por LIU (2001). 54

Figura 4.2 Dimensões do compósito com seção transversal de geometria “I” estudado por LIU (2001). 54

Figura 4.3 Localização dos pontos de medição de temperatura (vista frontal do molde de pultrusão). 55

Figura 4.4 Desenho da estrutura do molde de pultrusão com as dimensões consideradas. 56

Figura 4.5 Perfil de temperatura do molde na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. 57

Figura 4.6 Perfil de temperatura do compósito na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. 57

Figura 4.7 Perfil de temperatura do compósito na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$: (a) $z = 0$, (b) $z = 0.2$, (c) $z = 0.8$ e (d) $z = 1.0\ mm$. 58

Figura 4.8 Perfil de temperatura no centro do compósito na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$. 59

Figura 4.9 Grau de cura do na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. 59

Figura 4.10 Perfil de cura na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$: (a) $z = 0$, (b) $z = 0.2$, (c) $z = 0.8$ e (d) $z = 1.0\ m$. 60

Figura 4.11 Grau de cura no centro do compósito na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$. 61

Figura 4.12 Perfil de temperatura do molde: (a) velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e (b) velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$. 62

Figura 4.13 Perfil de temperatura do compósito: (a) velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e (b) velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. 62

Figura 4.14 Perfil de temperatura do compósito na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$: (a) $z = 0$, (b) $z = 0.2$, (c) $z = 0.8$ e (d) $z = 1.0\ m$. 63

Figura 4.15 Perfil de temperatura no centro do compósito na velocidade de $5\, mm \cdot s^{-1}$. 64

Figura 4.16 Grau de cura: (a) velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e (b) velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. 64

Figura 4.17 Grau de cura na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$: (a) $z = 0$, (b) $z = 0{,}2$, (c) $z = 0{,}8$ e (d) $z = 1{,}0\ m$. 65

Figura 4.18 Perfil de cura no centro do compósito na velocidade de $5\, mm \cdot s^{-1}$, resultante do cálculo da otimização. 66

Figura 4.19 Perfil de temperatura do molde (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) iteração 3 (perfil ótimo), (d) simulação do caso anterior. 70

Figura 4.20 Perfil de temperatura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) iteração 3 (perfil ótimo), (d) simulação do caso anterior. 71

Figura 4.21 Perfil de temperatura no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $4\, mm \cdot s^{-1}$. 72

Figura 4.22 Perfil de cura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) iteração 3 (perfil ótimo), (d) simulação do caso anterior. 73

Figura 4.23 Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$. 73

Figura 4.24 Perfil de temperatura do molde (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) resultados da simulação.do caso anterior. 74

Figura 4.25 Perfil de temperatura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) resultados da simulação.do caso anterior. 75

Figura 4.26 Perfil de temperatura ótimo no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$. 77

Figura 4.27 Perfil de cura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) resultados da simulação.do caso anterior. 78

Figura 4.28 Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$ 78

Figura 4.29 Ilustração do perfil de temperatura e grau de cura resultantes do posicionamento do aquecedor térmico próximo à seção de entrada do molde. 79

Figura 4.30 Ilustração do perfil de temperatura e de grau de cura resultantes do posicionamento do aquecedor térmico próximo à seção intermediária do molde. 80

Figura 4.31 Ilustração do perfil de temperatura e de grau de cura resultantes do posicionamento do aquecedores na seção intermediária do molde. 80

Figura 4.32 Ilustração do perfil de temperatura e de grau de cura resultantes de aquecedores de área supercicial pequena comparada à área superficial do molde. 81

Figura 4.33 Sugestão de configuração de aquecedores internos no molde de pultrusão. 82

Figura 4.34 Desenho da estrutura (um quarto de um molde com cavidade de geometria “I”) utilizando aquecedores internos. 82

Figura 4.35 Perfil de temperatura do molde (a) iteração 1, (b) iteração 2 e, (c) otimização com aquecedores retangulares a 4 $mm \cdot s^{-1}$. 85

Figura 4.36 Perfil de temperatura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) otimização com aquecedores retangulares a 4 $mm \cdot s^{-1}$. 86

Figura 4.37 Perfil de temperatura ótimo no centro do compósito, resultante da otimização com aquecedores internos, na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. 87

Figura 4.38 Perfil de cura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) otimização com aquecedores retangulares a 4 $mm \cdot s^{-1}$. 88

Figura 4.39 Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização com aquecedores internos, na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$ 88

Figura 4.40 Perfil de temperatura do molde (a) iteração 1, (b) iteração 2 (c) otimização com aquecedores retangulares a 5 $mm \cdot s^{-1}$. 90

Figura 4.41 Perfil de temperatura do compósito (a) iteração 1, (b) iteração 2 e (c) otimização com aquecedores retangulares a 5 $mm \cdot s^{-1}$. 91

Figura 4.42 Perfil de temperatura ótimo no centro do compósito, resultante da otimização com aquecedores internos, na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$. 92

Figura 4.43 Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização utilizando aqucecedores internos, na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ 93

Figura A.1 Diretório de localização do código. 105

Figura A.2 Diretório de localização do código. 115

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO **1**

1.1 Compósitos Poliméricos: Uma Breve Introdução 1
1.2 Objetivos da Dissertação 4
1.3 Estrutura da Dissertação 5

CAPÍTULO 2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS E REVISÃO DA LITERATURA **7**

2.1 Processo de Obtenção de Compósitos Poliméricos por Pultrusão 7
2.1.1 Breve Introdução à Pultrusão de Compósitos Poliméricos 7
2.1.2 Descrição do Processo de Pultrusão 9
2.1.3 Considerações sobre o Processo de Pultrusão 12

2.2 Reação de Cura de Resinas 14
2.2.1 Resinas Utilizadas para o Processo de Pultrusão 14
2.2.2 Discussão Sobre Cinética de Cura de Resinas Termorrígidas 16

2.3 Modelo Matemático do Processo de Pultrusão 19

2.4 Simulação Computacional do Processo de Pultrusão 21

2.5 Estudo Computacional da Otimização do Processo de Pultrusão 27
2.5.1 Introdução à Otimização 27
2.5.2 Motivação para Otimização do Processo de Pultrusão 30
2.5.3 Trabalhos sobre Otimização do Processo de Pultrusão 31

CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA PARA SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO **37**

3.1 Procedimento para Simulação do Processo de Pultrusão 37
3.1.1 Introdução a Fluidodinâmica Computacional 37

3.1.2 Simulação do Processo 39
3.1.3 Modelagem Matemática e Discretização das Equações 42

3.2 Etapa da Otimização 46
3.2.1 Formulação do Problema de Otimização 46
3.2.2 Método de Enxame de Partículas 48

3.3 Interface de Comunicação do CFX 50

CAPÍTULO 4 - ESTUDOS DE CASO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS 53

4.1 Etapas do Estudo 53
4.2 Simulação do Processo 53
4.3 Otimização do Processo 66
4.4 Otimização do Processo de Pultrusão Utilizando Aquecedores Internos 79

CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES 96

5.1 Conclusões 96
5.2 Sugestões 97

REFERÊNCIAS 98

ANEXOS 106

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

"O que serve de alimento ou de bálsamo para o tipo superior de homem deve ser quase veneno para um tipo bem diverso e menor"

Friedrich Nietzsche

1.1 Compósitos Poliméricos: Uma Breve Introdução

Compósitos são definidos como materiais compostos constituídos por duas ou mais fases macroscópicas e com propriedades mecânicas iguais ou melhores que as de cada componente isolado. Existem diferentes combinações para a criação de compósitos. Uma das associações mais comuns, para a área de polímeros, é a mistura de fibras com polímeros termofixos. Os compósitos poliméricos são basicamente constituídos por uma fase polimérica, denominada matriz, reforçada por uma fase descontínua, constituída por reforços ou fibras. Além desses constituintes, aditivos também podem estar incorporados ao material, tais como corantes, agentes catalíticos, retardadores de chama, etc. A fabricação do compósito polimérico é o resultado do processo de cura da resina. A cura se caracteriza pela reação de polimerização da resina sobre o reforço utilizado, conferindo resistência mecânica ao material, bem como alterações físicas significativas, como variações de massa específica e viscosidade (MEYER, 1985).

A utilização desses materiais tem obtido um grande crescimento nas últimas três décadas, devido a uma série de vantagens, tais como baixa massa específica, flexibilidade estrutural, estabilidade térmica, resistência à corrosão e baixo custo de manufatura, quando comparados a materiais tradicionais, como aço e alumínio (CONTANT *et al.*, 2004). Dentre as desvantagens do uso desses materiais estão a baixa tenacidade e limitado reaproveitamento ou reciclagem.

Compósitos poliméricos são usados na fabricação de peças para diversos setores industriais, em particular para as indústrias naval, automobilística, eletrônica, construção civil e aeroespacial. Na indústria automobilística, por exemplo, o plástico reforçado é utilizado sob forma de peças de carroceria (pára-choques, pára-lamas, capôs, tetos, escadas, etc.), as quais proporcionam boa aparência e resistência à corrosão, além de resistência aos raios ultravioleta. Em construção civil e saneamento básico, o uso de compósitos poliméricos é difundido sob a forma de caixas d'água, piscinas, telhas ou placas laminadas (BANK e GENTRY, 2001). Atualmente, o emprego de materiais compósitos de matriz polimérica como reforço em estruturas nas indústrias do petróleo e aeronáutica tem se tornado uma prática industrial comum. O uso destes reforços compreende desde recobrimento de superfícies com defeitos até o reforço estrutural, com o objetivo de aumentar a vida útil de equipamentos e minimizar custos de manutenção.

A tecnologia de produção de compósitos está em franco desenvolvimento, comprovada pelo grande número de empresas atuantes. A Associação Brasileira de Materiais Compósitos possui atualmente cerca de 120 empresas associadas a esse segmento. Em 2006 o mercado brasileiro movimentou cerca de 1,6 bilhões sem impostos e gerou uma arrecadação de mais de RS 800 milhões. O Brasil consumiu 120 mil toneladas de compósitos em 2006, um aumento de 5,5 % em relação a 2005. O mercado de compósitos poliméricos, em 2007, teve um crescimento aproximado de 20%, produzindo cerca de 144 mil toneladas (ABMACO).

Os compósitos podem ser manufaturados por diversos processos tais como: autoclave, enrolamento filamentar, RTM, pultrusão etc. O processo de pultrusão, estudado neste trabalho, fundamenta-se na produção contínua de materiais de seção transversal uniforme das mais diversas geometrias: seções transversais cilíndrica, retangular e geometrias irregulares de seção transversal em forma de "I", "H", etc.

No processo de pultrusão, normalmente, fibras são impregnadas por resinas e, continuamente puxadas através de um molde metálico aquecido, onde ocorre a reação de cura. Ao entrar no molde, o sistema reacional deve ser aquecido até um determinado valor de temperatura de modo a ativar a reação. O molde geralmente é aquecido por

resistências elétricas acopladas em sua superfície e possui uma cavidade interna na qual o material é moldado. O fluxo de calor, proveniente das resistências elétricas, aquece o material e ativa a polimerização da resina (reação de cura) na cavidade do molde. As características do compósito pultrudado, com uniformidade da seção do perfil, dispersão da resina, distribuição e alinhamento das fibras resultam em compósitos de ótima qualidade (MACRUM 2004).

O principal desafio tecnológico associado a esse processo corresponde à produção de um material que atenda a expectativas estruturais desejadas, de acordo com a aplicação, tais como elevada resistência mecânica, ausência de falhas e fissuras, cura uniforme, e seja obtido com o menor custo de produção. Para atender a essas expectativas é importante conduzir o processo dentro de uma faixa operacional desejável. Dependendo do sistema reacional, as variáveis do processo, como temperatura e velocidade, possuem certas restrições de valores. Um valor de temperatura do molde muito elevado, por exemplo, associado com a energia liberada pela reação de cura pode degradar a resina. Entretanto, um valor de temperatura muito baixo pode ser insuficiente para ativar a reação. Esses aspectos são de extrema importância para evitar falhas no compósito produzido, o que seria bastante exaustivo experimentalmente o ajuste dessas variáveis.

A simulação computacional do processo de pultrusão tem sido bastante estudada principalmente com o objetivo de minimizar os esforços para ajuste experimental das variáveis. No estudo computacional normalmente propõe-se um modelo matemático, o qual seja capaz de representar a fenomenologia do processo. Para os estudos térmico e cinético da pultrusão, a modelagem matemática é constituída por equações diferenciais parciais que representam transporte de energia e de massa sobre a região limitada pelo molde. A solução dessas equações é geralmente obtida através de métodos numéricos, tais como diferenças finitas e volumes finitos. Dessa maneira, é possível obter informações sobre a distribuição de temperatura e da evolução da cura do material enquanto passa pelo molde. No entanto, a configuração do grupo de variáveis depende das restrições físicas do processo, como faixa viável de temperatura e velocidade e também, dos objetivos requeridos. Nesse contexto, é necessário um procedimento de otimização do processo a fim de se encontrar os valores operacionais que atendam a um determinado objetivo específico e que estejam dentro de uma faixa de valores aceitável.

Embora seja de extrema relevância industrial, há poucos estudos realizados sobre a otimização desse processo. O problema da otimização da pultrusão se concentra, principalmente, em minimizar o custo de energia utilizado para aquecer o conjunto reacional e aumentar o lucro de produção, bem como a qualidade do material produzido. O lucro está associado à velocidade operacional, pois quanto maior a velocidade de produção maior é a quantidade de compósito obtido. O custo depende da energia térmica utilizada para aquecer o molde. Normalmente, as variáveis ajustáveis para a otimização do processo são a velocidade operacional e a temperatura do sistema de aquecimento do molde (PAGANO *et al.*, 2006, COELHO e CALADO, 2002, SRINIVASAGUPTA *et al.*, 2003).

Atualmente, softwares baseados em CFD (*Computational Fluid Dynamics*) têm sido largamente utilizados para resolução de diversos problemas de engenharia, com predominância de fenômenos de transporte de momento, de massa e de energia. A maior parte desses códigos é baseada no método numérico de volumes finitos e é geralmente disponibilizado em softwares acoplados a ferramentas capazes de simular problemas com geometrias complexas, gerar malhas e visualizar resultados 3-D (VERSTEG e MALALASEKERA, 1995). Porém, essa tecnologia ainda é pouco explorada como ferramenta para simulação do processo de pultrusão. A utilização de CFD para simular esse processo permite a representação do equipamento de forma mais detalhada, incluindo as dimensões dos aquecedores e simulação da produção de compósitos com geometrias complexas. No entanto, a maioria dos pacotes CFD não possuem caixa de ferramentas ou subrotinas de otimização numérica, sendo usados majoritariamente para simulação de processos.

1.2 Objetivo da Dissertação

Este trabalho tem como objetivo otimizar o processo de pultrusão. Entende-se aqui por otimização minimizar o custo do processo, ou seja, reduzir o consumo de energia térmica despendida para a produção do compósito polimérico. O problema é então representado por uma função objetivo, a qual representa o custo a ser minimizado, incluindo a restrição de limite mínimo de grau de cura a ser obtido no final da reação. As variáveis de projeto ajustadas para minimização da função objetivo são os valores da

potência dos aquecedores elétricos utilizados para aquecimento do molde. Para isso, foi utilizada uma estratégia, baseada no desenvolvimento de um software cuja finalidade é comunicar algoritmos de otimização ao pacote CFD Ansys CFX™ e permitir a otimização de problemas que envolvem a simulação computacional de problemas com geometrias irregulares, como é o caso da pultrusão.

O método de otimização utilizado para minimização da função objetivo é o método de enxame de partículas, que é um algoritmo estocástico cujas principais vantagens são não necessitar do cálculo da derivada da função-objetivo e permitir a aproximação do valor extremo global da função com pouco esforço numérico (SCHWAAB, 2004). A metodologia proposta consiste na avaliação dos valores das variáveis de projeto (potência dos aquecedores), pelo algoritmo de otimização, na tentativa de encontrar a solução ótima (custo térmico mínimo). Como se trata de um problema de otimização com restrições, utiliza-se o critério de penalização com a inserção de uma função penalidade quadrática garantindo, dessa maneira, que o valor ótimo esteja situado dentro do espaço de restrições (grau de cura). O valor ótimo da função-objetivo é obtido no final das iterações do algoritmo de otimização.

Nos estudos apresentados aqui, a viabilidade dessa metodologia foi averiguada por meio de comparações dos resultados obtidos a um problema específico estudado na literatura.

1.3 Estrutura da Dissertação

A dissertação está estruturada em cinco capítulos (incluindo esta introdução) e um anexo. A seguir será feita uma breve descrição de cada um dos capítulos e apêndice, que compõem o corpo deste trabalho.

No Capítulo 2, faz-se uma revisão sobre o processo de pultrusão. Discute-se sobre as características do procedimento experimental, das variáveis envolvidas, tipos de resinas, cinética de cura, modelagem matemática, simulação e otimização do processo. No final do capítulo faz-se uma revisão e discussão sobre os principais trabalhos realizados dentre aqueles serviram como referência de pesquisa para esta dissertação.

O Capítulo 3 apresenta a metodologia utilizada para simulação e otimização do problema. Para isso, introduzem-se conceitos de CFD e as principais funcionalidades do software Ansys CFX™. Em relação à otimização do processo, apresenta-se a estrutura matemática do problema e como foi aplicado o método de enxame de partículas para minimização da função-objetivo. Finalmente, explica-se como funciona o algoritmo de conexão entre o CFX e o método de otimização utilizado.

No Capítulo 4 são apresentados os resultados da simulação e otimização do processo, por meio da metodologia apresentada no Capítulo 3. Esse capítulo tem o objetivo de aplicar a metodologia proposta para o estudo do processo de produção de um compósito polimérico com seção transversal de geometria “I” também estudado na literatura.

O Capítulo 5 apresenta as conclusões finais a respeito da metodologia aplicada e dos resultados obtidos e as sugestões futuras.

O Anexo é constituído pelo código numérico do algoritmo utilizado para simulação e otimização do processo.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS E REVISÃO DA LITERATURA

"O que sabe um peixe sobre a água em que nada a vida inteira?"

Albert Einstein

2.1 Processo de Obtenção de Compósitos Poliméricos por Pultrusão

2.1.1 Breve Introdução à Pultrusão de Compósitos Poliméricos

O uso de compósitos poliméricos tem apresentado forte crescimento nas últimas três décadas devido às diversas vantagens estruturais, tais como baixa densidade, flexibilidade estrutural, resistência à corrosão, estabilidade térmica e baixo custo de manufatura, quando comparados aos materiais tradicionais como o alumínio e madeira (DISPENZA *et al.* 2006). Um dos principais fatores responsáveis pelo crescimento da utilização desses materiais foi o desenvolvimento de processos modernos de fabricação, dentre os quais se destaca a pultrusão.

A pultrusão surgiu nos EUA na década de 50, com a construção do primeiro equipamento idealizado por Goldsworthy. A partir da sua criação, esse processo começou a ganhar mais notoriedade, devido à capacidade de produzir compósitos de seção transversal constante, altamente resistente e com elevada taxa de produção, comparada a outros processos como BMC (*bulk moulding compound*), já difundido na época. Essas características proporcionaram certo destaque comercial, propiciando o crescimento da indústria de pultrusão nos EUA e na Europa. A partir dos anos 70,

devido às suas vantagens estruturais, começaram a surgir aplicações diretas para construção de utensílios domésticos como pás e escadas. Já, nos anos 80, surgiram as primeiras aplicações na indústria civil, principalmente na construção de pontes nos EUA, assim como, estrutura de automóveis, ampliando sobremaneira o campo de utilização de materiais pultrudados (KERSTING, 2004). Em STROLLER (2005) há informações mais detalhas sobre as aplicações industriais dos compósitos pultrudados.

A matéria-prima utilizada nesse processo envolve a mistura de resina (matriz polimérica), contendo elementos aditivos, como endurecedores, corantes, solventes e catalisadores, e fibras para reforço. A pultrusão consiste em um processo contínuo automatizado para produção de compósitos, caracterizada pela tração das fibras secas impregnadas com resina e puxadas continuamente para um molde metálico aquecido, onde sofre uma reação de polimerização ou cura. Propriedades dos compósitos, como resistência, rigidez e relação tensão-deformação, dependem principalmente do tipo de reforço (VIEIRA, 2006).

As resinas poliméricas são formuladas de forma que possam reagir quimicamente quando entram no molde aquecido, liberando calor e solidificando o perfil. A resina é que determina as propriedades químicas do sistema, como resistências térmica e elétrica. Uma discussão mais detalhada sobre as principais resinas utilizadas no processo de pultrusão é apresentada na Seção 2.2.1.

De um modo geral, pode-se afirmar que a principal função das fibras é suportar os esforços mecânicos sobre o material. Uma grande variedade de fibras é usada como reforço para compósitos. Esses materiais podem ser entrelaçados em diversas direções para conferir maior resistência mecânica ao material. As características desejáveis para a maioria das fibras são elevada resistência mecânica e baixa massa específica. O sistema de fibra utilizado na fabricação dos compósitos pultrudados consiste em diferentes tipos e arquiteturas: fibras na forma contínua (manta), *roving*, e véu, conforme ilustrado na Figura 2.1.

Na pultrusão, as fibras em *roving* são alinhadas conferindo resistência na direção longitudinal. As mantas são utilizadas para aumentar a resistência e a rigidez transversal do material e, também, têm como função proteger as fibras de danos em sua superfície e

auxiliar a adesão com a matriz polimérica. O véu é usado para aumentar a qualidade da superfície do perfil pultrudado, conferindo uma região rica em resina. Normalmente, as fibras mais utilizadas para o processo de pultrusão são feitas de vidro, carbono e poliéster (KERSTING, 2004).

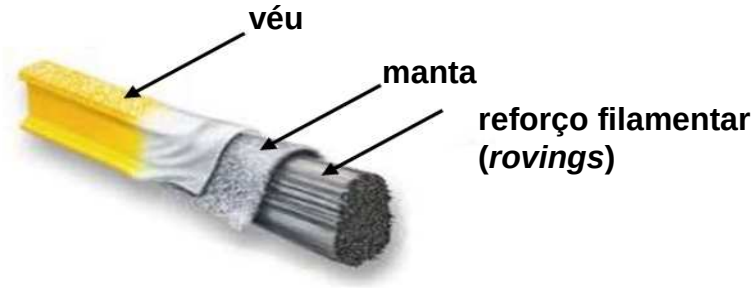


Figura 2.1. Estrutura do compósito polimérico pultrudado.

2.1.2 Descrição do Processo de Pultrusão

O equipamento de pultrusão se diferencia, principalmente, quanto ao processo de saturação ou impregnação da resina sobre o reforço. A pultrusão por injeção (*inject pultrusion*), Figura 2.2 **(a)**, consiste na injeção, por pressurização, da resina diretamente na cavidade do molde. Já no sistema típico de banho aberto, Figura 2.2 **(b)**, o reforço é saturado em um tanque de resina, sem aplicação de gradiente de pressão.

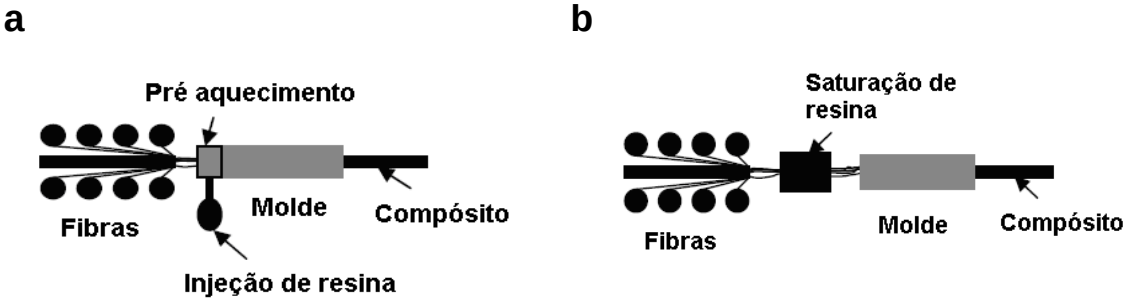


Figura 2.2.(a) Pultrusão por injeção, **(b)** Pultrusão em banho aberto.

De acordo com VOORAKARANAM *et al*. (2003), a pultrusão por injeção favorece a impregnação da resina no reforço, devido ao gradiente de pressão aplicado, além de reduzir a emissão de produtos voláteis. Trabalhos mais recentes (SRINIVASAGUPTA *et al.*, 2002, SRINIVASAGUPTA e KARDOS, 2003, e LIU 2003) têm focado em estudos computacionais relativos à pultrusão por injeção. Apesar

disso, o método de banho aberto é ainda o mais tradicionalmente utilizado industrialmente. Devido à sua maior aplicabilidade, esta dissertação estudará os aspectos concernentes a esse tipo de equipamento.

A etapa inicial do processo consiste no puxamento contínuo das fibras, organizadas em uma série de rolos e carretéis, até um tanque onde a resina é impregnada na estrutura da fibra, conforme mostrado na Figura 2.3.

Figura 2.3 Tanque aberto de saturação da resina.

A pré conformação é geralmente realizada após a impregnação, retirando o excesso de resina e fazendo com que as fibras se movam em direção ao molde. Sistemas de guias permitem posicionar as fibras, já impregnadas, de modo que entrem de maneira organizada para serem moldadas, conforme mostra a Figura 2.4.

Figura 2.4. Sistema de guias que direcionam as fibras para o molde.

O molde de pultrusão, Figura 2.5, normalmente é constituído por uma estrutura metálica com elevada condutividade térmica, como aço-carbono, e possui uma cavidade interna por onde o material é moldado.

Figura 2.5. Moldes de pultrusão com cavidades de diferentes geometrias.

À medida que o material é puxado através da cavidade do molde aquecido, a resina impregnada sofre uma reação de polimerização ou reação de cura, que se caracteriza por ser exotérmica. Geralmente, resistências elétricas são utilizadas como fonte de energia térmica para aquecer o molde e ativar a reação de cura, porém o sistema de aquecimento também pode ser baseado a vapor, banho de óleo, etc., e ainda possuir seções de pré-aquecimento e resfriamento (SRINIVASAGUPTA *et al.*, 2003). De acordo com MEYER (1985), o aquecimento do molde provavelmente é o parâmetro de controle mais crítico do processo, pois é onde se regula a taxa de reação de cura e o ponto de máxima liberação de calor (temperatura máxima de reação ou pico exotérmico).

Conforme observado na Figura 2.5, a cavidade do molde pode apresentar seções transversais de diferentes geometrias, projetadas para moldar o material compósito. Dessa maneira, o compósito pultrudado pode adquirir diversas formas e tamanhos, como representado na Figura 2.6. A fase final do equipamento de pultrusão consiste em um sistema de tração, o qual puxa continuamente o compósito, já curado, até uma seção, estação final de corte, onde é seccionado em um determinado comprimento. A Figura 2.7 ilustra o esquema básico de funcionamento da máquina de pultrusão.

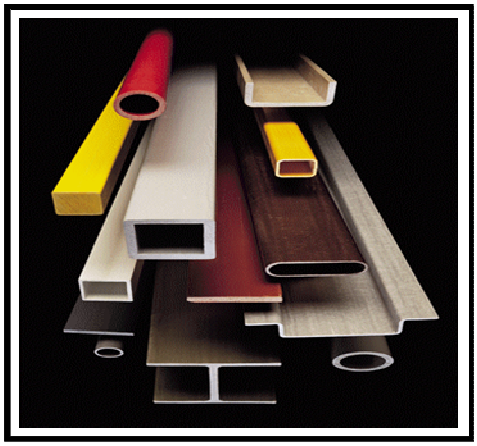


Figura 2.6. Seções transversais típicas de compósitos pultrudados.

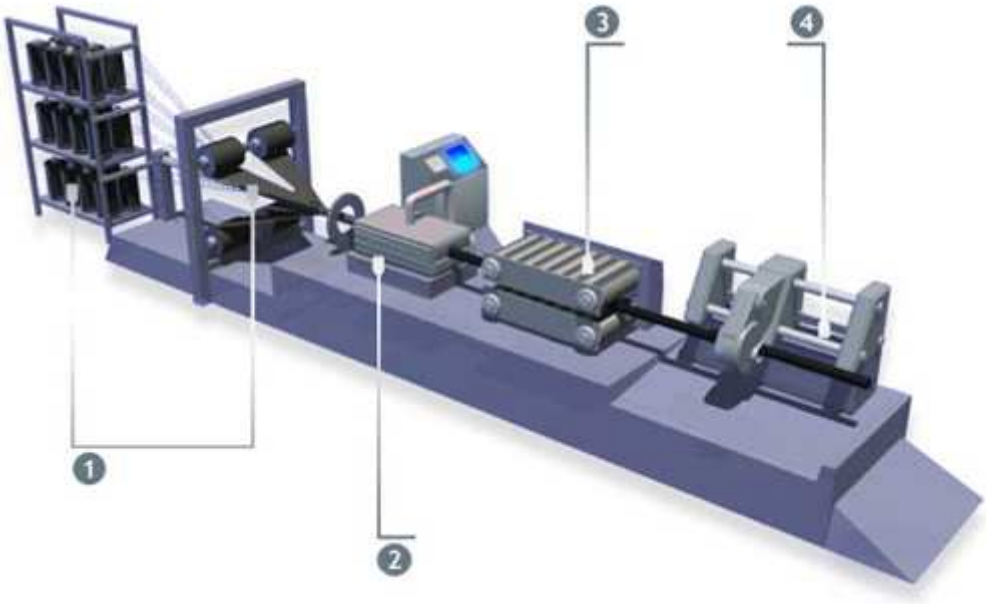


Figura 2.7. Principais etapas do processo de pultrusão [1] fibras, [2] molde, [3] sistema de tração, [4] sistema de corte.

2.1.3 Considerações sobre o Processo de Pultrusão

Embora o processo de pultrusão seja relativamente simples, a fabricação de compósitos pultrudados não é tarefa fácil, pois requer certo conhecimento da transferência de calor e da cinética de cura que ocorrem dentro do molde. Apesar das inúmeras vantagens, o uso em larga escala de compósitos poliméricos pultrudados ainda

prescinde da resolução de algumas deficiências, sobretudo associadas a eventos térmicos (PACHINOS, 2003).

Os pesquisadores da área interpretam a velocidade de operação e a temperatura como as variáveis mais representativas para o estudo do processo. A velocidade é geralmente configurada em torno de um intervalo entre 0,1 a 1,0 m/min; no entanto esse intervalo varia de acordo com o sistema reacional. Valores baixos de velocidade requerem pouca energia para curar o material, porém resultam uma baixa taxa de produção de compósito polimérico. Em contrapartida, valores de velocidade muito elevados podem ser insuficientes para a cura completa da resina dentro do molde resultando em uma maior taxa de produção de material. Porém, quanto maior o valor da velocidade maior deve ser a taxa de calor cedida para curar a resina e, consequentemente, maior é o valor da temperatura que também não pode exceder o valor limite de degradação da resina. Portanto, é importante evitar o superaquecimento do material, decorrente em sua maior parte do calor liberado pela reação exotérmica de cura da resina, e também devido à baixa condutividade do compósito polimérico, retendo calor (BAI *et al*, 2008). Por outro lado, para uma dada resina, a reação de polimerização só é ativada quando a temperatura atinge um valor mínimo. É nesse contexto que a temperatura e a velocidade estão intimamente associadas e devem ser configuradas com valores dentro de um espaço de restrições, conforme esquematizado na Figura 2.8.

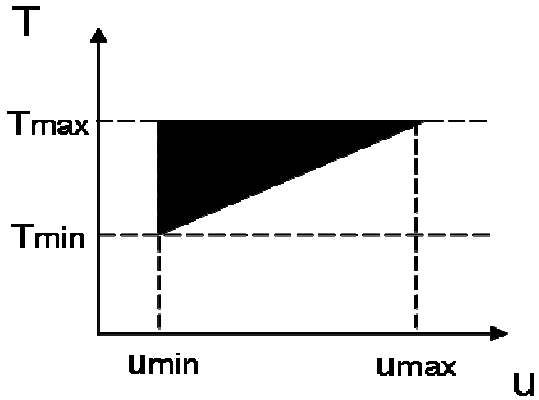


Figura 2.8. Espaço viável, representado pela região escura, delimitado pela velocidade (u) e temperatura (T).

A configuração inadequada dos valores da temperatura e da velocidade pode comprometer a qualidade final do compósito polimérico, resultando na fabricação de

um material defeituoso. A condutividade térmica do compósito, normalmente baixa, pode fazer com que a superfície do mesmo cure mais rápido do que o interior causando o aprisionamento de gases voláteis e um alto gradiente de temperatura. Esse último pode ser responsável por pontos de fratura do material sob tensão (AMORIM, 2007). Os defeitos mais relevantes, os quais interferem na estrutura, são formação de bolhas, trincas, fissuras e cura insuficiente. Além da influência da temperatura e da velocidade, esses defeitos são decorrentes de diversos fatores, como fração volumétrica da fibra, tipo de resina e aditivos (ALMEIDA, 2004).

Para prever ou evitar esses fenômenos, a simulação e a otimização computacionais do processo são ferramentas auxiliares com intuito de substituir a atividade experimental exaustiva. Nesse sentido, o conhecimento sobre a reação de cura é fundamental para se propor um modelo matemático condizente com o processo real. Nas próximas seções, discute-se de forma mais detalhada a cinética de reação de cura de resinas e os modelos matemáticos do processo.

2.2 Reação de Cura de Resinas

2.2.1 Resinas Utilizadas para o Processo de Pultrusão

O método mais usual de se agrupar os polímeros é de acordo com os seus comportamentos térmico e mecânico. Segundo essa classificação, as principais categorias de polímeros são os termoplásticos, que são moldáveis quando aquecidos, termorrígidos, que não amolecem com o aumento da temperatura, e elastômeros ou borrachas. O fato de um polímero estar enquadrado na classe dos termoplásticos ou termorrígidos está intimamente relacionado com a funcionalidade do monômero, isto é, com o número de ligações covalentes que cada uma de suas moléculas pode estabelecer (MCCRUM *et al.*, 1999).

Polímeros termoplásticos, como o acrílico, nylon e poliestireno, são caracterizados por possuírem ligações químicas fracas (van der Waals) entre as cadeias, que podem ser facilmente rompidas com a introdução de energia. Dessa forma, quando tais materiais são aquecidos, as ligações de van der Waals são quebradas, permitindo

que haja maior facilidade para movimentação de cadeias poliméricas. A capacidade das cadeias de fluírem com o aumento da temperatura garante a esses materiais suas características fundamentais de fácil reprocessabilidade e de serem recicláveis. Alguns trabalhos mais recentes, como KERBIRIOU e FRIEDRICH, (1999), KIM *et al.(* 2000) e MEHRDAD (1997), abordam a pultrusão de resinas termoplásticas, entretanto, as resinas termorrígidas são mais usuais.

As resinas termorrígidas apresentam cadeias conectadas entre si por ramificações. Dessa maneira, ligações químicas covalentes são responsáveis pelas ligações cruzadas, cujo rompimento se dá somente com a introdução de elevada quantidade de energia, com a conseqüente degradação do polímero. Sendo assim, tais materiais são de difícil reciclagem após terem adquirido sua forma final. Por esses motivos, as resinas termorrígidas são preferencialmente utilizadas para fabricação de compósitos poliméricos. Exemplos desse tipo de material englobam as resinas epoxídicas, fenólicas e poliésteres. Este trabalho aborda apenas estudos relativos à cinética de cura de resinas epóxi e vinil-éster, e, por isso, uma breve discussão sobre as propriedades desses materiais é apresentada nos parágrafos seguintes.

As resinas epóxi são extensivamente utilizadas como plásticos de engenharia. Esse tipo de resina se caracteriza por possuir uma cadeia longa, constituída de grupos epoxídicos em suas extremidades, formados por um átomo de oxigênio ligado a dois átomos de carbono, conforme ilustrado na Figura 2.9:

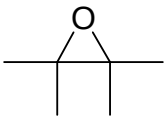


Figura 2.9. Fórmula estrutural do grupo epoxídico.

A maior desvantagem desse tipo de resina é a fragilidade, devido à estrutura altamente interligada. Há algumas maneiras de aumentar a flexibilidade do material como, por exemplo, adicionar agentes de cura capazes de se ligarem ao grupo epóxi. Os agentes de cura mais comuns são as aminas. Dentre as vantagens para utilização da resina epóxi tem-se a alta resistência mecânica, resistência à umidade e a ambientes corrosivos e alta condutividade térmica (PARENTE, 2006).

As resinas éster-vinílicas são polímeros insaturados, de elevada massa molar, geralmente sólidos na temperatura ambiente, tornando-se líquidas depois de diluídas. Essas resinas são produtos da reação de uma resina epóxi com um ácido carboxílico insaturado, como ácido metacrílico (CALADO e ADVANI, 2000). A estrutura básica das resinas éster-vinílicas é ilustrada na Figura 2.10:

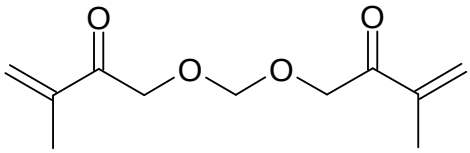


Figura 2.10. Fórmula estrutural da resina éster-vinílica.

As insaturações podem ser facilmente rompidas por radicais livres, os quais agem como iniciadores da reação em cadeia. A densidade das insaturações possui grande influência na reatividade, assim como a quantidade de grupos ácidos nas extremidades das moléculas. A reação de reticulação é altamente exotérmica e pode ser controlada ajustando o ambiente de cura, que é realizado conhecendo-se a transferência de calor que ocorre durante o processo e a cinética de cura. As principais características das resinas éster-vinílicas são elevada resistência química, resistência a desgastes por ações atmosféricas, boa adesão com fibras de vidro e baixo custo (CARVALHO, 2001).

2.2.2 Discussão Sobre Cinética de Cura de Resinas Termorrígidas

A polimerização é uma reação em que moléculas menores (monômeros) se combinam quimicamente, por valências principais, para formar moléculas longas e ramificadas. A polimerização ou cura de resinas termorrígidas envolve modificações do estado inicial da resina em forma líquida, com baixa massa molar. Conforme a polimerização da resina acontece, calor é liberado pela reação, contribuindo para o aumento da temperatura média do material (STROGER, 2005). O mecanismo de cura de resinas termorrígidas é bastante complexo devido aos fenômenos cinéticos e mudanças de propriedades físicas que ocorrem durante o processo. A literatura é ambígua ao se tratar de modelos cinéticos, sendo encontradas duas abordagens distintas: fenomenológica (nível macroscópico) e mecanicista (nível microscópico). De acordo com CALADO e ADVANI (2000), a abordagem fenomenológica é relacionada aos

aspectos macroscópicos da reação, enquanto a abordagem mecanicista sugere uma cinética a qual considera cada reação elementar que ocorre durante o processo. Raramente os modelos mecanicistas são utilizados para modelar a cinética de cura de resinas termorrígidas. BATCH *et al.* (1993) descreve de forma mais detalhada um exemplo de modelagem do processo usando essa abordagem.

Os modelos macroscópicos, tratados aqui, são empíricos e por isso são desprovidos de uma descrição clara das reações elementares que ocorrem durante a cura. Esses modelos são baseados na seguinte equação (PRICE *et al*. 1979, MA *et. al.* 1985):

$$r_a = K(T)\, f(\alpha) \qquad \textbf{(2.1)}$$

em que r_a é a taxa cinética, T é a temperatura, α o grau de cura e $f(\alpha)$ é uma função que representa o acúmulo de resina reagida, a qual é determinada para cada sistema resina-fibra. $K(T)$ é a constante reacional definida pela equação de Arrhenius:

$$K(T) = K_o e^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} \qquad \textbf{(2.2)}$$

sendo K_o o fator pré-exponencial, R a constante dos gases e E_a a energia de ativação.

O grau de cura é definido como a conversão da reação de cura expressa no Quadro 2.1:

Quadro 2.1.Definição do grau de cura.

$$\frac{dCa}{dt} = -r_a'$$
$$Ca = Ca_o(1-\alpha)$$
$$\frac{dCa}{dt} = -Ca_o \frac{d\alpha}{dt} = -r_a' \therefore$$
$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{r_a'}{Ca_o} = r_a$$

A literatura propõe algumas funções $f(\alpha)$, sendo as mais comuns.

$$f(\alpha) = (1-\alpha)^n \qquad \textbf{(2.3)}$$

correspondendo a uma reação de ordem n. Essa equação, geralmente, é utilizada para representar a cinética de resinas epóxi, enquanto a Equação 2.4 é usada para representar a cinética das resinas éster-vinílicas.`

$$f(\alpha) = (1-K'(T)\alpha^m)(1-\alpha)^n \qquad \textbf{(2.4)}$$

que corresponde a uma reação de cura autocatalítca, em que $(m+n)$ representa a ordem da reação e K' é descrita pela equação de Arrhenius.

A variação de $f(\alpha)$ depende do tipo de resina e das condições experimentais. A literatura não é unânime quanto aos valores dos parâmetros cinéticos, até mesmo para sistemas reacionais similares. Uma das maneiras de validar os modelos cinéticos é medir experimentalmente o grau de cura como função do tempo e da temperatura (CARLONE *et al*,. 2006). Por meio de ensaios, como tempo de gel, viscosidade, análise termogravimétrica -TGA, é possível verificar o comportamento de resinas mediante aquecimento e obter informações como temperatura de cura. A técnica mais empregada para medição dos parâmetros cinéticos é o calorímetro diferencial de varredura (DSC, *Differenttial Scaning Calorimeter*), o qual consiste no monitoramento do grau de cura pelo calor gerado durante a reação. A suposição de que o calor gerado pela reação química é proporcional à extensão da cura, permite determinar os parâmetros cinéticos a partir da análise das curvas de DSC obtidas nos modos isotérmicos ou não isotérmicos. HAN *et al.* (1986) e LIANG *et al.* (2005) realizaram esses experimentos em seus trabalhos para obter os valores dos parâmetros cinéticos dos modelos propostos para resinas poliésteres e epóxi e aplicaram à modelagem do processo de pultrusão. Os ensaios confirmaram que a variação da fração volumétrica da fibra tem influência sobre os parâmetros cinéticos. Os autores também estudaram os efeitos da variação da dosagem de catalisadores e iniciadores de reação sobre os parâmetros cinéticos, e revelaram a importância desses parâmetros para o controle do processo de cura.

Como a reação de cura de resinas termorrígidas possui caráter exotérmico, os modelos mais usuais consideram que o grau de cura pode ser relacionado ao calor (entalpia) liberado durante a reação. Essa abordagem tem sido utilizada pela grande maioria dos trabalhos relacionados ao estudo da cinética de cura. Logo, a seguinte relação é utilizada:

$$\alpha \cong \frac{\Delta H(t)}{\Delta H_T} \qquad \textbf{(2.5)}$$

em que $\Delta H(t)$ é a entalpia em um instante específico da reação e ΔH_T é a entalpia total (ou calor total de reação) no final da reação de cura, ou seja, quando $\alpha = \alpha_{máx}$ (grau de cura máximo). A taxa de reação pode, então, ser representada pela equação seguinte:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{1}{\Delta H_T}\frac{dH(t)}{dt} = r_a \qquad \textbf{(2.6)}$$

Pelo uso dessa equação supõe-se que a taxa de cura varia proporcionalmente à taxa de calor liberado pela reação, ou seja, quanto maior a taxa de calor, mais veloz é a reação de cura (CALADO E ADVANI, 2000). Essa associação é valiosa para descrever como os efeitos térmicos e cinéticos estão relacionados. A seguir, é apresentado o modelo matemático que descreve os fenômenos que ocorrem durante a passagem do material dentro do molde.

2.3 Modelo Matemático do Processo de Pultrusão

A condução experimental do processo de pultrusão apresenta uma série de dificuldades que podem ser resolvidas mediante um estudo que requer conhecimentos sobre os fenômenos de transporte envolvidos, o que implica recorrer a modelos matemáticos para prever o comportamento físico-químico do processo. Para tais estudos, a região delimitada pelo molde é, normalmente, considerada a parte principal do processo, pois é o local onde ocorre a maior parte da reação de cura e a transferência de calor, conforme representado na Figura 2.11.

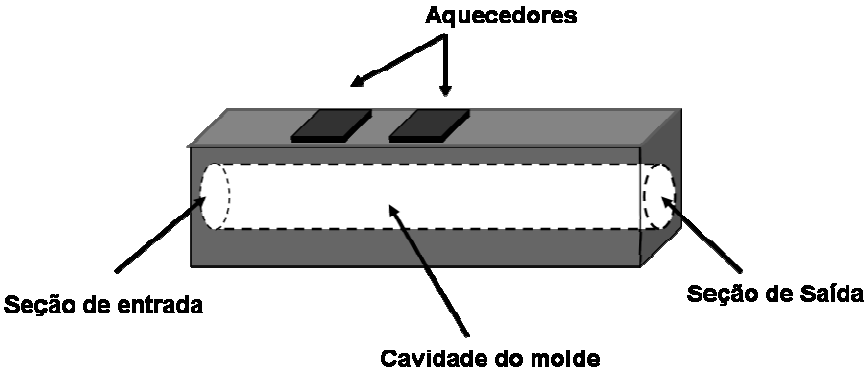


Figura 2.11. Representação de um molde de pultrusão com cavidade cilíndrica.

A equação do balanço de energia do compósito é obtida aplicando-se a lei da conservação de energia a um elemento diferencial de volume (BIRD, 2006):

$$\nabla(\rho_c Cp_c uT) + \frac{d}{dt}(\rho_c C_{p_c} T) = \nabla(k_c \nabla T) + \Gamma \qquad \textbf{(2.7)}$$

em que ρ_c é a massa específica do compósito, C_{p_c} a capacidade térmica do compósito, u a velocidade, T a temperatura, k_c a condutividade térmica do compósito e Γ o termo de geração de energia. O primeiro termo corresponde ao transporte de energia pelo mecanismo convectivo, o segundo termo corresponde ao acúmulo de energia e o terceiro representa o transporte de energia por condução térmica. O termo Γ representa a geração de energia em decorrência da reação exotérmica de cura. Com isso, a Equação 2.7 está relacionada à taxa de produção de compósito pela seguinte relação:

$$\Gamma = (1-\phi)Ca_o \frac{dH(t)}{dt} \qquad \textbf{(2.8)}$$

em que C_{ao} é a concentração inicial de resina.

De acordo com a Equação 2.8, sabe-se que a variação de entalpia do meio reacional é equivalente à variação de grau de cura:

$$\Gamma = Ca_o \frac{dH(t)}{dt} = (1-\phi)Ca_o \Delta H_T r_a \qquad \textbf{(2.9)}$$

em que ϕ é a fração volumétrica de fibra definida na Equação 2.11.

O balanço de energia correspondente somente ao molde é descrito pela equação seguinte:

$$\nabla \cdot \left(k \nabla T \right) = q \qquad \textbf{(2.10)}$$

em que q é a fonte de calor e k a condutividade térmica do molde.

As propriedades físicas do compósito, como massa específica, condutividade térmica e calor específico, variam diretamente com a temperatura e indiretamente com o grau de cura e com o teor de resina do compósito.

A definição de fração volumétrica de fibra no compósito é dada pela Equação 2.11.

$$\phi = \frac{V_f}{V_f + V_r} \qquad \textbf{(2.11)}$$

em que o termo V representa o volume e os índices r e f referem-se à resina e fibra, respectivamente. Há diversas regras de mistura para calcular os valores das propriedades do material compósito de acordo com as propriedades da fibra e da resina. Logicamente, o equacionamento dessas variáveis é bastante relevante para a obtenção de um modelo razoável, principalmente quando se consideram esses termos como dependentes da evolução da temperatura e do grau de cura. A regra de mistura mais comum, encontrada nos trabalhos de modelagem e simulação desse processo como em CARLONE *et al.* (2003), SANTIAGO *et al.* (2003) e PAGANO *et al.* (2008), é representada pelas seguintes equações:

$$\rho_c = \phi_r \rho_r + \phi_f \rho_f \qquad \textbf{(2.12)}$$

$$\frac{1}{k_c} = \phi_r \frac{1}{k_r} + \phi_f \frac{1}{k_f} \qquad \textbf{(2.13)}$$

$$\rho_c Cp_c = \rho_r \phi_r Cp_r + \rho_f \phi_f Cp_f \qquad \textbf{(2.14)}$$

em que o índice c corresponde ao material compósito, r à resina e f à fibra.

A modelagem matemática do processo de pultrusão, considerando o fenômeno de transferência de calor e cinética de cura é resumida no Quadro 2.2:

Quadro 2.2. Resumo das equações que representam o modelo matemático.

Transferência de calor no compósito:

$$\nabla(\rho_c Cp_c uT) + \frac{d}{dt}(\rho_c C_{p_c} T) = \nabla(k_c \nabla T) + Ca_o (1-\phi)\Delta H_T r_a$$

Transferência de calor no molde:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = q$$

Cinética de cura:

$$r_a = K(T) f(\alpha) \qquad f(\alpha) = (1 - K'(T)\alpha^m)(1-\alpha)^n$$

Propriedades físicas:

$$\rho_c = \phi_r \rho_r + \phi_f \rho_f$$

$$\frac{1}{k_c} = \phi_r \frac{1}{k_r} + \phi_f \frac{1}{k_f}$$

$$\rho_c Cp_c = \rho_r \phi_r Cp_r + \rho_f \phi_f Cp_f$$

2.4 Simulação Computacional do Processo de Pultrusão

Ao longo dos últimos 30 anos, diversos pesquisadores têm contribuído para o avanço dos estudos referentes à simulação do processo de pultrusão. Os trabalhos referentes a esse assunto têm seguido uma linha de análise a qual se diferencia basicamente em três aspectos: **(i)** modelagem matemática, **(ii)** equação da cinética de cura e **(iii)** metodologia numérica. A maioria desses trabalhos visa obter, por meio da simulação computacional, o comportamento térmico e cinético do processo, ou seja, analisar como ocorre a transferência de calor durante a reação e, consequentemente, como varia a temperatura e o grau de cura.

A tarefa do método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. Existem várias técnicas numéricas de solução e suas diferenças estão associadas à forma com que as derivadas e termos não lineares são aproximados e ao procedimento de discretização. Os métodos tradicionais para resolução numérica de equações diferenciais parciais são os métodos de diferenças finitas (MDF), de volumes finitos (MVF) e de elementos finitos (MEF). Esses métodos têm sido aplicados para resolução numérica das equações que descrevem o processo de pultrusão.

Os primeiros trabalhos sobre modelagem e simulação desse processo buscam, basicamente, obter soluções numéricas para o sistema de equações diferenciais, e comparar a solução a resultados experimentais. Em virtude da dificuldade de se obter soluções numéricas para um sistema 3-D com geração de calor, é frequente a adoção de algumas simplificações do modelo matemático. PRICE *et al*. (1979) foi um dos primeiros pesquisadores a utilizar ferramentas numéricas para análise do comportamento térmico e cinético do processo. Nesse trabalho, foi proposto um modelo empírico de primeira ordem para descrever a cinética de cura de resina epóxi e aplicou-se o método de diferenças finitas para resolver o correspondente sistema de equações diferenciais.

Os resultados numéricos obtidos por algumas contribuições (ALYWARD *et al*. 1985 e LANGAN 1986) indicam a predominância da condução de calor na direção

transversal e transporte convectivo de calor na direção de tração da fibra. Isso implica na suposição de que um modelo 2-D é razoável para descrever o processo de fabricação de compósitos com seção transversal simétrica. Nesse contexto, a equação original do transporte de calor, Equação 2.7, em regime estacionário, é simplificada da seguinte maneira:

Transporte de calor 3D:

$$\nabla(\rho_c Cp_c uT) + \frac{d}{dt}(\rho_c C_{p_c} T) = \nabla(k_c \nabla T) + \Gamma \qquad \textbf{(2.7)}$$

para:

$$\frac{d}{dx}\left(\rho_c Cp_c u_x T\right) = \frac{d}{dy}\left(k_c \frac{dT}{dy}\right) + \Gamma \qquad \textbf{(2.15)}$$

A Equação 2.15 considera a predominância da condução de calor na direção transversal (y) e transporte convectivo de calor na direção de tração da fibra (x):

Os resultados obtidos por esses autores (PRICE *et al*. 1979, ALYWARD *et al*., 1985 e LANGAN 1986) indicam que para a simulação computacional da pultrusão de compósitos com geometrias simétricas, vários termos da equação 3D da energia podem ser desconsiderados e uma equação mais simples, como a Equação 2.15, pode ser usada para representar o processo.

Paralelamente a esses trabalhos, TULIG (1985) incorporou em seus estudos a análise de diferentes condições de contorno, como a suposição de um molde adiabático ou com troca de calor com o ambiente. Os resultados evidenciaram que uma parcela considerável de energia pode ser conservada por meio do isolamento da superfície do molde. Já HAN *et al.* (1986) fizeram um estudo mais detalhado do processo, envolvendo tanto ensaios experimentais como procedimentos computacionais. Nesse trabalho, foi proposto um modelo empírico de segunda ordem para a reação de cura da resina poliéster reforçada com fibra de vidro. A modelagem matemática foi descrita por

equações de transporte de energia e de massa, resolvidas pelo método de diferenças finitas, em um volume de controle limitado somente pelo compósito de geometria cilíndrica:

$$\left(u_x Cp_c u_x\right)\frac{dT}{dx} = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(k_c \frac{dT}{dr}\right) + Ca_o(1-\phi)\Delta H_T r_a \qquad \textbf{(2.16)}$$

$$u_x \frac{d\alpha}{dx} = r_a \qquad \textbf{(2.17)}$$

A Equação 2.17 vem da seguinte dedução:

$$\frac{d\alpha}{dt} = u_x \frac{d\alpha}{dx} = r_a \quad \text{pois } u_x = xt \text{ em processos estacionários.}$$

Esse modelo considera as seguintes condições de contorno:

$$T(x=0) = T_o$$
$$T(r=R) = T_W$$
$$\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{r=0} = 0$$
$$\alpha(x=0) = 0 \qquad \textbf{(2.18)}$$

A Figura 2.12 esquematiza o problema estudado nesse trabalho. Considera-se que o material entra no molde a uma temperatura conhecida, T_o, e grau de cura nulo, $\alpha = 0$. De acordo com a metodologia adotada, em vez de se aplicar as condições de contorno na superfície do molde, considera-se que a temperatura na superfície externa e na interface de contato com o compósito são iguais, devido à elevada condutividade térmica do molde metálico: Com isso, é utilizada uma condição de contorno fundamentada na suposição do conhecimento, *a priori*, da distribuição de temperatura na interface de contato, representada por uma função dependente do comprimento do molde: $T_w = T(x)$.

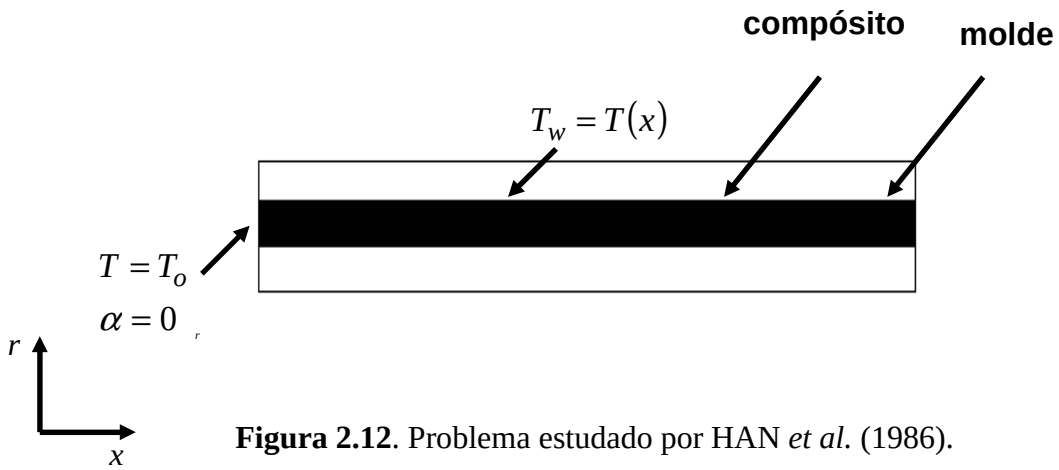


Figura 2.12. Problema estudado por HAN *et al.* (1986).

Os trabalhos subsequentes (TRIVISANO *et al.* 1990, BATCH *et al*. 1993) derivam dessa mesma abordagem utilizada por HAN *et al.* (1986). No entanto, a suposição do conhecimento do perfil térmico da interface de contato entre o compósito e o molde não tem aplicação prática porque na realidade a informação mais relevante para o processo é como ajustar o nível de aquecimento do molde. Entretanto, a maioria dos estudos da simulação computacional desse processo ignora esse fato e se concentra mais especificamente em estudar diferentes maneiras de resolver o modelo de equações do modelo matemático. É o caso de SANTIAGO *et al.* (2003), que utilizaram o método numérico de elementos finitos para solução do sistema das EDPs.

No trabalho de SANTIAGO *et al.* (2003) a distribuição de temperatura do compósito com seção transversal cilíndrica foi comparada a resultados experimentais, medidos por HUNTER *et al*. (1995). A metodologia aplicada mostrou-se eficaz para simulação do processo devido à proximidade dos resultados teóricos aos resultados experimentais. Outros autores também aplicaram o método de elementos finitos como MOSCHIAR *et al*. (1996), KIN *et al*. (1997), ROUX *et al*. (1998), SURATNO *et al*. (1998) e PANTALEAO *et al*. (2002). Já VOORAKANAM *et al.* (1998), RAPER *et al.* (1999) e LIU (2001) realizaram estudos sobre a aplicação do método de volumes finitos para solução do sistema de equações.

Mesmo percorrendo caminhos diferentes, esses trabalhos lançaram alicerces sobre os quais é possível assimilar as características gerais do processo. A Figura 2.1.3 ilustra o perfil de temperatura e do grau de cura do compósito em função da direção da velocidade. É possível observar que a temperatura no centro do material compósito se

eleva até um determinado valor, ao passo que pode, até mesmo, superar o valor da própria temperatura da superfície do molde em virtude da energia térmica desprendida da reação de cura exotérmica.

Embora os trabalhos citados anteriormente tenham contribuído para a análise teórica do processo, esses se restringem à simulação de processos de fabricação de compósitos com geometrias regulares, ou seja, em coordenadas ortogonais: cilíndrica e retangular. A construção de malhas irregulares é um processo muito mais dispendioso, pois requer métodos de discretização mais sofisticados como malhas não estruturadas (MALISKA, 2004). Devido a isso, é crescente a aplicação de pacotes computacionais baseados em métodos de elementos finitos e volumes finitos para simulação do processo de pultrusão. A maior vantagem desses pacotes é a facilidade de construção de geometrias complexas e geração de malhas não estruturadas de uma forma relativamente mais simples e rápida, quando comparada à discretização das equações por métodos numéricos sem a utilização de softwares específicos. Tais ferramentas têm sido utilizadas por alguns pesquisadores da área, como LIU e HILLIER (1999), JOSHI e LAN, (2001), LIANG *et al*. (2005).

LIU e HILLIER (1999) simularam a pultrusão de um compósito de fibra de vidro e resina ester-vinílica de seção transversal com formato “I”. Nesse problema, o molde é aquecido por cartuchos elétricos posicionados em diferentes regiões do molde. A utilização do software LUSAS, baseado no método de elementos finitos, permitiu desenhar detalhadamente a estrutura do molde, bem como a posição dos aquecedores. Os autores conseguiram obter resultados de simulação bem próximos a resultados experimentais, no que diz respeito ao perfil térmico do grau de cura do material. O uso do pacote computacional, além de permitir a visualização dos resultados em um maior nível de detalhamento, permitiu simular a produção de um compósito de geometria irregular.

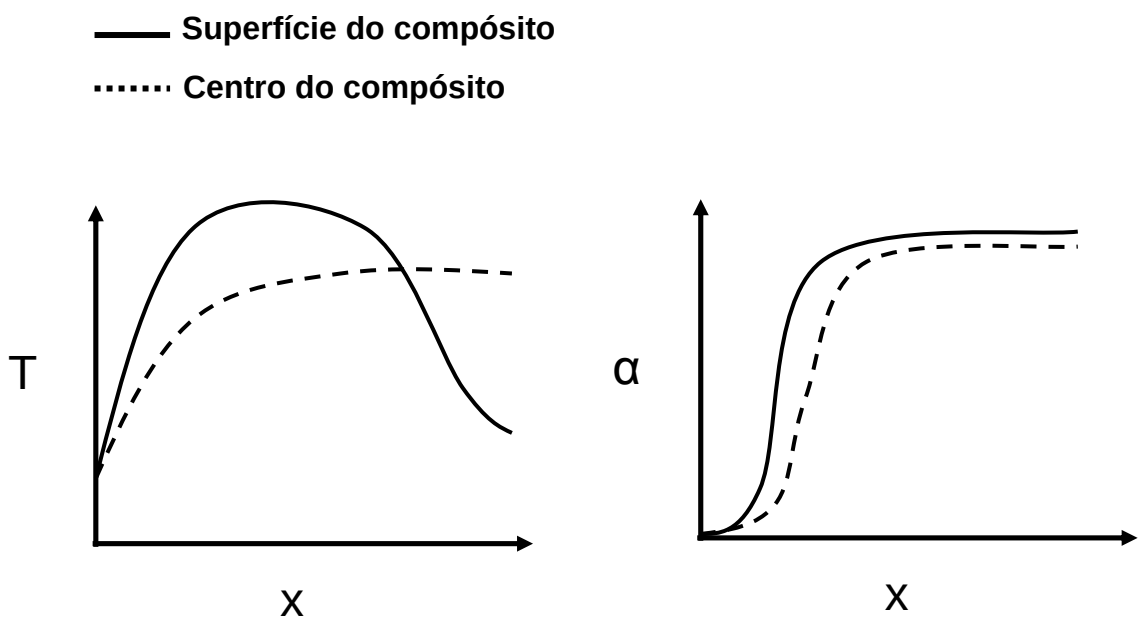


Figura 2.13. Perfil térmico e cinético do processo de pultrusão em função da direção de puxamento (x) de tração da fibra.

JOSHI e LAN (2001) integraram o software LUSAS a códigos escritos em FORTRAN, com objetivo de incluir o efeito de contração da resina devido à variação de temperatura. Já LIANG *et al*. (2005) utilizaram o software ABAQUS, baseado no método de volumes finitos, para simulação do processo de produção de um compósito de geometria irregular.

Esses trabalhos mais recentes permitiram um grande avanço no estudo computacional desse processo devido à maior sofisticação das ferramentas computacionais utilizadas. Com a utilização de softwares mais específicos para calcular o transporte de calor e massa, é possível simular processos mais complexos que requerem maior esforço numérico, além de facilitar o estudo da otimização do processo.

2.5 Estudo Computacional da Otimização do Processo de Pultrusão

2.5.1 Introdução à Otimização

Os poucos trabalhos sobre a otimização da pultrusão buscam formular metodologias com objetivos de encontrar uma configuração térmica do molde de

pultrusão (perfil de temperatura) equivalente a condições ótimas de processo, como minimizar o custo de energia ou melhorar a qualidade do produto final.

A otimização de um processo pode ser efetuada em diferentes níveis dentro de uma empresa, desde uma combinação complexa de plantas e unidades de suprimentos, passando por plantas individuais e combinações de unidades e equipamentos (HIMMELBLAU, 1989). Uma vez que a estrutura do problema e o modelo do processo estão definidos, deve-se determinar qual será o método de solução, bem como definir qual algoritmo de otimização deve ser utilizado.

Em notação matemática, otimização é a minimização ou maximização de uma função objetivo sujeita ou não a restrições sobre suas variáveis:

$$\min_{x \in R^n} S(x) \qquad \textbf{(2.19)}$$

$$\text{sujeito a:} \qquad h_j(x) = 0,\ j = 1,2,\ldots,m$$

$$g_j(x) \leq 0,\ j = 1,2,\ldots,p$$

sendo $S(x)$ uma função objetivo, e $h(x)$ e $g(x)$ as restrições do problema; m e p são o número de restrições de igualdade e desigualdade.

Os algoritmos de otimização são iterativos; ou seja, são iniciados por meio da estimativa das variáveis de decisão, seguida do cálculo da função objetivo e então por uma sequência de estimativas até se encontrar a solução ótima (valor extremo da função objetivo). A estratégia usada para se mover de uma iteração para outra se diferencia de um algoritmo para outro. Muitas estratégias usam o valor da função objetivo, restrições e possivelmente primeira e segunda derivadas da função objetivo. Um método é chamado de determinístico se for possível prever todos os seus passos conhecendo seu ponto de partida. Tais métodos empregam a derivada da função para encontrar o valor ótimo e sempre resulta no mesmo valor para a mesma estimativa inicial. Em contrapartida, nos métodos estocásticos, várias estimativas da variável de decisão são sorteadas aleatoriamente durante a execução do código. Dessa maneira, um método aleatório não executa a mesma sequência de cálculo e pode levar a resultados diferentes.

Não existe um único método o qual possa ser aplicado eficientemente para todos os problemas. O método escolhido para um caso particular depende das características da função objetivo, da natureza das restrições e do número de variáveis. A maioria dos problemas de engenharia sofre restrições em suas variáveis. Um dos procedimentos válidos para desenvolver as condições necessárias e suficientes para um problema de otimização com restrições é transformá-lo em um problema de otimização sem restrições e aplicar as condições para esse caso. Alguns métodos substituem o problema original por uma sequência de subproblemas, os quais as restrições são representadas por termos adicionados ao objetivo. Esses métodos são conhecidos como métodos de penalização (NOCEDAL, 2000).

As funções penalidade transformam um problema:

$$\min_{x \in R^n} S(x) \qquad \textbf{(2.20)}$$

sujeito a: $h_j(x) = 0,\ j = 1,2,...,m$

$g_j(x) \leq 0,\ j = 1,2,...,p$

no problema sem restrição:

$$\min_{x \in R^n} \left[S(x) + P(x, \Psi) \right] \qquad \textbf{(2.21)}$$

em que $P(x, \Psi)$ é uma função penalidade e $\Psi \geq 0$. A função penalidade deve satisfazer aos seguintes critérios:

$P(x, \Psi) \geq 0, \forall x$, e $P(x, \Psi) = 0$ para todo x viável

Isso significa que a função penalidade $P(x, \Psi)$ é nula dentro do espaço viável de solução, ou seja, que não esteja violando as restrições. Os métodos de penalização mais conhecidos são penalidade quadrática, função barreira logarítmica e método Lagrangeano aumentado (HIMMELBLAU, 1989).

2.5.2 Motivação para Otimização do Processo de Pultrusão

A realidade da produção de compósitos no Brasil ainda apresenta sérios problemas relacionados à tecnologia de fabricação. Segundo alguns produtores (PACHINOS, 2003), um dos principais inconvenientes desse processo está relacionado à qualidade do material compósito e temperatura de operação.

Durante a fase de pesquisa deste trabalho, foi realizada uma visita técnica a fábrica ECO Compósitos Engenharia, situada na cidade de Duque de Caxias, RJ. Durante a visita pôde-se acompanhar o processo de produção do material. Os produtores da ECO Compósitos evidenciaram a necessidade de economizar energia durante o processo, sendo que em dias de temperatura mais baixa é necessário, até mesmo, interromper o processo devido à troca de calor entre o molde e o ambiente. Conforme pode-se observar na Figura 2.14, o molde de pultrusão utilizado pela empresa não apresenta nenhum isolamento e possui somente um aquecedor na superfície do molde.

Figura 2.14. Imagens do molde de pultrusão da empresa ECO Compósitos Engenharia.

Embasado nisso, acredita-se que grande parcela da energia térmica utilizada durante o processo é desperdiçada devido à configuração térmica inadequada. Esse aspecto motivou a realização de um estudo mais aprofundado sobre a otimização do processo com o objetivo de propor alternativas mais econômicas de modo a reduzir o desperdício de energia.

2.5.3 Trabalhos sobre Otimização do Processo de Pultrusão

LI *et al.* (2001) propuseram uma metodologia para otimização do processo de pultrusão, fundamentada no cálculo dos valores das temperaturas nas placas de aquecimento que resultasse na produção de um compósito com distribuição uniforme de cura ao sair do molde aquecido. Nesse trabalho, a uniformidade da cura é quantificada através do cálculo do desvio quadrático médio dos valores de grau de cura do compósito, na seção de saída do molde, em relação a um valor de grau de cura desejado, conforme escrito na equação a seguir:

$$F = \sum_{i=1}^{n} \left(\alpha_i - \alpha^* \right)^2 \qquad \textbf{(2.22)}$$

em que α^* é o grau de cura desejado.

O procedimento de otimização baseia-se na minimização dessa função objetivo por meio da variação dos valores das temperaturas dos aquecedores do molde, que são as variáveis de decisão desse problema de otimização. Para isso, utilizou-se o método da descida íngreme (NOCEDAL, 2000), que é um método determinístico o qual computa a derivada primeira da função objetivo. No procedimento aplicado, a cada iteração, valores da temperatura dos aquecedores são estimados e o problema é simulado, obtendo-se o valor do grau de cura e da função objetivo. Esse procedimento é repetido até se encontrar o valor mínimo da função, ou seja, o conjunto de valores de temperatura que resulta em um material compósito uniformemente curado.

Essa função objetivo também foi utilizada por CARLONE *et al.* (2007), porém, nesse trabalho foi utilizado um método híbrido de otimização envolvendo o método Simplex associado a Algoritmo Genético (HIMMELBLAU, 1989). O Algoritmo Genético foi utilizado para estimativas iniciais dos valores de temperatura usados na etapa determinística do cálculo (algoritmo Simplex). Segundo os autores, esse procedimento acelera a convergência do cálculo, pois evita estimativas iniciais que desfavoreçam a convergência do algoritmo determinístico ao valor ótimo da função objetivo.

O princípio a respeito do qual se fundamenta a formulação, utilizada por LI *et al.* (2001) e CARLONE *et al.* (2007), admite, na seção de saída do compósito, a possibilidade de obtenção de diferentes valores de grau de cura em pontos diferentes da peça, ou seja, compósito não uniforme, conforme ilustrado na Figura 2.15. Porém, acredita-se que o problema possa ser melhor formulado, devido ao fato de a simples consideração de um valor mínimo de grau de cura, como por exemplo acima de 95% em qualquer local da seção de saída do compósito, já ser suficiente para considerar um material uniformemente curado. Nesse contexto, pressupõe-se que essa função objetivo, embora matematicamente razoável para descrever a uniformidade do grau de cura, perde o significado físico.

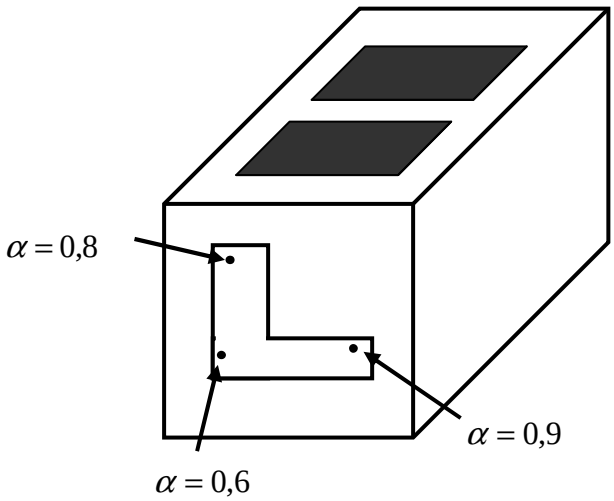


Figura 2.15. Valores diferentes de grau de cura na seção de saída do molde.

COELHO e CALADO (2002) propuseram um procedimento semelhante ao de CARLONE *et al.* (2007), porém utilizaram a seguinte função objetivo para otimizar o processo de produção de um compósito cilíndrico:

$$F = \pi R_c^2 v_z \rho P_p - Q P_e \qquad \textbf{(2.23)}$$

sujeito a $\alpha_{min} \leq \alpha \leq \alpha_{max}$ e $T_{\min} \leq T \leq T_{\max}$,

em que R_c é o raio do compósito, P_p é o preço de material por massa de compósito produzido e P_e é o preço de energia utilizada.

O primeiro termo do lado direito da função representa o lucro do processo e o segundo o custo de energia. Da mesma maneira que SRINIVASAGUPTA *et al*. (2003), COELHO e CALADO (2002) consideraram que o custo de energia relativo à força de tração para puxar o material é desprezível frente ao custo de energia térmica. Para calcular o custo de energia, os autores quantificaram a taxa de calor com a suposição da predominância de fluxo na direção radial, conforme descrito na Equação 2.24.

$$Q = k 2\pi R_C \int_{z=0}^{z=L} \left. \frac{\partial T(r,z)}{dr} \right|_{r=R_c} dz \qquad \textbf{(2.24)}$$

sujeito a: $\alpha_{\min} \leq \alpha \leq \alpha_{\max}$, $T_{\min} \leq T \leq T_{\max}$ e $v_{z\,\min} \leq v_z \leq v_{z\,\max}$.

No trabalho de COELHO e CALADO (2002) foi utilizado o método *Simulated Anealing* como procedimento de otimização. A metodologia se baseia na maximização da função objetivo manipulando-se os valores da velocidade e temperatura em três regiões igualmente espaçadas ao longo do comprimento do molde (L), conforme ilustra a Figura 2.16. O conjunto de valores estimados de temperatura é interpolado linearmente a cada iteração do algoritmo para construção do perfil de temperatura da superfície do compósito (condição de contorno). Com a condição de contorno, resolve-se o sistema de EDPs pelo método de elementos finitos e calcula-se o valor do grau de cura e da função objetivo. Esse procedimento se repete até o algoritmo encontrar o valor máximo da função, ou seja, as condições operacionais que representem um processo mais lucrativo.

SRINIVASAGUPTA *et al*. (2002) e (2003) também realizaram estudos bastante interessantes sobre a otimização desse processo, porém, relativos à pultrusão por injeção. No entanto, esses trabalhos contribuíram para elucidar aspectos relacionados à otimização do processo, não só relacionados à procura do perfil ótimo de cura, mas também incorporaram objetivos diferentes no que dizem respeito à otimização desse processo. Em SRINIVASAGUPTA *et al*. (2002), foi desenvolvido um algoritmo de otimização multiobjetivo, relacionado a aspectos ambientais, termodinâmicos e econômicos, que maximizam a função objetivo pelo uso de uma metodologia baseada na variação das dimensões do equipamento a cada iteração de cálculo. O objetivo é

determinar as especificações ótimas do molde de pultrusão (dimensão do molde, velocidade de tração, etc.), bem como parâmetros do processo (temperatura dos aquecedores e pressão de injeção da resina). Nesse trabalho, foi evidenciado que a solução ótima, do ponto de vista termodinâmico não coincide com a solução ótima do ponto de vista ambiental e econômico.

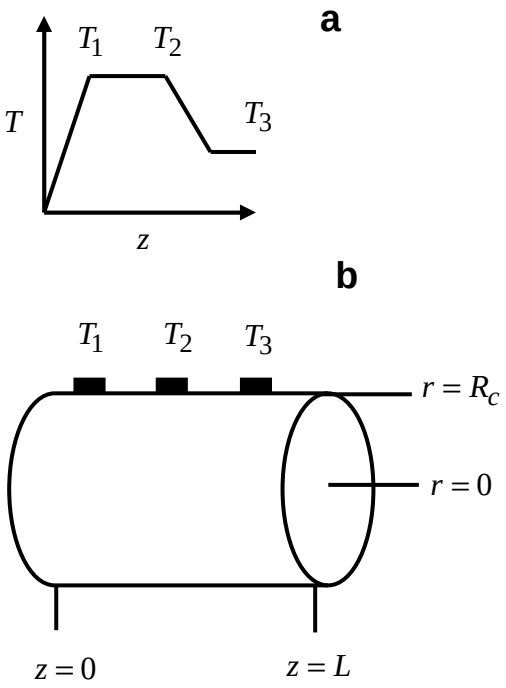


Figura 2.16. Proposta de aquecedores distribuídos internamente no molde: **(a)** Perfil de temperatura (condição de contorno), **(b)** molde com três regiões de temperatura.

Muito embora os trabalhos relacionados ao estudo computacional do processo de pultrusão tenham contribuído sobremaneira para desvendar a relação dos fenômenos envolvidos no processo (cinéticas de cura e transporte de calor), ainda há poucos estudos orientados para otimizar esse sistema. Nota-se, por exemplo, que os trabalhos sobre otimização não diversificam a configuração térmica do molde, seguindo, em sua maioria, o acoplamento de “chapas” retangulares, cobrindo grande parte da superfície do molde. Segundo SRINIVASAGUPTA *et al.* (2003), aquecedores cobrindo quase a totalidade da extensão do molde favorece o controle de temperatura da peça. Para esses

pesquisadores, um número mais elevado de zonas térmicas, e consequentemente de aquecedores, pode ser mais econômico, porém de mais difícil controle.

Em um trabalho realizado durante esta pesquisa (SANTOS *et al.* 2008a), foi realizado o estudo computacional do processo, averiguando a influência da dimensão e posicionamento dos aquecedores sobre uma possível minimização de energia utilizada para a cura do material. Os resultados revelaram que a utilização de aquecedores, com área superficial menor, situados na região interna de um molde isolado termicamente, apresenta-se como uma configuração mais eficiente em termos de energia, além de facilitar o isolamento da superfície externa do molde. Nesse trabalho, pôde-se concluir que a aplicação de resistências elétricas com menor área superficial de aquecimento possui uma praticidade maior, comparando-se a placas planas. A potência necessária para a cura do material pode ser reduzida consideravelmente e evitar, dessa maneira, o aquecimento excessivo da peça.

Em sequência a esse trabalho, realizou-se outro estudo (SANTOS *et al.* 2008b), o qual propõe uma esse mesma configuração térmica aplicada a produção de compósito de geometrias irregulares. Tal estratégia se baseia na distribuição de aquecedores ao longo do molde, protegidos por uma camada isolante para evitar a troca de calor com o ambiente.

Os resultados desses trabalhos (SANTOS *et al.* 2008a e 2008b) sugerem que essa configuração térmica pode ser favorável para minimizar o custo energético, pois possibilita aquecer o material gradualmente à medida que é puxado através do molde. No entanto, até então, nenhum estudo sobre a otimização do processo, incorporando essas sugestões de configuração, foram realizados. A tarefa desta dissertação é implementar uma estratégia de otimização e averiguar se tal mudança é realmente viável economicamente.

No capítulo seguinte, será apresentada a metodologia proposta e as ferramentas computacionais utilizadas para o presente trabalho.

CAPÍTULO 3

METODOLOGIA PARA SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO

"Logo notei que, quando quis assim pensar que tudo era falso, era preciso necessariamente que eu, que o pensava, fosse alguma coisa."

René Descartes

3.1. Procedimento para Simulação do Processo de Pultrusão

3.1.1 Introdução à Fluidodinâmica Computacional

Conforme discutido no capítulo anterior, a modelagem do processo de pultrusão de compósitos com geometrias simétricas pode ser razoavelmente descrita por modelos matemáticos mais simplificados para obtenção de resultados condizentes com resultados experimentais. Porém, quando se trata da simulação de estruturas com geometrias irregulares, como é caso de alguns perfis pultrudados, e deseja-se obter maior número de informações com maior detalhamento da estrutura do molde, a simulação numérica se torna mais dispendiosa, pois requer maior esforço numérico. A utilização de sistemas de coordenadas cartesianas para simulação de problemas de engenharia é usual, porém, essa abordagem é muito limitada, pois em problemas reais quase sempre a geometria é irregular. É nesse contexto que, para facilitar a etapa de simulação, utilizou-se um código CFD (*Computer Fluid Dynamics*) em vez da concentração de esforços na programação de métodos numéricos para simulação do processo (MALISKA, 2004).

Códigos CFD são estruturados em torno de algoritmos que tratam escoamento de fluidos, transferência de calor e reações químicas. Esses códigos são bastante eficientes e englobam uma grande área de aplicabilidade industrial, sendo as principais:

- Aerodinâmica;
- Engenharia elétrica e eletrônica;
- Engenharia naval;
- Meteorologia;
- Engenharia de Processos Químicos;
- Engenharia mecânica

Atualmente, as ferramentas CFD têm sido integradas a outras ferramentas numéricas, criando um ambiente de trabalho interativo, o qual se chega praticamente ao projeto final do equipamento por meio de recursos computacionais, reservando-se para o laboratório as experiências finais de ajuste e teste do equipamento. Com o objetivo de oferecer fácil associabilidade, essas ferramentas incluem interfaces sofisticadas para entrada de parâmetros e também para visualização dos resultados. Dessa maneira, os códigos CFD contêm três elementos principais: (a) pré-processador, (b) solver e (c) pós-processador, sendo as principais vantagens:

- Redução substancial de custo de tempo;
- Habilidade de estudar sistemas em que o controle experimental é difícil ou impossível;
- Habilidade de estudar sistemas sobre condições perigosas e em torno de condições limites (relacionados à segurança e a cenários de acidentes);
- Elevado nível de detalhamento dos resultados.

Embora a maioria dos códigos comerciais CFD seja baseada no método numérico de elementos finitos, os códigos mais difundidos comercialmente (PHOENICS, FLUENT, FLOW3D e ANSYS CFX^{TM}) são baseados no método de volumes finitos (VERSTEG e MALALASEKERA, 2002).

O software utilizado nesta dissertação para simular o processo de pultrusão é o ANSYS CFX^{TM}. Esse software é baseado no método EbFVM (*Element-based Finite Volume Methods*) (MALISKA, 2004). Trata-se de um método de volumes finitos que se assemelha ao método de elementos finitos na definição dos elementos e respectivas funções de forma para as interpolações no interior do elemento. O CFX inclui

ferramentas para desenho de estruturas (ANSYS WORKBENCH), geração de malhas (CFX MESH), cálculo numérico (CFX SOLVER) e pós-visualização dos resultados (CFX POST). A utilização desse pacote computacional para o estudo do problema de pultrusão se justifica principalmente pela elevada capacidade de simular problemas que englobam transporte de calor acoplado a reações químicas em geometrias irregulares.

3.1.2 Simulação do Processo

O procedimento aplicado à simulação do processo de pultrusão se divide nas seguintes etapas:

- Desenho da estrutura do molde;
- Definição das regiões (entrada e saída, aquecedores) e geração da malha;
- Definição das condições de contorno, parâmetros e equações;
- Execução do cálculo;
- Visualização dos resultados.

Para esclarecer a seqüência desse procedimento, os tópicos seguintes descrevem, passo a passo, o procedimento adotado para a simulação do processo com a representação de um molde de pultrusão com aquecedores na superfície que é estudado no Capítulo 4.

<u>Desenho da estrutura do molde e definição das regiões e geração da malha</u>

Nessa etapa, através do software integrado ao CFX, ANSYS WORKBENCH, desenha-se a estrutura do molde de pultrusão, conforme ilustrado na Figura 3.1. Nesse software, é possível definir as dimensões dos aquecedores, do molde e do compósito.

A Figura 3.1 ilustra um molde com aquecedores de seção retangular distribuídos pelo molde. Neste estudo foram propostas duas arquiteturas de aquecedores diferentes: uma com aquecedores retangulares e outra com aquecedores internos, que será explicada nos estudos de caso do Capítulo 4.

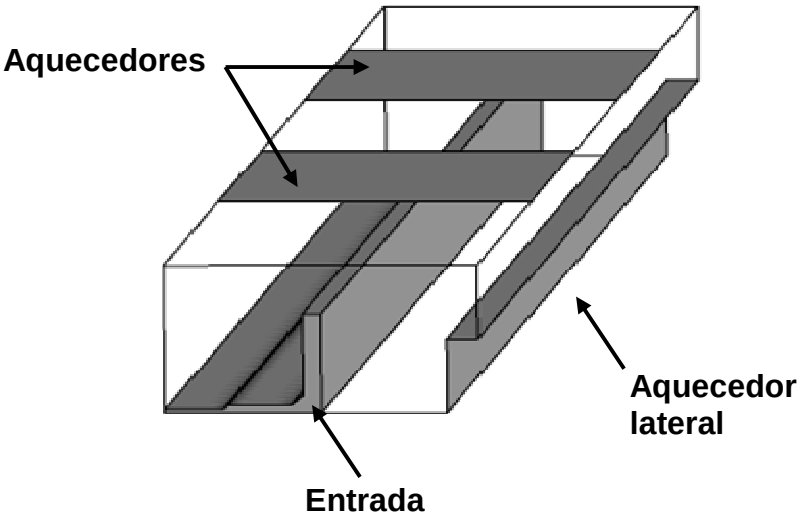


Figura 3.1. Desenho da estrutura (um quarto de um molde com cavidade de geometria “I”).

Posterior a essa etapa, define-se a estrutura da malha gerada no CFX MESH, conforme ilustrado na Fig.3.2. Essa ferramenta possibilita o refinamento da malha em regiões que requerem maior detalhamento de cálculo. O CFX MESH produz malhas que contêm tetraedros, prismas e pirâmides. Esse tipo de discretização é conhecido como não estruturada (não possui volumes quebrados na fronteira) em que os volumes de controle conectam-se ente si de forma arbitrária e o número de volumes vizinhos é, consequentemente, variável no domínio. As malhas não estruturadas possuem maior facilidade para adaptatividade e são aptas a discretizar geometrias irregulares com contornos e saliências (MALISKA, 2004).

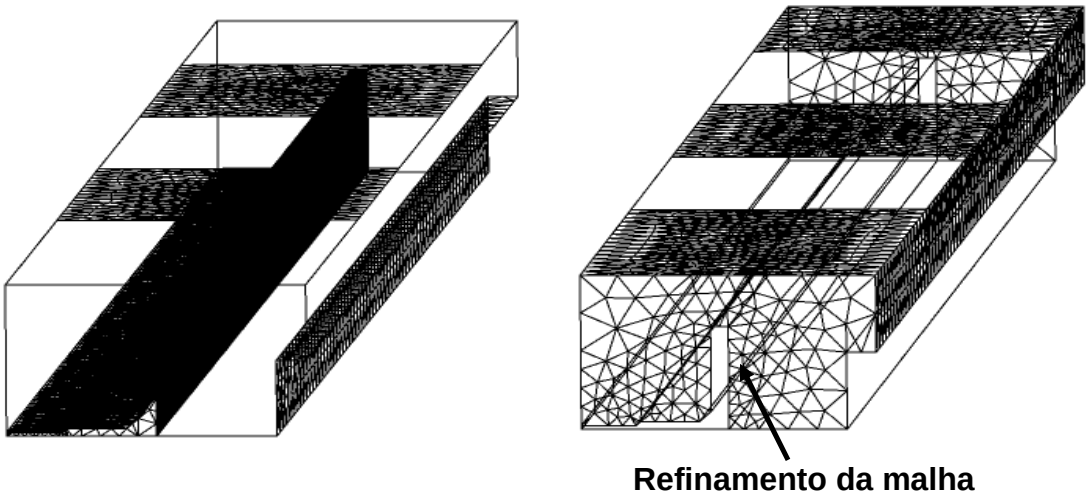


Figura 3.2. Geração da malha para o cálculo.

Para a geração da malha no CFX MESH, considera-se, primeiramente, uma malha pouco refinada como estimativa inicial do nível de refinamento para execução dos cálculos. Em seguida, com o objetivo de atingir a convergência da simulação, refina-se a malha até um nível que possibilite a convergência do cálculo. A malha gerada no CFX MESH é exportada para o CFX PRE, onde são definidos os parâmetros do problema e condições de contorno.

Definição das condições de contorno e parâmetros:

No CFX PRE, definem-se as condições de contorno do domínio de cálculo. Nessa etapa, são configurados também os parâmetros do problema, como massa específica do material, calor específico, fração volumétrica de fibra e parâmetros cinéticos. Depois de ser estabelecido o cenário físico do problema, segue-se para a etapa de cálculo.

Execução do cálculo:

O CFX SOLVER é o componente principal do pacote CFX, pois nessa etapa são implementadas as técnicas numéricas de solução para resolver os problemas. Essa ferramenta produz os resultados na seguinte sequência:

(a) O sistema de equações diferenciais é integrado sobre todos os volumes de controle da malha gerada. Esse procedimento é equivalente a aplicar a lei de conservação para cada volume separadamente.

(b) As equações diferenciais são transformadas em um sistema de equações algébricas e resolvidas iterativamente. O processo iterativo é requerido devido às não-linearidades das equações diferenciais. Para cada iteração, um erro, ou resíduo, é quantificado como medida da conservação global da propriedade transportada. A proximidade da solução final com a solução exata depende de uma série de fatores, tais como tamanho e formato da malha e valores dos resíduos. No CFX, o resíduo (RMS) é obtido pelo cálculo da raiz quadrada da média dos resíduos de cada elemento no domínio de cálculo. No CFX-PRE, pode-se definir o limite mínimo do valor do RMS para a convergência de cálculo.

Visualização dos resultados

Para visualizar os resultados, utiliza-se o CFX POST que é uma ferramenta capaz de gerar gráficos de contorno, vetores e linhas de corrente e animações 3D. Nesse software, é possível também exportar dados para outros programas de visualização gráfica.

3.1.3 Modelagem Matemática e Discretização das Equações

Considerando que o processo seja representado por um modelo 3-D, estacionário, com termo de geração de energia, conforme discutido no Capítulo 2, o problema estudado é descrito pelas seguintes equações:

Região limitada pelo compósito:

$$\nabla\left(\rho_c C_{p_c} u_i T\right) = \nabla \cdot \left(k_c \nabla T\right) + Ca_o (1-\phi)\Delta H_T r_a \qquad \textbf{(3.1)}$$

$$\nabla\left(u_i \alpha\right) = K(T) f\left(\alpha\right) = r_a \qquad \textbf{(3.2)}$$

em que $f\left(\alpha\right) = \left[1 - K'\left(T\right)\alpha^m\right](1-\alpha)^n$ é a equação que representa a cinética de reação da mistura composta de resina éster vinílica e fibra de vidro; caso estudado nesta dissertação.

Região limitada pelo molde:

$$\nabla \cdot \left(k \nabla T\right) = q \qquad \textbf{(3.3)}$$

As condições de contorno, configuradas no CFX PRE, são:

$k\nabla T = \sum_{i=1}^{n} q_i$ nos aquecedores

$k\nabla T = 0$ na superfície do molde

$\alpha = 0$ e $T = T_o$ na entrada da cavidade do molde.

Para obter a solução numérica desse sistema de equações, é necessária a integração das equações em cada volume elementar, como explicado na seção anterior.

O método de volumes finitos satisfaz a conservação da variável transportada em nível de volumes elementares. Para ilustrar a idéia básica da solução do modelo matemático pelo método de volumes finitos, considera-se um volume finito de cálculo, em coordenadas cartesianas, contendo um ponto central P, conforme mostra a Figura 3.3.

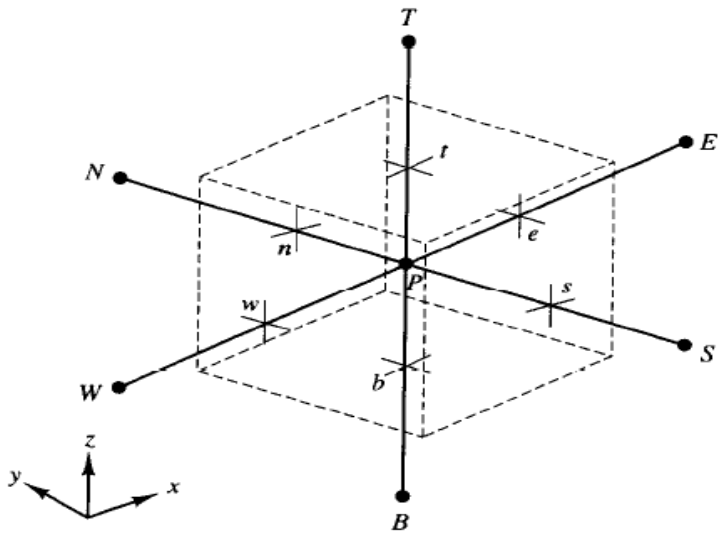


Figura 3.3 Volume finito de cálculo em coordenadas cartesianas.

Esse volume possui seis nós, identificados como W, E, S, N, B e T e seis faces w, e, s, n, b e t. A integração das equações sobre esse volume elementar resulta em:

<u>Região limitada pelo compósito:</u>

$$\int_{\Delta V} \nabla\left(\rho_c C_{p_c} u_i T\right) dV = \int_{\Delta V} \nabla \cdot \left(k_c \nabla T\right) dV + \int_{\Delta V} \left[Ca_o (1-\phi) \Delta H_T r_a\right] dV \qquad \textbf{(3.4)}$$

$$\int_{\Delta V} \nabla\left(u_i \alpha\right) dV = \int_{\Delta V} (1 - K(T)\alpha^m)(1-\alpha)^n dV \qquad \textbf{(3.5)}$$

resultando em:

$$\left(A_s C_{p_c} \rho_c u_y T\right)\Big|_s^n + \left(A_w C_{p_c} \rho_c u_x T\right)\Big|_w^e + \left(A_b C_{p_c} \rho_c u_z T\right)\Big|_b^t =$$

$$A_w\left(\frac{k_{c_x}\partial T}{\partial x}\right)\Bigg|_w^e + A_s\left(\frac{k_{c_y}\partial T}{\partial y}\right)\Bigg|_s^n + A_b\left(\frac{k_{c_z}\partial T}{\partial z}\right)\Bigg|_b^t + Ca_o \Delta H_T (1-\phi) r_a \Delta V \qquad \textbf{(3.6)}$$

<u>e</u>

$$A_w(\alpha u_x)\Big|_w^e = (1-K(T)\alpha^m)(1-\alpha)^n \Delta V \qquad \textbf{(3.7)}$$

considerando que o grau de cura varia somente na direção do escoamento.

<u>Região limitada pelo molde:</u>

$$\int_{\Delta V} \nabla \cdot (k\nabla T) dV = A_w\left(\frac{k_x \partial T}{\partial x}\right)\Bigg|_w^e + A_s\left(\frac{k_y \partial T}{\partial y}\right)\Bigg|_s^n + A_b\left(\frac{k_z \partial T}{\partial z}\right)\Bigg|_b^t = 0 \qquad \textbf{(3.8)}$$

em que $A_w = A_e, A_s = A_n$ e $A_b = A_t$ são as áreas do volume elementar.

A tarefa do método numérico é resolver as equações diferenciais, aproximando as derivadas existentes por expressões algébricas. No exemplo acima, os valores das variáveis dependentes são armazenados nos centros dos volumes $W, E, S, N, B,$ e T ou nos centros das faces w, e, s, n, b e t. Os valores necessários dessas variáveis em outras posições são obtidos por processos convenientes de interpolação. Dessa forma, as derivadas da função são substituídas pelos valores discretos dessa função. O estabelecimento da função de interpolação é a parte fundamental da concepção do método numérico. Diferentes funções de interpolação geram aproximações diferentes, as quais produzem soluções distintas para a mesma equação diferencial. O ANSYS CFX utiliza diferentes abordagens para aproximar as derivadas das equações. Para aproximação dos termos advectivos, é possível configurar o software para realizar os cálculos através dos esquemas *upwind*, *high resolution*, ou *numerical* e *advection correction* (MALISKA, 2004). A escolha do esquema de aproximação dos termos

advectivos depende de diversos fatores, como refinamento da malha e natureza da equação diferencial: predominância dos termos advectivos ou difusivos.

A técnica abordada pelo CFX para aproximação dos termos difusivos calcula o valor da variável dependente, por exemplo, temperatura, dentro de um volume da seguinte maneira:

$$T = \sum_{i=1}^{N} N_i T_i \qquad \textbf{(3.9)}$$

em que N_i é uma função de interpolação para o nó i e T_i o valor de T no nó i. O somatório engloba todos os nós de um volume. A função de interpolação é contínua e tem valor unitário no respectivo nó e nulo nos restantes:

$$\text{No nó } j,\ N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \qquad \textbf{(3.10)}$$

Para a derivada de uma grandeza no ponto P, no caso da temperatura, na direção x, por exemplo, tem-se:

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_P = \sum_n \left.\frac{\partial N_n}{\partial x}\right|_P T_n \qquad \textbf{(3.11)}$$

A aproximação numérica das equações diferenciais parciais, como descrito na Equação 3.11, dá origem a um sistema linear de equações. Quando o sistema é não linear novamente a aproximação dá origem a um sistema linear de equações, mas a matriz contém coeficientes dependentes da variável e deve ser atualizada ao longo das iterações. Para resolver o sistema discreto de equações linearizadas, o ANSYS CFX utiliza o método multigrid. Os métodos multigrid aceleram a convergência de cálculo e permitem obter soluções de sistemas lineares com menor tempo de computação. (MALISKA, 2004).

3.2 Etapa da Otimização

3.2.1 Formulação do Problema de Otimização

Conforme discutido no capítulo anterior, a otimização do processo de pultrusão não é tarefa trivial, pois podem existir várias combinações de configurações possíveis de aquecedores possíveis para curar o material. Em contrapartida, dentre essas, pode existir uma configuração térmica ótima, dependendo do objetivo, como custo mínimo ou minimização de algum efluente. O número de aquecedores e a posição desses sobre o molde dependem da geometria do compósito utilizado, bem como da cinética de reação. De acordo com os trabalhos já realizados sobre a simulação computacional desse processo, a reação de cura deve acontecer de forma gradual à medida que o conjunto fibra-resina passa pelo molde. Nesse contexto, é necessário dispor de um arranjo de aquecedores que possibilite configurar valores de temperatura em diferentes localidades do molde.

Neste trabalho, propõe-se calcular a energia de mínima de aquecimento para obtenção de um material dentro de determinadas especificações. O valor calculado da potência de cada aquecedor i, q_i, $i = 1, n$, supondo n aquecedores, dependerá do(s) objetivo(s) do processo, representados por uma ou mais funções objetivo. Portanto, trata-se de um problema de otimização, em que as variáveis de decisão são representadas pela variável q_i. Para isso, é utilizada uma função-objetivo a qual descreve a quantidade de energia despendida pelos aquecedores:

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^{n} A_i q_i \qquad \textbf{(3.12)}$$

sujeita às seguintes restrições:

$$\alpha \geq \alpha_{min}$$

$$q_{min} \leq q \leq q_{max}$$

em que α_{min}, q_{min} e α_{max} são definidos como grau de cura mínimo, taxa de calor mínima e taxa de calor máxima, respectivamente.

Para incorporar a restrição $g(\alpha) = \alpha_{min} - \alpha$ na função objetivo utiliza-se uma função penalidade quadrática (HIMMENBLAU, 1989):

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^{n} A_i q_i + P(\alpha, \xi) \qquad \textbf{(3.13)}$$

em que $P(\alpha, \xi) = \xi \max[g(\alpha), 0]^2$ e ξ é um fator de penalidade. Portanto, quando $g(\alpha) > 0$, ou seja, o grau de cura α for menor que o grau de cura mínimo, α_{min}, a função objetivo F_{obj} é penalizada. Com efeito, a função penalidade segue as seguintes condições:

$P(\alpha, \xi) \geq 0, \forall \alpha$

$P(\alpha, \xi) = 0$ para todo α viável, ou seja, $\alpha \geq \alpha_{min}$.

De acordo com a formulação do problema, para calcular $g(\alpha)$ é preciso resolver o sistema de equações diferenciais que representam o modelo de modo a calcular o valor do grau de cura. O método de otimização utilizado para minimizar a função-objetivo é o método de enxame de partículas. Nesse método, os valores de q_i são estimados, a cada iteração, dentro do intervalo de restrições.

Considerando-se o molde representado na Figura 3.4, o problema teria três variáveis de decisão para minimizar a função objetivo. Um resumo do equacionamento da formulação do problema de otimização é descrito do Quadro 3.1:

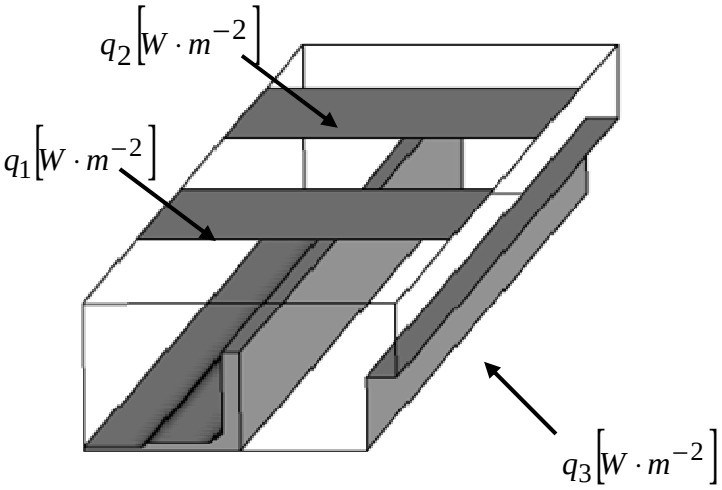


Figura 3.4. Molde de pultrusão com três aquecedores.

Quadro 3.1 Resumo das equações para o problema de otimização.

$$F_{mín} = mín\left\{\sum_{i=1}^{n} q_i + P(\alpha,\xi)\right\}$$

$$\begin{cases} g(\alpha) = \alpha_{mín} - \alpha \\ q_{mín} \le q \le q_{máx} \\ P(\alpha,\xi) = \xi máx[g(\alpha),0]^2 \end{cases}$$

$$\nabla(\rho_c C_{p_c} uT) = \nabla \cdot (k_c \nabla T) + Ca_o (1-\phi)\Delta H_t r_a$$

$$\nabla \times (k\nabla T) = 0$$

$$r_a = K(T) f(\alpha) = \nabla(u\alpha)$$

$$f(\alpha) = (1 - K(T)\alpha^m)(1-\alpha)^n$$

$k\nabla T = \sum_{i=1}^{n} q_i$ nas regiões de aquecimento.

$k\nabla T = 0$ na superfície do molde.

$\alpha = 0$ e $T = T_o$ na entrada da cavidade do molde.

3.2.2 Método de Enxame de Partículas

O método de enxame de partículas (PSO - *particle swarm optimization*) é um algoritmo que tem como fundamento o comportamento de organismos sociais, tais como uma revoada de pássaros ou enxame de abelhas, em que cada indivíduo da

população (partícula) modifica sua posição com o tempo (geração). A posição é modificada de acordo com a experiência do indivíduo e a dos demais componentes da população, valendo-se de sua melhor posição e a melhor posição do conjunto (SCHWAAB *et al*., 2008).

O primeiro trabalho sobre esse método pertence a KENNEDY e EBERHART (1995) que, motivados pelo comportamento gregário de animais, propuseram um algoritmo de otimização não determinístico bastante eficiente e de simples implementação computacional. A idéia fundamental do algoritmo é o estabelecimento, em cada iteração, do movimento de cada uma das n_{part} partículas do grupo. O movimento é norteado pela lembrança da melhor posição (ou melhor, valor da função-objetivo) no espaço onde a partícula já encontrou seu movimento e também no conhecimento da melhor posição já encontrada por todo o grupo. A utilização da melhor posição individual da partícula pode ser classificada como uma espécie de autoconfiança e a informação da melhor posição do grupo é classificada como um comportamento gregário do indivíduo. Com o objetivo de assegurar a diferença comportamental de cada indivíduo, configura-se cada partícula do grupo para ter um comportamento distinto e aleatório, em que a ponderação dessas duas informações é atribuída randomicamente no decorrer do cálculo, assumindo assim um valor diferente para cada uma das partículas (SCHWAAB, 2005).

KENNEDY e EBERHART (1995) propuseram as seguintes equações para descrever a Técnica de Enxame de Partículas:

$$v_{i,d}^{k\,\mathrm{int}+1} = v_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} + c_1 r_1 \left(p_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} - x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} \right) + c_2 r_2 \left(p_{global,d}^{k\,\mathrm{int}} - x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} \right) \qquad \textbf{(3.14)}$$

$$x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}+1} = x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} + v_{i,d}^{k\,\mathrm{int}+1} \qquad \textbf{(3.15)}$$

sendo os índices k_{int}, i e d a iteração, a partícula e a direção de busca respectivamente; v a velocidade e x a posição no espaço de busca; c_1 e c_2 são duas constantes positivas, chamadas respectivamente de parâmetro cognitivo e social; r_1 e

r_2 são dois números aleatórios com distribuição uniforme no intervalo $[0, \ 1]$ e são sempre diferentes para cada direção, partículas e iteração; p_i é o melhor ponto encontrado pela partícula i e p_{global} é o melhor valor encontrado por todo o enxame.

A versão do algoritmo utilizado nesta dissertação é uma versão modificada proposta por SHI e EBERHART (1998) *apud* SCHWAAB (2005), que consiste na introdução de um novo parâmetro, chamado de peso de inércia, w, o qual pondera o termo relativo à velocidade prévia da partícula, de acordo com as seguintes equações:

$$v_{i,d}^{k\,\mathrm{int}+1} = wv_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} + c_1 r_1 \left(p_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} - x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} \right) + c_2 r_2 \left(p_{global,d}^{k\,\mathrm{int}} - x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} \right) \quad \textbf{(3.16)}$$

$$x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}+1} = x_{i,d}^{k\,\mathrm{int}} + v_{i,d}^{k\,\mathrm{int}+1} \quad \textbf{(3.17)}$$

O papel fundamental do peso de inércia é balancear o caráter global e local da busca. Esse peso pode ser uma constante positiva ou mesmo uma função do tempo (iterações) positiva linear ou não linear.

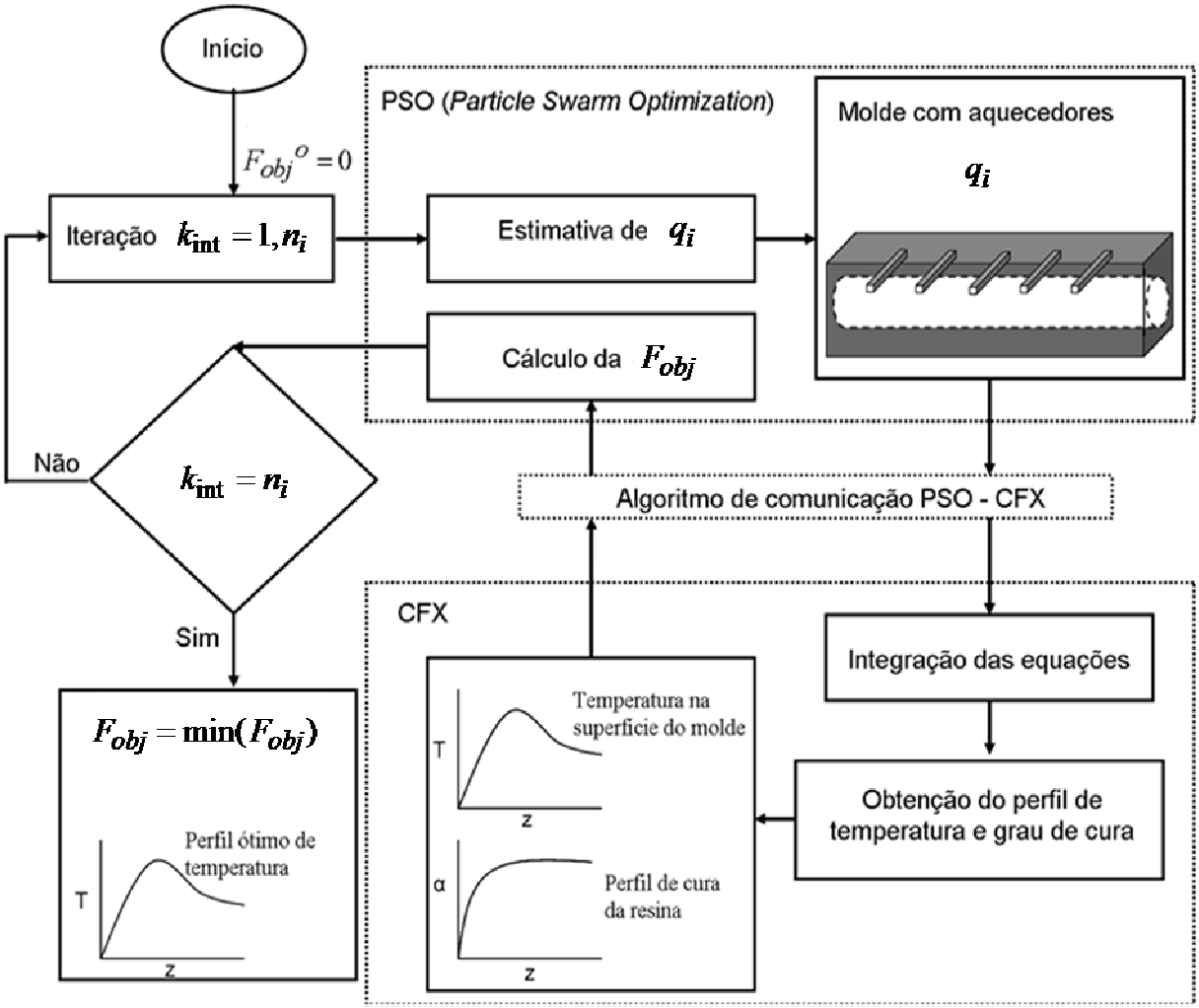
Conforme mostrado na equação anterior, a cada iteração é calculado o valor da velocidade de cada partícula nas direções de busca. Com isso, calcula-se o valor da posição de cada partícula, o que significa o valor das variáveis independentes, e calcula-se o valor da função objetivo. O melhor valor encontrado não é, necessariamente, alterado a todo instante. Porém, assim que os melhores valores são alterados, o comportamento do enxame se adapta aos novos valores.

No problema estudado nesta pesquisa, as variáveis de decisão são os fluxos térmicos dos aquecedores. Para aplicação da Técnica de Enxame acoplada ao CFX, foi proposto um algoritmo responsável pela interface de comunicação entre essas duas ferramentas. Essa estratégia é discutida na seção a seguir.

3.3 Interface de Comunicação do CFX com o Método de Enxame de Partículas

Conforme introduzido no Capítulo1, a estratégia de otimização, proposta nesta dissertação, baseia-se em aliar a potencialidade numérica de um pacote CFD, ANSYS CFX, com algoritmos de otimização, nesse caso o método de enxame de partículas. Tal procedimento foi realizado, pois se verificou que o software CFX não disponibiliza de um *toolbox* de otimização. Para isso, implementou-se um programa "gerente" capaz de realizar essa interface de comunicação.

O fluxograma que resume a estratégia de otimização sugerida pode ser visualizado na Figura 3.5.



/

Figura 3.5 Esquema da interface de comunicação.

A cada iteração o algoritmo de otimização estima valores da variável de decisão, q_i, com o objetivo de encontrar o menor valor da função objetivo, F_{obj}. Para calcular esse valor é necessário simular o processo no CFX, pois a F_{obj} depende do grau de cura, que é uma variável dependente das condições de entrada. O valor calculado retorna então ao algoritmo de otimização, que estima novos valores e grava o menor valor encontrado da F_{obj} de todos os valores calculados nas n_i iterações. Os detalhes do algoritmo são apresentados no Anexo deste trabalho.

No próximo capítulo, aplica-se toda a metodologia apresentada nesta seção através de três estudos de caso. O primeiro é embasado somente na simulação do processo e comparação com resultados teóricos da literatura. Já nos dois estudos seguintes é aplicada a otimização do processo com a utilização dessa ferramenta.

CAPÍTULO 4

ESTUDOS DE CASO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

"A razão, somente por si, basta-se para determinar a vontade, ou ela pode ser um princípio de determinação somente enquanto empiricamente condicionada?"

Immanuel Kant

4.1 Etapas do Estudo

Este capítulo tem o objetivo de testar a ferramenta de otimização desenvolvida sobre um problema já estudado na literatura por LIU (2001) e esclarecer suficientemente porque é importante aperfeiçoar o processo sobre o ponto de vista de minimizar a energia térmica consumida. Assim como no trabalho de LIU (2001), elabora-se um estudo computacional, no entanto, ao contrário do autor que se detém em encontrar uma configuração térmica ótima sem realizar nenhum estudo criterioso mais aprofundado sobre otimização, propõe-se aqui aplicar o método de enxame de partículas, acoplado ao CFX, como ferramenta computacional para otimização. Nesse contexto, este capítulo se estrutura da seguinte forma:

4.2) Simulação do processo de pultrusão com o software ANSYS CFX e comparação com resultados teóricos de LIU (2001);

4.3) Otimização do processo de pultrusão;

4.4) Proposta de otimização utilizando aquecedores internos.

4.2 Simulação do Processo

LIU (2001) estudou o processo de pultrusão para produção de compósito polimérico de seção transversal com geometria “I”, conforme ilustrado na Figura 4.1.

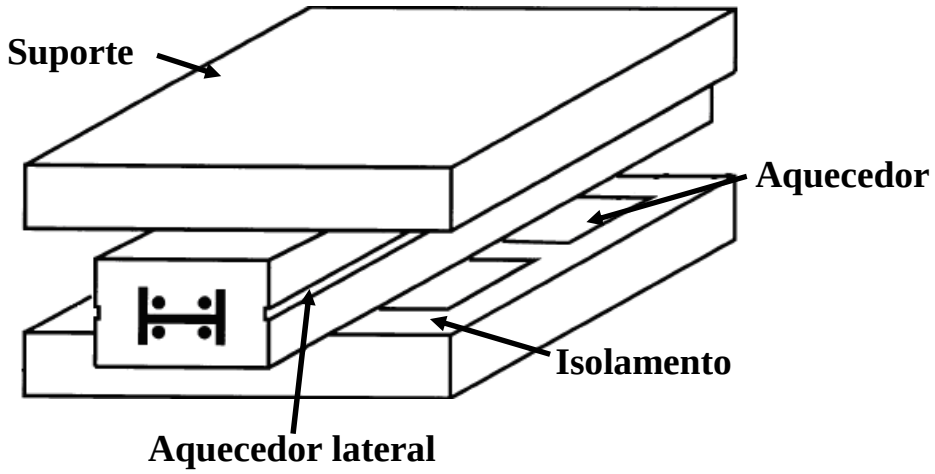


Figura 4.1 Molde de pultrusão estudado por LIU (2001).

O molde da Figura 4.1 é constituído por quatro aquecedores, sendo dois na superfície superior e dois na superfície inferior, além de dois aquecedores laterais. No caso estudado nesse trabalho, foi utilizado um pacote computacional baseado no método de elementos finitos como ferramenta de cálculo para resolução do modelo matemático. O compósito estudado, de seção “I”, possui as dimenssões apresentadas na Figura 4.2.

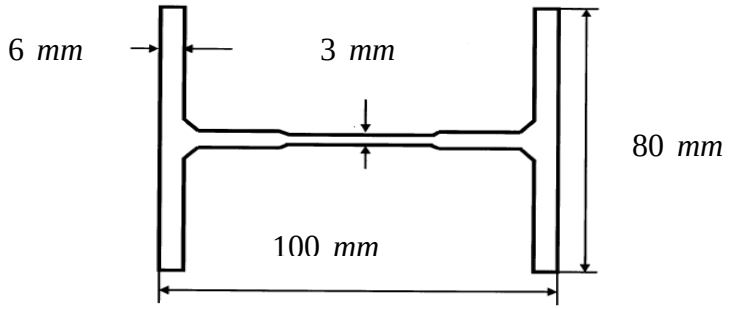


Figura 4.2. Dimensões do compósito com seção transversal de geometria “I” estudado por LIU (2001).

O trabalho de LIU (2001) consistiu em simular o processo de pultrusão e analisar a correlação existente entre a cinética de cura e a temperaura do processo. Para medir os valores da temperatura do compósito, foram utilizados termostatos, localizados

no centro do compósito, conforme ilustrado na Figura 4.3, distribuídos ao longo do comprimento do molde

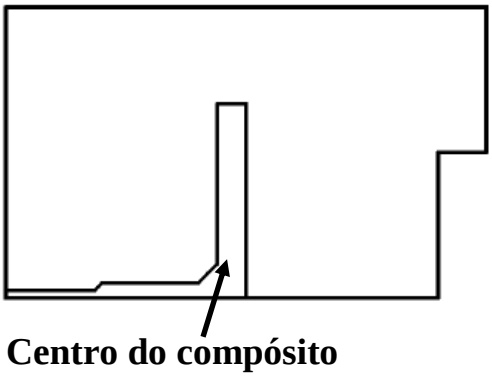


Figura 4.3. Localização dos pontos de medição de temperatura (vista frontal do molde de pultrusão).

Os parâmetros físicos e cinéticos do problema são descritos nas Tabelas 4.1 e 4.2, respectivamente:

Tabela 4.1. Parâmetros físicos

Fração volumétrica de fibra ϕ	0,45
Densidade da resina ρ_r	1100 $kg \cdot m^{-3}$
Massa específica da fibra ρ_f	2560 $kg \cdot m^{-3}$
Condutibilidade térmica da resina k_r	0,169 $J \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
Condutibilidade térmica da fibra k_f	1,04 $J \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
Calor específico da resina C_{pr}	1640 $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
Calor específico da fibra C_{pf}	640 $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
Temperatura de entrada T_o	300 K
Concentração mássica de resina na entrada C_{ao}	1100 $kg \cdot m^{-3}$
Calor de reação ΔH_r	398.4 $J \cdot kg^{-1}$

Tabela 4.2. Parâmetros cinéticos

Fator de freqüência K_0	1,869x10^6 s^{-1}
Energia de ativação E_a	71,688x10^3 $J \cdot mol^{-1}$
Ordem da reação m	2
Ordem da reação n	
Constante universal dos gases (R)	1,98 $cal \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$

Com o objetivo de avaliar o modelo utilizado para simulação do processo de pultrusão, simulado no software ANSYS CFX, compararam-se os resultados teóricos obtidos por LIU (2001) com os resutados deste estudo. Para isso, simulou-se o processo com os aquecedores configurados para aquecerem o molde na temperatura de 401 K e avaliou-se os resultados dos perfis de temperatura e de grau de cura do processo simulado em dois valores diferentes de velocidade: **(i)** 4 $mm \cdot s^{-1}$ e **(ii)** 5 $mm \cdot s^{-1}$, conforme também realizado pelo autor. O molde, de acordo com o dimensionamento especificado, foi construído no ANSYS WORKBENCH, conforme ilustrado na Figura 4.4, e uma malha de cálculo de 25065 elementos e 8066 nós foi utilizada para a simulação.

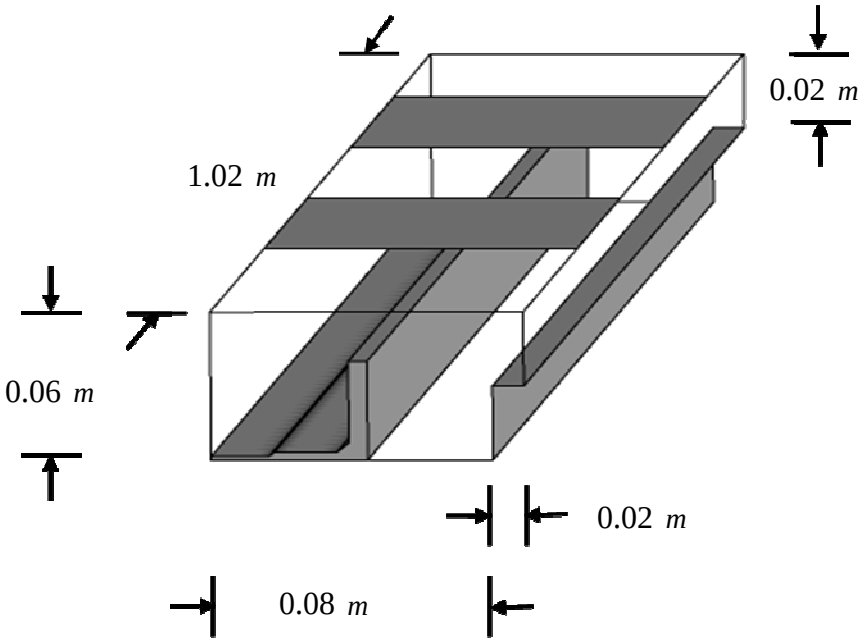


Figura 4.4. Desenho da estrutura do molde de pultrusão com as dimensões consideradas.

Os resultados da simulação são apresentados separadamente para cada velocidade estudada. Para melhor visualização dos resultados, são mostrados o perfil térmico na superfície do molde bem como em diferentes seções transversais ao longo de seu comprimento. Da mesma maneira, é mostrado a variação do grau de cura na superfície do compósito e também em diferentes seções transversais. Para fins de comparação com os resultados de LIU (2001), comparou-se tanto o perfil de temperatura como de grau de cura no centro do compósito, indicado na Figura 4.3.

A Figura 4.5 ilustra o perfil de temperatura do molde de pultrusão. É possível observar que a peça possui praticamente temperatura constante, próximo a 400 K, em torno de seu domínio. Entretanto, nas adjacências da extremidade de saída do molde, a temperatura se eleva ligeiramente a um valor acima da temperatura de aquecimento devido à energia térmica liberada pela reação de cura. Esse fenômeno é melhor visualizado nas Figuras 4.6 e 4.7.

(i) Velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$

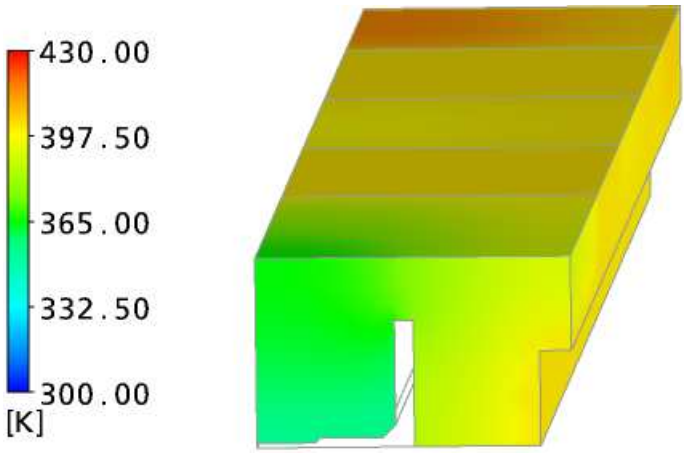


Figura 4.5. Perfil de temperatura do molde na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$.

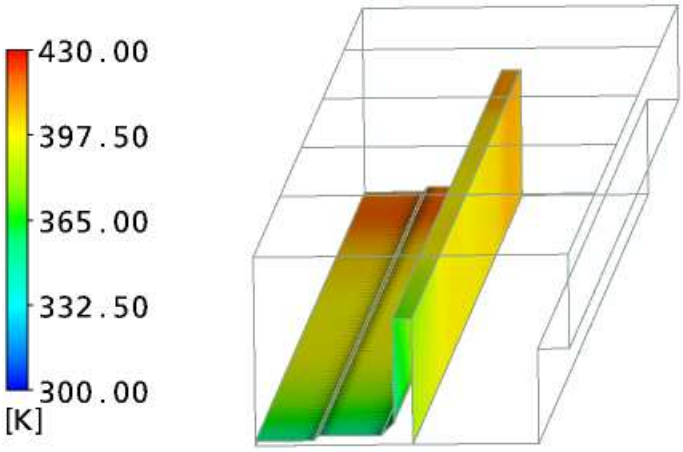


Figura 4.6. Perfil de temperatura do compósito na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$.

Nota-se, na Figura 4.6 que, próximo à seção de saída do molde, a temperatura do compósito se eleva ligeiramente, atigindo um valor de aproximadamente 420 K. A Figura 4.7 ilustra a variação da temperatura no interior da peça. Nota-se que próximo à

seção de saída, determinadas regiões do compósito atingem valores de temperatura próximos a 470 K, evidenciando elevado gradiente de temperatura em determinadas localidades.

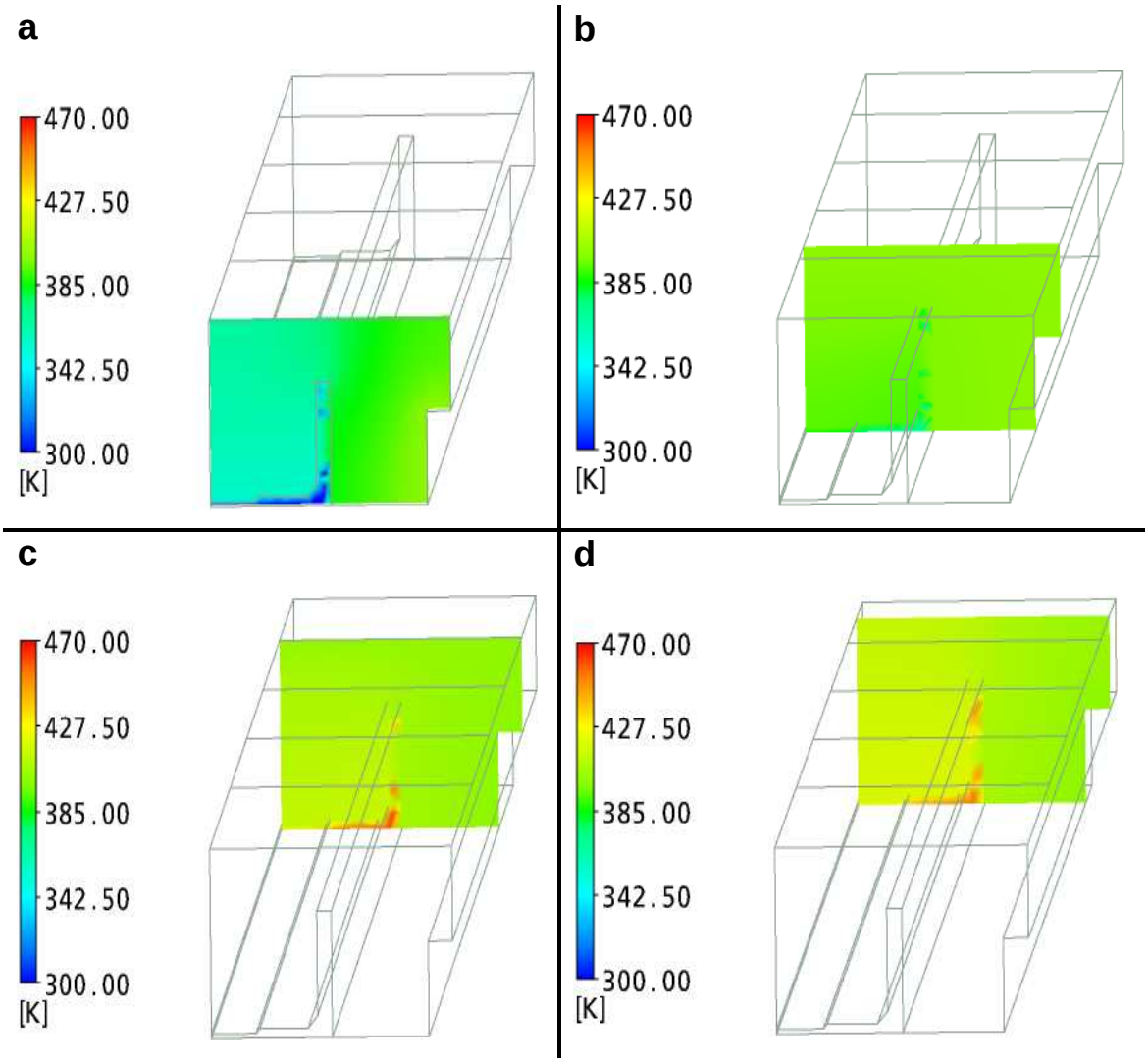


Figura 4.7. Perfil de temperatura do compósito na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$: **(a)** $z = 0$, **(b)** $z = 0.2$, **(c)** $z = 0.8$ e **(d)** $z = 1.0$ mm.

Na Figura 4.8, é possível analisar graficamente a tendência do perfil de temperatura, analisada no centro do compósito, e comparar com o perfil obtido por LIU (2001). Observa-se que o perfil de temperatura calculado apresenta a mesma tendência que o perfil obtido pelo autor: com elevação da temperatura até um valor máximo, de aproximadamente 480 K, próximo à extremidade de saída do molde e consequente decréscimo. O valor extremo da temperatura acontece na posição em que a reação libera

quantidade máxima de calor suficiente para aquecer o material a esse nível. Por consequência, a elevação do grau de cura é mais acentuada nessa região.

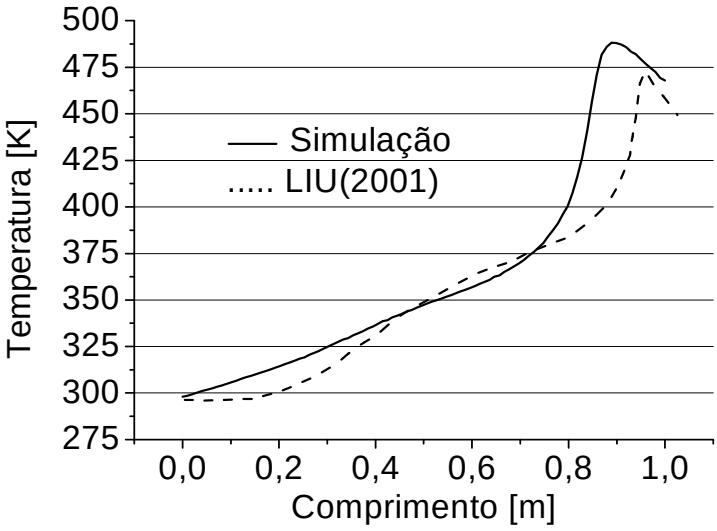


Figura 4.8. Perfil de temperatura no centro do compósito na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$.

O perfil de cura otido pode ser visualizado nas Figuras 4.9 a 4.11. Na Figura 4.9, pode-se notar que a resina não reagida (grau de cura nulo) entra no molde à medida que o material é puxado, até atingir conversão elevada na saída do molde. Conforme se vê, o perfil de cura do material é condizente com os resultados relativos à variação de temperatura da peça pois a reação é mais pronunciada na região mais aquecida do molde. Percebe-se que, de acordo com essa configuração, a resina percorre a maior parte do comprimento do molde sem reagir, até que a temperatura se eleva bruscamente e ativa a reação de cura na parte final do percurso.

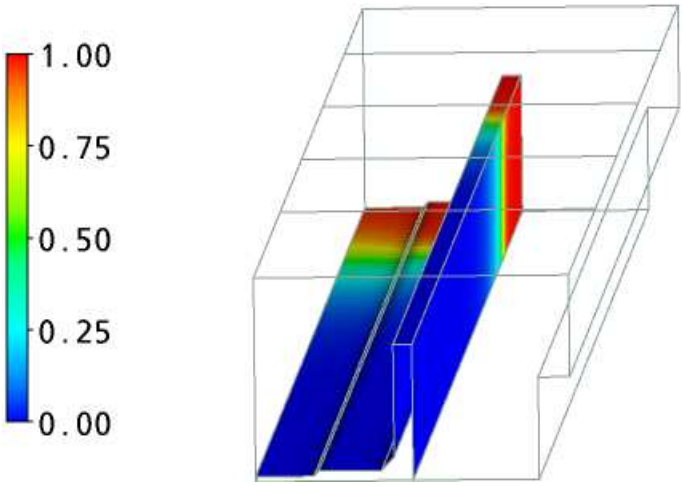


Figura 4.9. Grau de cura do na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$.

Na Figura 4.10, observa-se o grau de cura no interior do compósito.

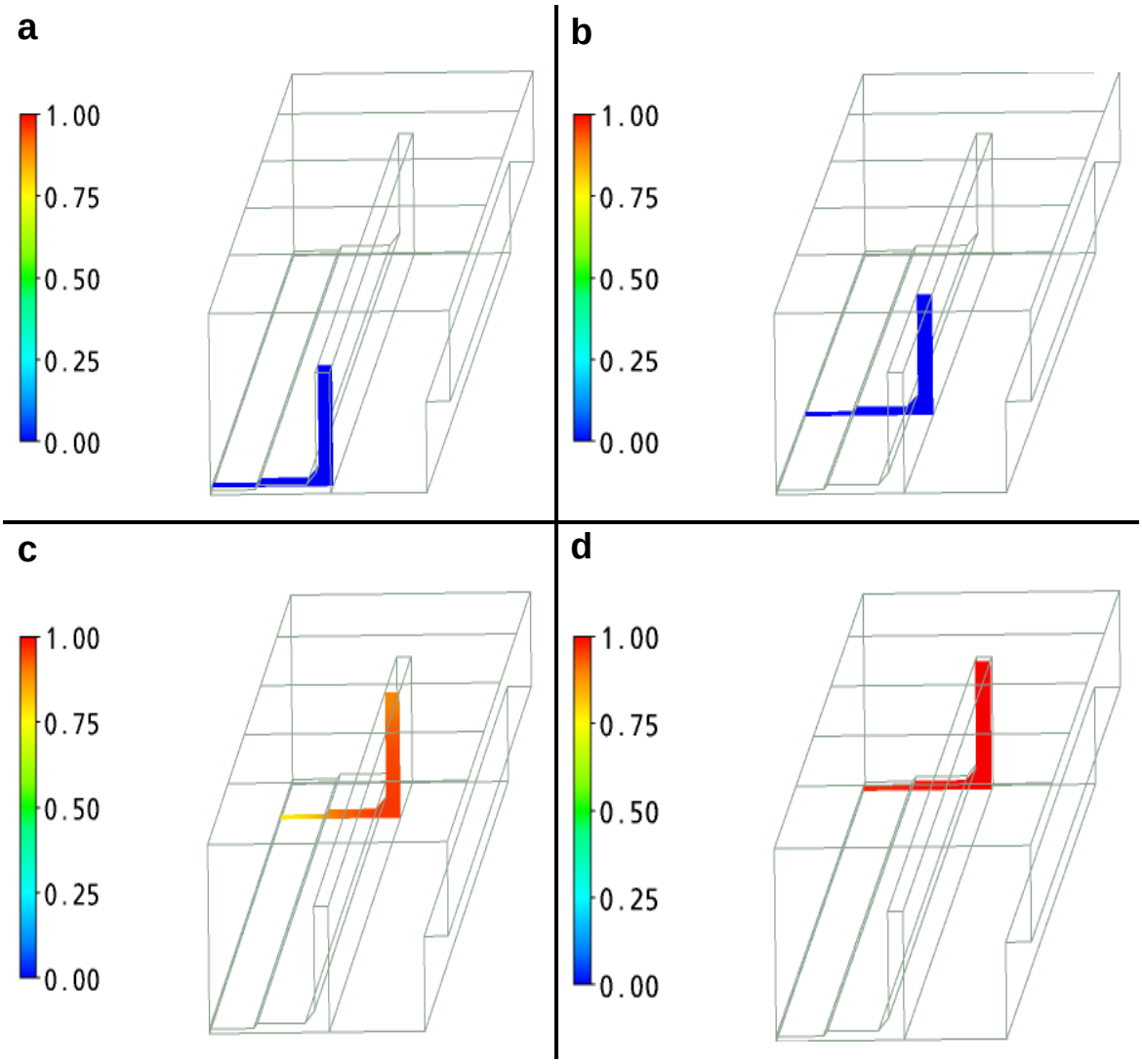


Figura 4.10. Perfil de cura na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$: **(a)** $z = 0$, **(b)** $z = 0.2$, **(c)** $z = 0.8$ e **(d)** $z = 1.0\ m$.

Os resultados revelam que, à primeira vista, no final da reação, o material apresenta regiões com elevado grau de cura enquanto que em outras, principalmente nas extremidades, se apresentam pouco curadas, como na Figura 4.10 **(c)**, a qual revela uma faixa extensa de variação de grau de cura, aproximadamente entre 0,7 a 0,9 na seção transversal localizada a 0,8 m da seção de entrada do molde. Tal resultado pode ser explicado pela geometria irregular da peça, a qual dificulta a cura uniforme da resina. Nota-se também, na Figura 4.11, que no centro do compósito há certa diferença frente aos resultados do perfil de cura obtido por LIU (2001). Basta notar que, embora os resultados mostrem a mesma tendência de cura mais pronunciada no estágio final da

passagem do material pelo molde, nos resultados do autor a curva apresenta-se mais deslocada para a direita. Isso leva a crer que nos resultados obtidos neste trabalho a reação de cura inicia de forma mais antecipada, que nos resultados obtidos pelo autor. Diversos fatores podem levar a diferença desses resultados, dentre eles, erros concernentes ao cálculo numérico e erros computacionais.

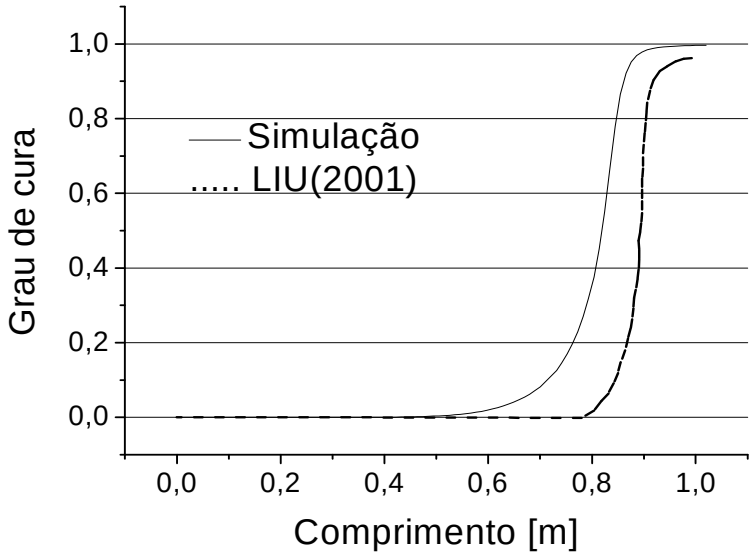


Figura 4.11. Grau de cura no centro do compósito na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$.

Os próximos resultados são relativos à simulação computacional do processo, configurado conforme descrito na etapa anterior, porém com velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$.

A Figura 4.12 **(a)** ilustra o perfil de temperatura do molde de pultrusão. É possível observar que a peça possui praticamente temperatura constante, próximo a 400 K, em torno de seu domínio, contrapondo-se ao resultado do caso anterior, Figura 4.12 **(b)**, no qual a temperatura se eleva na extremidade de saída do molde, devido ao calor liberado pela reação de cura.

Na Figura 4.13 **(a)** percebe-se que, próximo à seção de saída do molde, a temperatura do compósito não se eleva tanto quanto no caso anterior, Figura 4.13 **(b)**, mantendo-se praticamente constante. Nessa velocidade, a temperatura do compósito não ultrapassa a temperatura dos aquecedores. Tal característica advém do fato de o processo ser operado a um valor de velocidade mais elevado, pois nesse caso, o tempo

de residência do material dentro do molde é menor. Consequentemente, a reação de cura acontece de forma atrasada em relação à reação do processo anterior e libera menor quantidade de energia, aquecendo menos o material.

(ii) Velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$

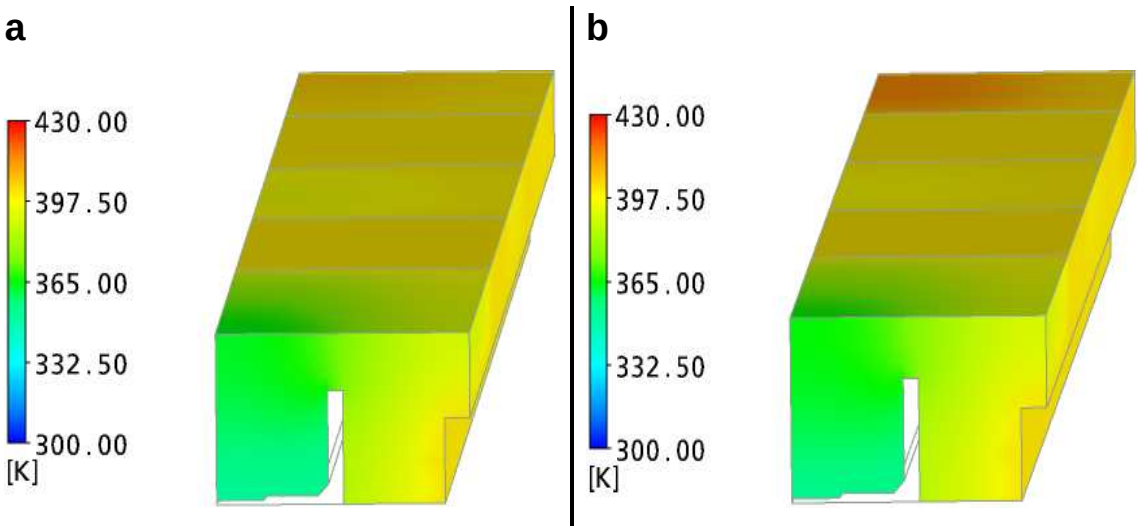


Figura 4.12. Perfil de temperatura do molde: **(a)** velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e **(b)** velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$.

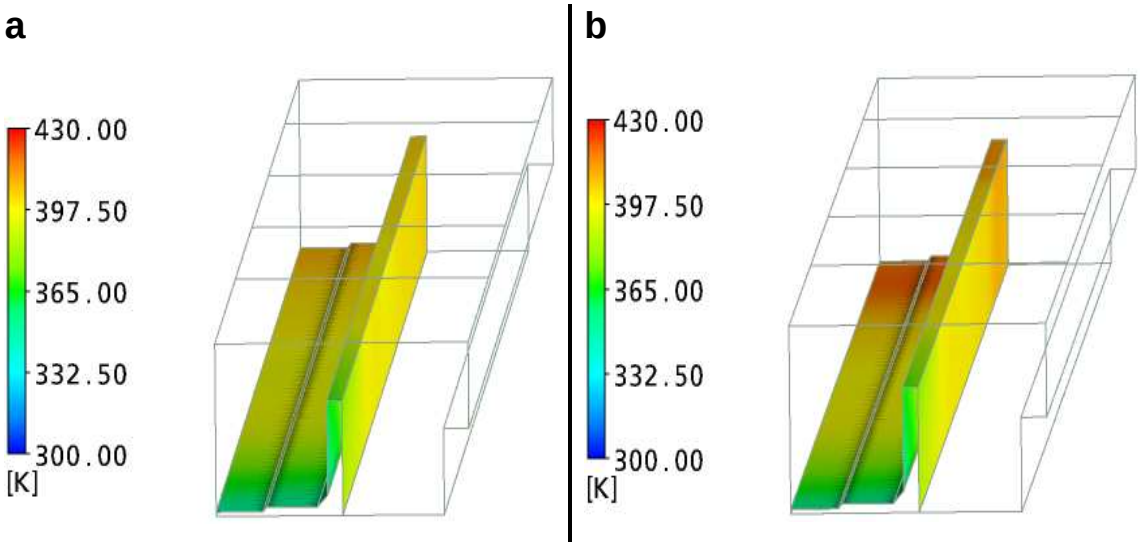


Figura 4.13. Perfil de temperatura do compósito: **(a)** velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e **(b)** velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$.

A Figura 4.14 ilustra a variação da temperatura no interior da peça. Próximo à seção de saída do molde, determinadas regiões do compósito atingem valores de temperatura próximos a 470 K, evidenciando, como no caso anterior, elevado gradiente de temperatura em determinadas localidades.

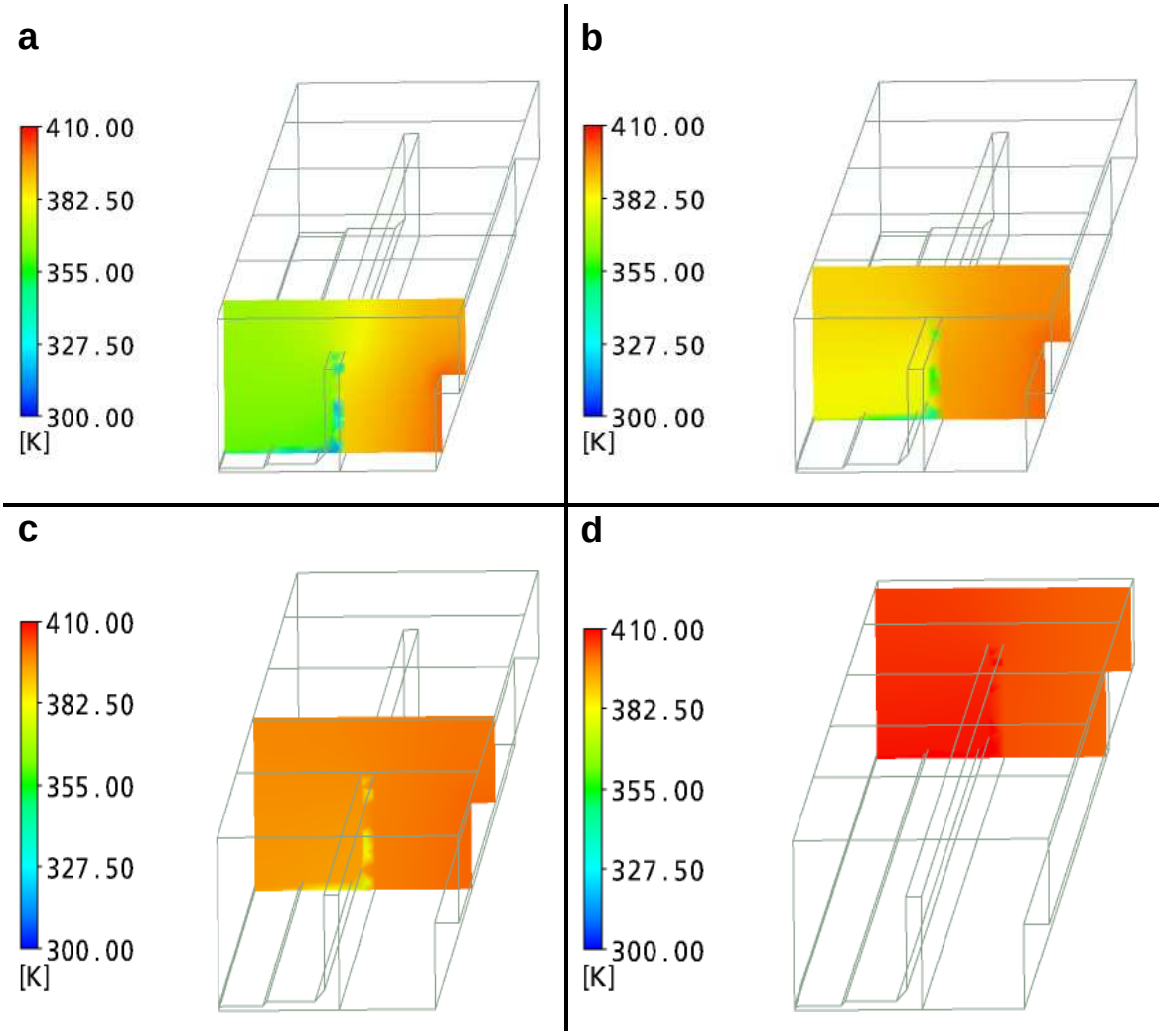


Figura 4.14. Perfil de temperatura do compósito na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$: **(a)** $z = 0$, **(b)** $z = 0.2$, **(c)** $z = 0.8$ e **(d)** $z = 1.0$ m.

Na Figura 4.15, compara-se o resultado do perfil de temperatura no centro do compósito, obtido na simulação, com os resultados teóricos obtidos por LIU (2001). Observa-se que o perfil de temperatura obtido se assemelha ao perfil calculado pelo autor, apresentando a mesma tendência de temperatura crescente da entrada até a saída do molde, atingindo o valor de aproximadamente 390 K. Da mesma forma que no caso

anterior, os valores da temperatura no centro do compósito não são completamente coincidentes com os resultados obtidos pelo autor.

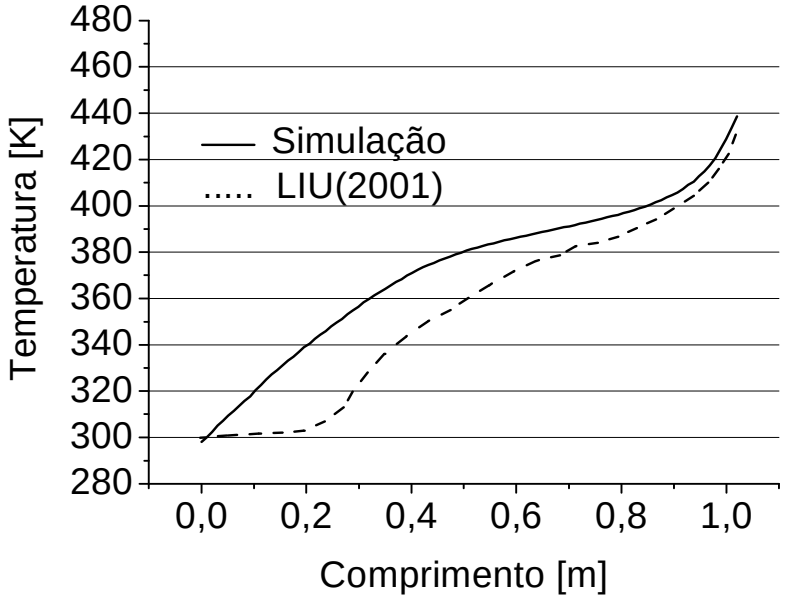


Figura 4.15. Perfil de temperatura no centro do compósito na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$.

Na Figura 4.16 **(a)**, pode-se notar que a resina não reagida (grau de cura nulo) entra no molde e cura à medida que o material é puxado, até atingir um grau de cura de aproximadamente 0,55, ao sair do molde, contrapondo-se ao caso anterior, Figura 4.16 **(b)**, no qual a resina é completamente curada.

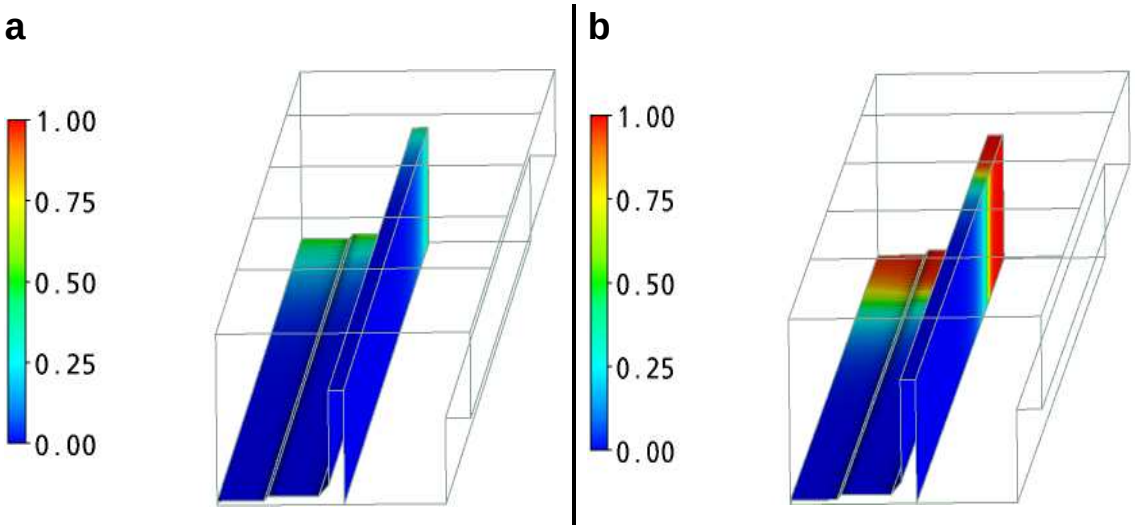


Figura 4.16. Grau de cura: **(a)** velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e **(b)** velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$

Na Figura 4.17, observa-se o grau de cura no interior do compósito. Semelhantemente ao caso anterior, os resultados revelam que, no final da reação, o material apresenta cura não uniforme, com regiões próximas que apresentam elevado gradiente de cura.

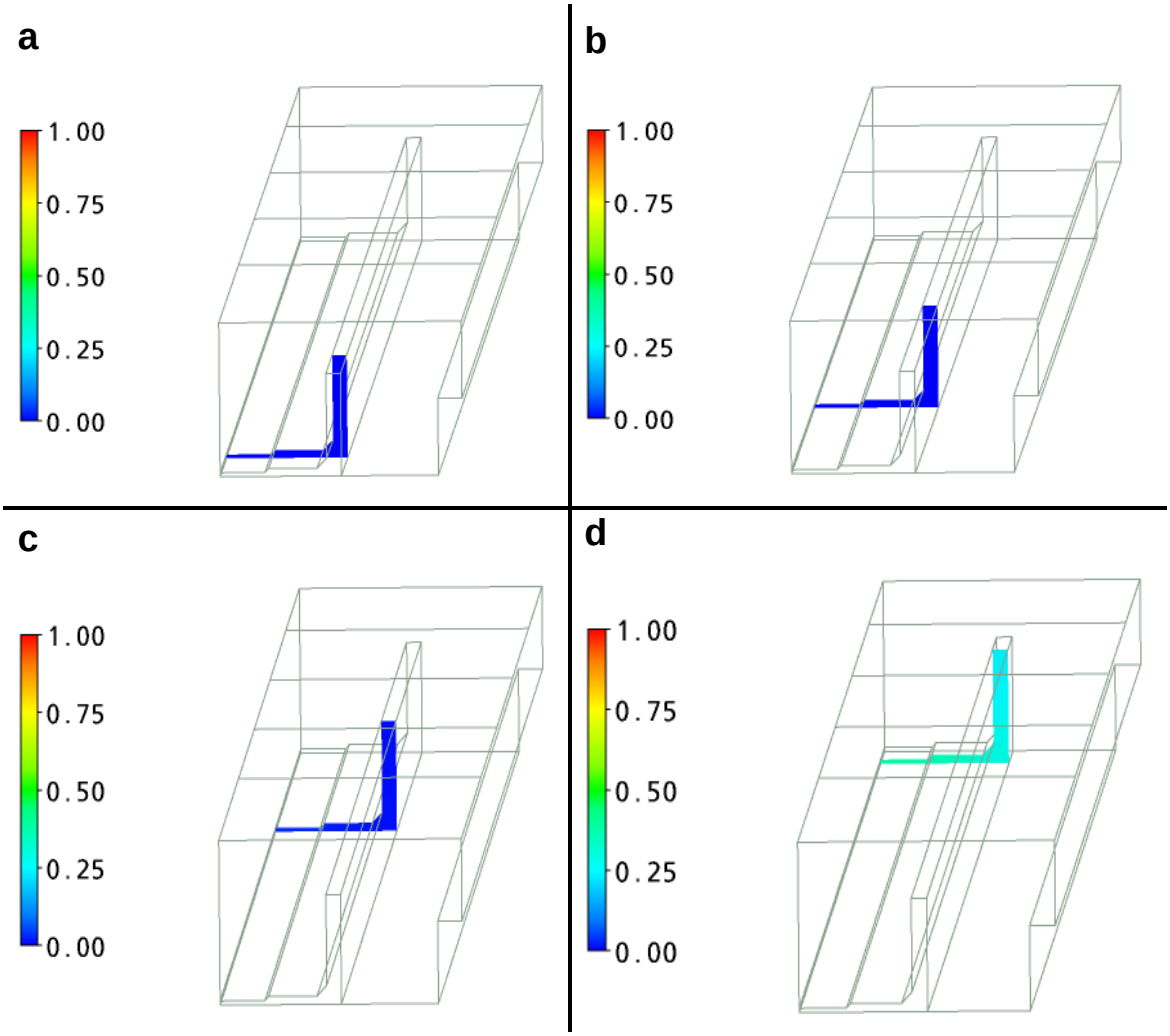


Figura 4.17. Grau de cura na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$: **(a)** $z = 0$, **(b)** $z = 0{,}2$, **(c)** $z = 0{,}8$ e **(d)** $z = 1{,}0\ m$.

Já na Figura 4.18, ilustra-se a comparação do perfil de cura, avaliado no centro do compósito, entre os resultados deste estudo e os resultados de LIU (2001). Nota-se que o material também não cura completamente no centro do compósito, atingindo grau de cura de aproximadamente 0,55.

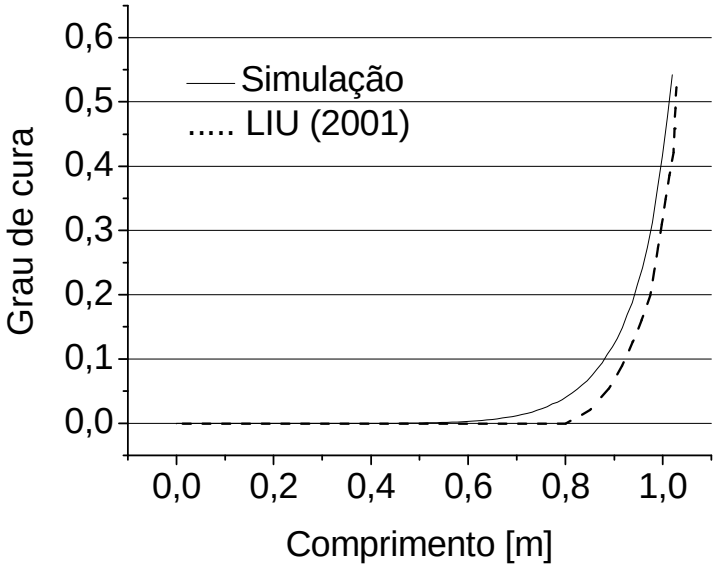


Figura 4.18. Perfil de cura no centro do compósito na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$, resultante do cálculo da otimização.

Esses resultados indicam que o aumento da velocidade desfavorece a cura da resina, ou seja, a um valor de velocidade muito elevado, a reação não ocorre por completo dentro do molde, e, consequentemente, o material sai do molde não completamente reagido, isto é, com baixo valor de grau de cura, comprometendo a sua estrutura. Como sugestão, uma alternativa para contornar essa deficiência seria aumentar a temperatura de um dos aquecedores com o objetivo de acelerar a reação de cura. A dificuldade é saber qual o nível de aquecimento de cada aquecedor suficiente para curar a resina de forma gradual e até um valor elevado. Este trabalho interpreta esse problema como um caso de otimização, o qual, de acordo com uma determinada disposição de aquecedores, deseja-se obter os valores do fluxo térmico (em $W \cdot m^{-2}$) mínimo de cada aquecedor. A otimização desse processo será abordada no próximo estudo de caso e os resultados, nas duas velocidades de 4 e 5 $mm \cdot s^{-1}$, serão comparados aos resultados da simulação realizada nesta seção.

4.3 Otimização do Processo

Apesar de LIU (2001) realizar estudos com o objetivo de reduzir ao custo de energia térmica utilizada no processo, não foi realizado nenhum estudo prévio sobre

otimização visando mimizar a energia consumida ou melhorar a qualidade do material. Também não foram quantificados os valores das taxas térmicas respectivas a cada aquecedor.

É importante notar que na simulação da etapa anterior impôs-se como condição de contorno os valores da temperatura da região ocupada pelos aquecedores, ou seja, utilizaou-se como condição de controno a temperatura dos aquecedores. Já nessa etapa de otimização, como o objetivo é minimizar a energia, utiliza-se como condição de controno o fluxo térmico (em $W \cdot m^{-2}$) proveniente dos aquecedores.

Defrontando-se com o desafio de otimizar a configuração térmica do processo estudado na seção anterior (com aquecedores retangulares), essa etapa tem como objetivo calcular o valor da taxa de energia mínima suficiente para curar a resina acima de um valor mínimo pré-estabelecido, nesse caso 0,95. Para o problema de otimização estudado, os seguintes valores são considerados para a busca da solução considerada ótima:

$$\begin{cases} q_{mín} = 0 \;\; W \cdot m^{-2} \\ q_{máx} = 40000 \;\; W \cdot m^{-2} \\ \alpha_{mín} = 0{,}95 \end{cases}$$

Esses valores são as restrições do problema de otimização que traduz os limites da variável de decisão e da variável dependente. Os parâmetros do algoritmo da Técnica de Enxame de Partículas, utilizado para otimização, são mostrados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3. Parâmetros do algoritmo de otimização

Número de partículas	20
Número máximo de iterações	10
c_1	1
c_2	0,75
ξ	10000

Neste trabalho não foi realizado nenhum estudo aprofundado com o intuito de aumentar a eficiência do algoritmo de otimização. Somente foi realizado um estudo

prévio para avaliar o número de partículas do método, e com 30 partículas já foi possível configurar o algoritmo para encontrar o resultado ótimo com poucas iterações. Apesar do elevado esforço computacional para o cálculo da otimização o número máximo de iterações da Técnica de Enxame de Partículas para minimizar a função objetivo foi três, porém, configurou-se o algoritmo para calcular até dez iterações. Os valores das constantes c_1 e c_2, sugeridos no estudo de SCHWAAB (2005), foram utilizados neste problema. Pelo fato do algoritmo de enxame de partículas ser um método estocástico, e não garantir encontrar a solução ótima, não se descarta a possibilidade de existirem valores melhores que os obtidos pelo algoritmo, mas sim, resultados próximos ao valor ótimo. Nesse contexto, com o objetivo de encontrar a solução ótima, o cálculo de otimização foi repetido cinco vezes para cada problema e o valor mínimo da função objetivo obtido dentro do universo de resultados foi considerado como o valor ótimo. Semelhantemente à etapa anterior, dois valores de velocidade foram considerados para o estudo da otimização: 4 e 5 $mm \cdot s^{-1}$.

(i) Velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$.

A Tabela 4.4 mostra os resultados de cinco repetições do cálculo da otimização. Os resultados comprovam a natureza aleatória do método, pois os valores da função-objetivo são diferentes para cada cálculo. De acordo com a Tabela 4.5, o mínimo valor encontrado corresponde a 374 W, que corresponde à taxa de energia mínima usada para curar o material 95 %.

No resultado do cálculo mostrado na Tabela 4.5 percebe-se que em três iterações o algoritmo encontra a solução ótima. A cada iteração o algoritmo de otimização estima diferentes valores de fluxo de calor de cada aquecedor, em busca da solução ótima, e armazena o valor mínimo calculado da função objetivo. Nessa tabela é possível visualizar o valor estimado do fluxo térmico dos aquecedores a cada iteração, além da taxa total de energia e grau de cura final. De acordo com os resultados, após três iterações, o valor ótimo da função-objetivo foi 374 W, o que representa o valor mínimo da energia consumida para produzir um compósito 95 % curado na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. Para conduzir o processo nessa condição, deve-se configurar o aquecedor 1

para operar com uma potência térmica de 8197 $W \cdot m^{-2}$ e o aquecedor 2 com 10195 $W \cdot m^{-2}$. Nota-se que, ao contrário da configuração utilizada por LIU (2001), em que se utiliza o aquecedor lateral, o cálculo da otimização desconsidera a utilização desse aquecedor para alcançar o objetivo de minimizar a energia.

Tabela 4.4 Resultados da otimização a 4 $mm \cdot s^{-1}$

Cálculo	Função objetivo: taxa total $[W]$
1	434
2	398
3	374
4	403
5	419

Tabela 4.5 Resultado da otimização do processo à velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$

Iteração	q_1 $\left[W \cdot m^{-2}\right]$	q_2 $\left[W \cdot m^{-2}\right]$	q_3 $\left[W \cdot m^{-2}\right]$	Função objetivo: taxa total $[W]$	Grau de cura final
1	27640	4588	17513	1359	1.0
2	0.00	18700	0.00	390	0.95
3	8198	10195	0.00	374	0.95

Nas Figuras 4.19 e 4.20, ilustram-se os resultados do cálculo da otimização, representando-se o perfil de temperatura do molde e do compósito, respectivamente, equivalente a cada iteração da Tabela 4.5. Na Figura 4.19 percebe-se que na primeira iteração, Figura 4.19 **(a)**, o algoritmo estima valores de fluxo térmico elevados para os aquecedores, resultando em um molde bastante aquecido, com temperatura máxima em torno de 680 K. Já na segunda iteração, Figura 4.19 **(b)**, o molde apresenta-se bem menos aquecido que na interação anterior, utilizando somente o aquecedor 2,

configurado na temperatura de 680 K. Na terceira iteração, Figura 4.19 **(c),** (configuração ótima), é possível notar que o molde apresenta distribuição de temperatura mais uniforme se comparado ao perfil de temperatura obtido na iteração anterior. Isso se deve ao fato de se utilizar o aquecedor 1, e minimizar o fluxo de energia do aquecedor 2. Comparando o resultado da configuração térmica ótima, Figura 4.19 **(c)**, com o resultado da simulação da etapa anterior, Figura 4.19 **(d)**, percebe-se que a maior parcela de redução de energia se dá na seção de entrada do molde e também na parte lateral, devido a menores valores observados de temperatura. Entretanto, essa economia é complementada com uma parcela maior de aquecimento na extremidade de saída do molde, proveniente do aquecedor 2, sendo suficiente para ativar a reação de cura nesse local. Isso significa que, embora a temperatura seja elevada pontualmente nessa região, não significa que a taxa total de energia seja superior.

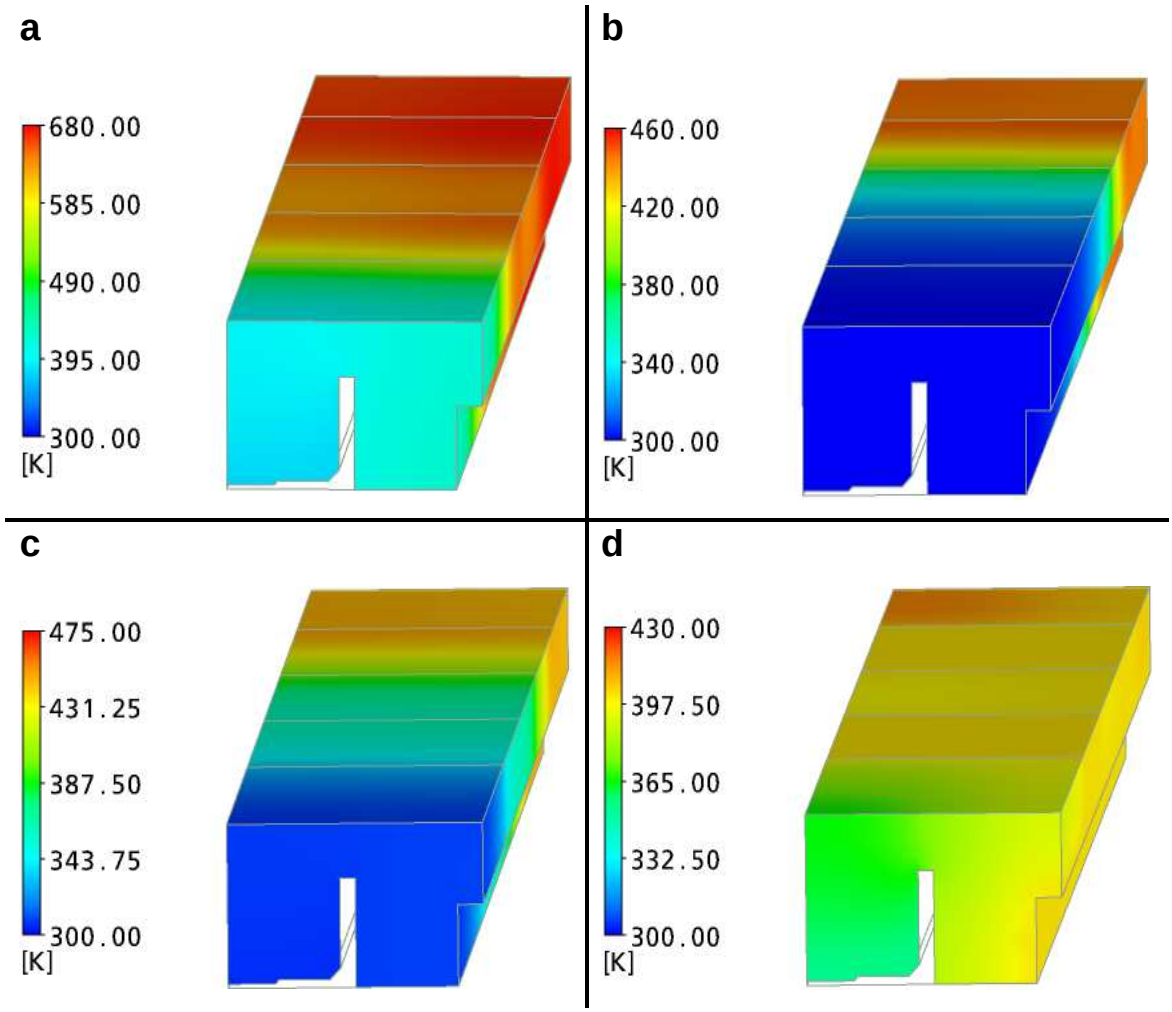


Figura 4.19. Perfil de temperatura do molde **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** iteração 3 (perfil ótimo), **(d)** simulação do caso anterior.

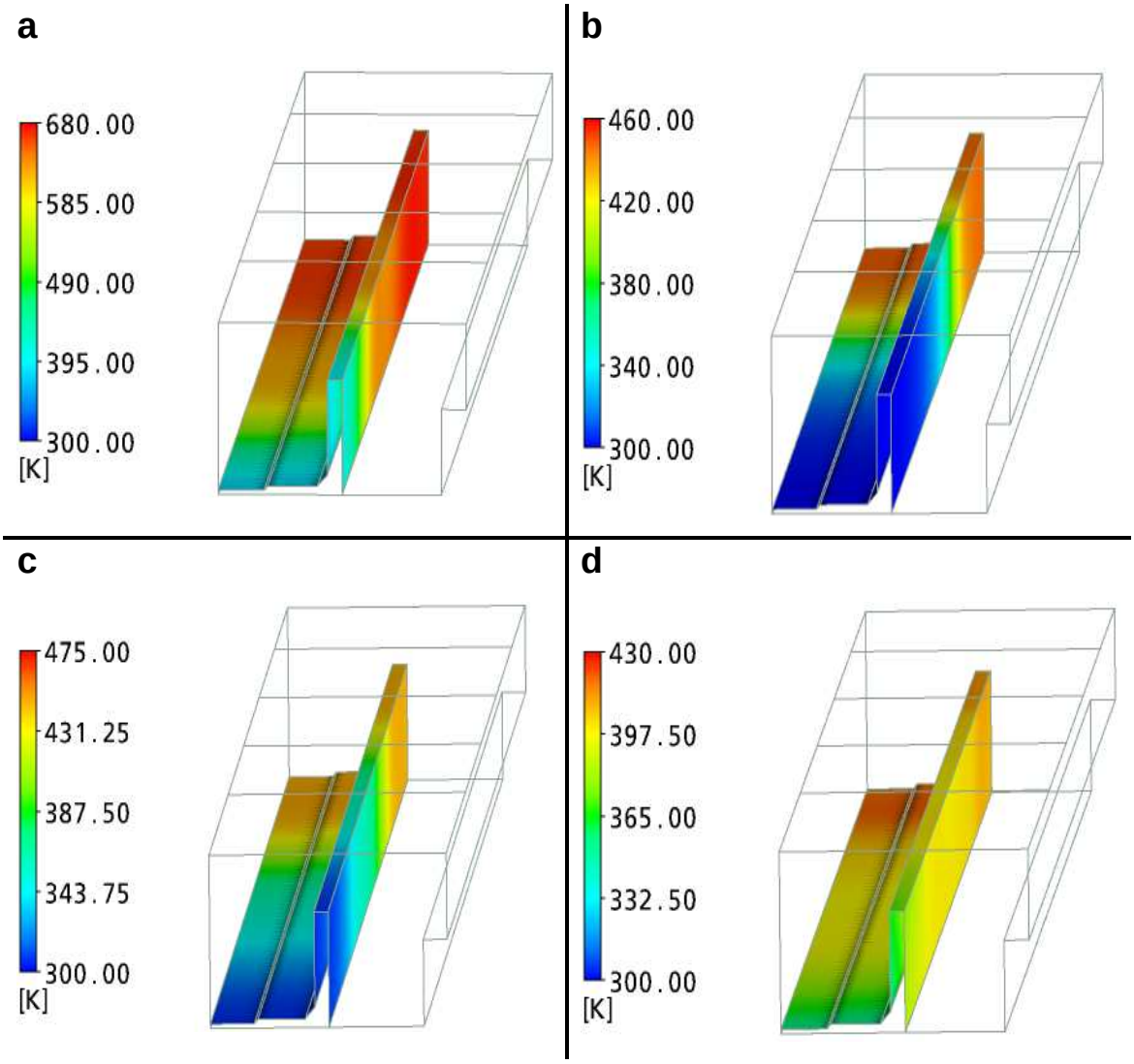


Figura 4.20. Perfil de temperatura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** iteração 3 (perfil ótimo), **(d)** simulação do caso anterior.

O perfil de temperatura no centro do compósito é representado na Figura 4.21 onde é mais fácil observar que a temperatura no centro do material apresenta uma trajetória semelhante à trajetória obtida na simulação da etapa anterior.

Na Figura 4.22, nota-se que o algoritmo de otimização tende a ajustar o nível de aquecimento do molde de maneira que a resina atinja o grau de cura mínimo estabelecido, de 0,95. Comparando com o perfil de cura, resultante da simulação da etapa anterior, nota-se que os dois resultados são semelhantes, com considerável elevação do grau de cura concentrada na extremidade final do molde.

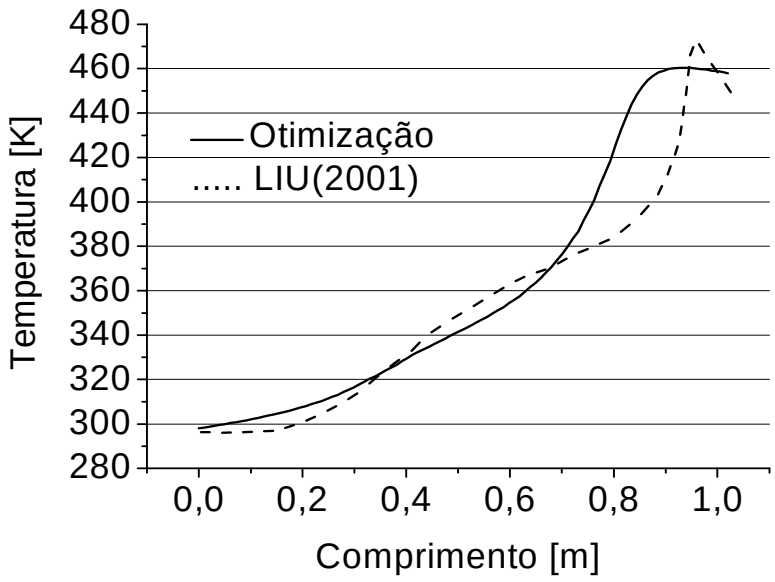


Figura 4.21. Perfil de temperatura no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$.

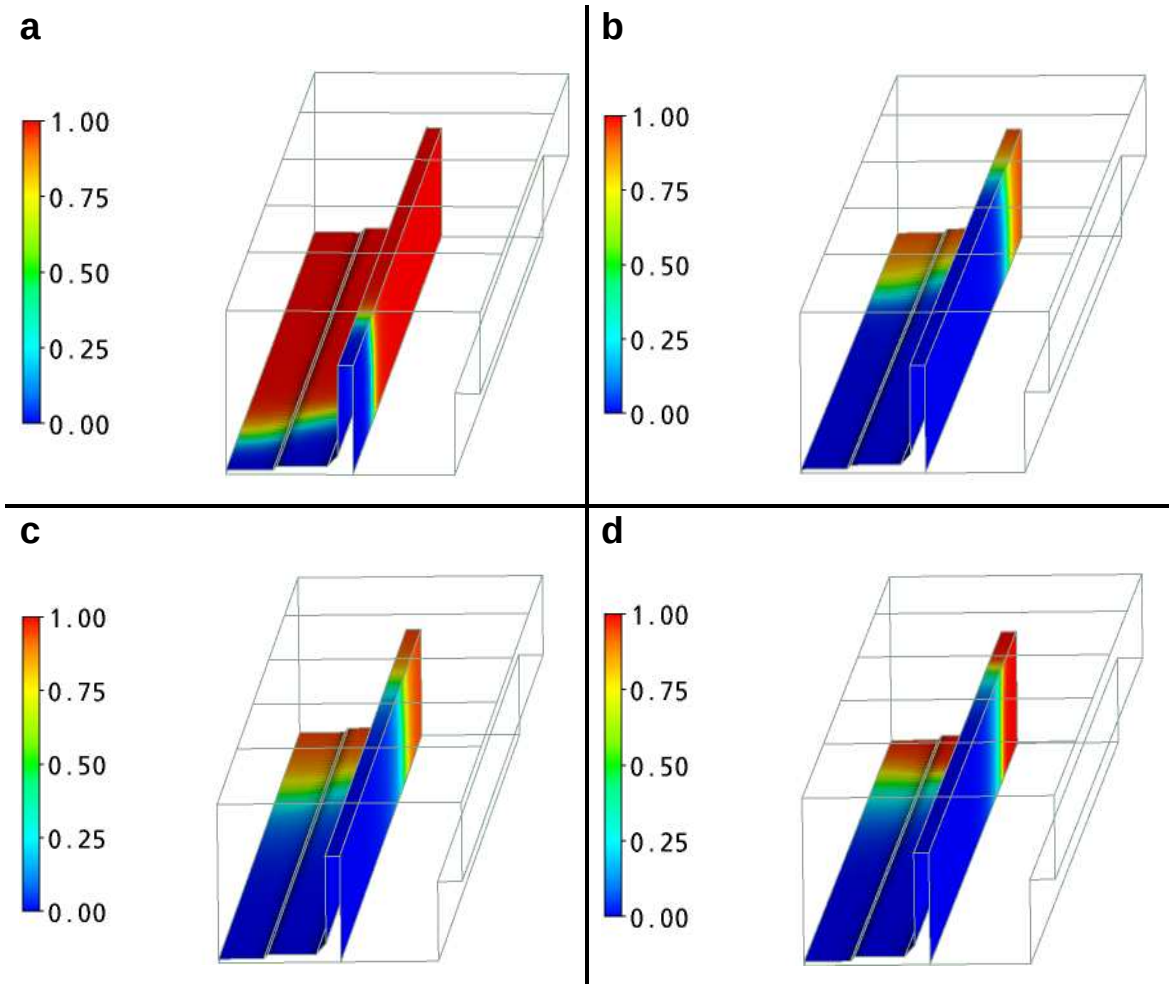


Figura 4.22. Perfil de cura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** iteração 3 (perfil ótimo), **(d)** simulação do caso anterior.

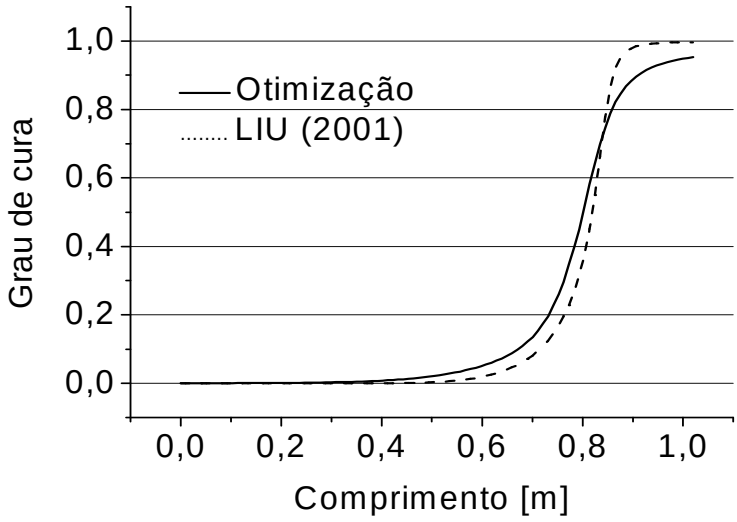


Figura 4.23. Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$.

O mesmo cálculo de otimização foi realizado para o processo configurado na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$ e comparado aos resultados da simulação da etapa anterior.

(ii) Velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$.

A Tabela 4.6 mostra os resultados dos cinco cálculos da otimização realizados pela Técnica de Enxame de Partículas, relativos ao processo configurado na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$.

Tabela 4.6 Resultados da otimização a 5 $mm \cdot s^{-1}$

Cálculo	Função objetivo: taxa total $[W]$
1	555
2	508
3	502
4	510
5	536

O mínimo valor encontrado da função-objetivo foi 502 W, que corresponde à taxa de energia mínima usada para curar o material acima de 95%. O resultado desse cálculo é mostrado na Tabela 4.7, onde se observa que na segunda iteração, o algoritmo já encontrou a solução ótima. De acordo com esse resultado, deve-se configurar o aquecedor 1 para operar com uma potência térmica de 3752 $W \cdot m^{-2}$, o aquecedor 2 com 1548 $W \cdot m^{-2}$ e o aquecedor lateral com 9502 . $W \cdot m^{-2}$.

Tabela 4.7 Resultado da otimização do processo à velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$

Iteração	q_1 $\left[W \cdot m^{-2}\right]$	q_2 $\left[W \cdot m^{-2}\right]$	q_3 $\left[W \cdot m^{-2}\right]$	Função-objetivo: taxa total $[W]$	Grau de cura mínimo no final da seção do molde
1	2503	3247	9369	509	1,0
2	3752	1548	9502	502	0,95

Nas Figuras 4.24 e 4.25 ilustram-se os resultados do cálculo da otimização, representando-se o perfil de temperatura do molde e do compósito equivalente a cada iteração da Tabela 4.8.

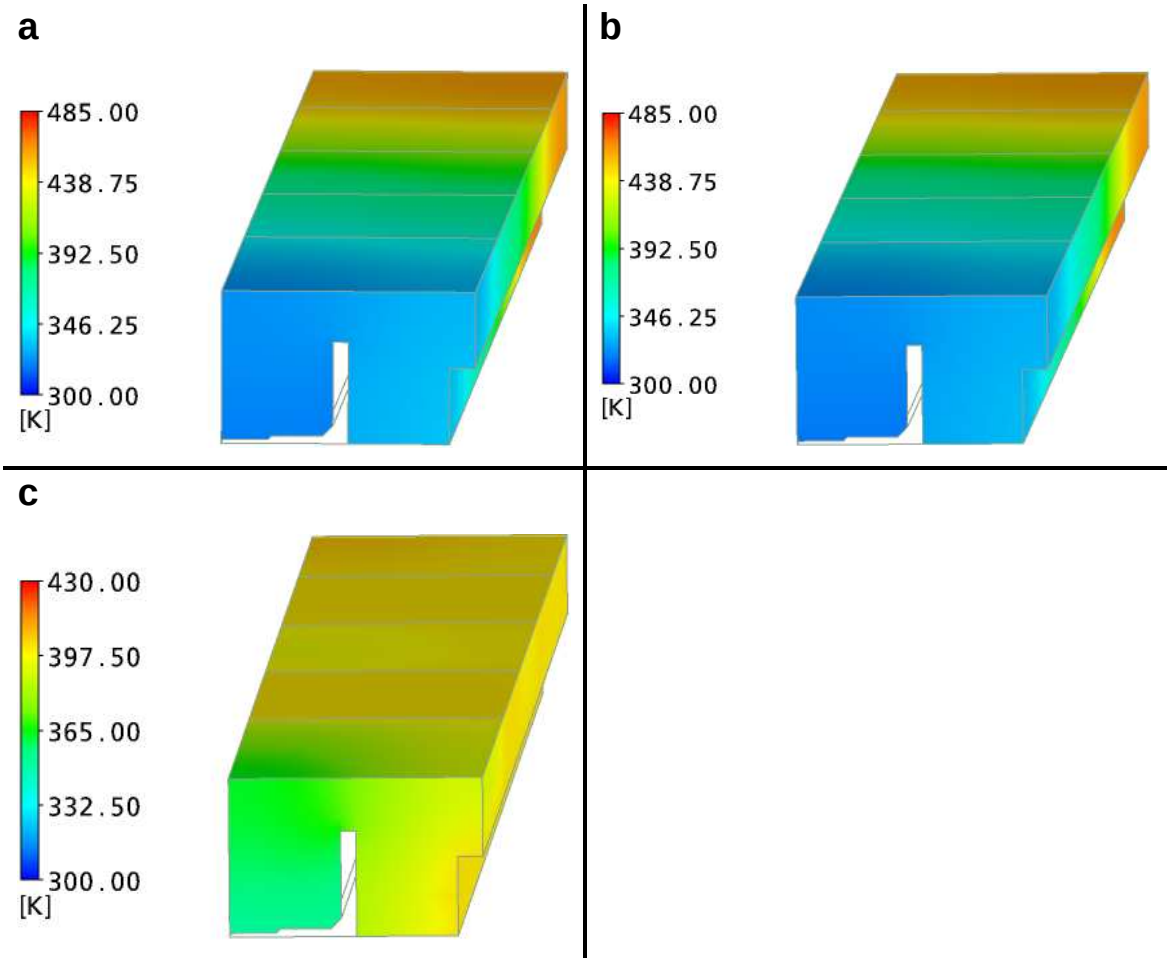


Figura 4.24. Perfil de temperatura do molde **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** resultados da simulação.do caso anterior.

Comparando-se a configuração térmica ótima, Figura 4.24 **(b)**, com a simulação da etapa anterior, Figura 4.24 **(c)**, nota-se que, na configuração ótima, o molde é mais aquecido que na configuração original, com a diferença que na configuração original, o nível de aquecimento não é suficiente para curar a resina acima de 95%. Por esse motivo o algoritmo tende a elevar o nível de energia para curar a resina a um nível mais elevado. Essa característica também é visualizada na Figura 4.25 onde é visível que na parte final do molde o compósito tem a temperatura elevada pelo calor gerado da reação de cura.

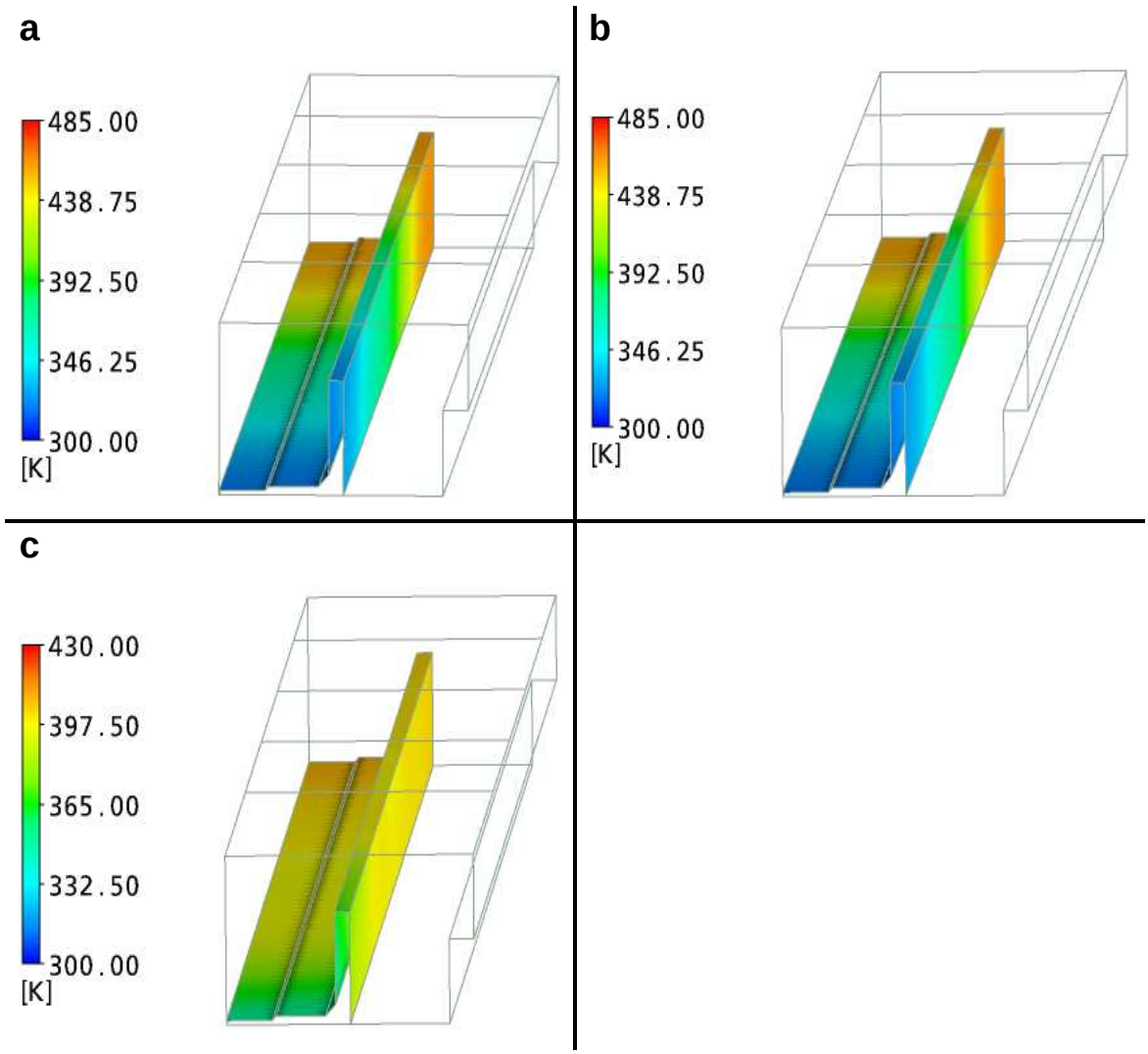


Figura 4.25. Perfil de temperatura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** resultados da simulação.do caso anterior.

O perfil de temperatura no centro do compósito é representado na Figura 4.26. É mais fácil observar que no perfil de temperatura obtido no cálculo da otimização, o compósito é aquecido até um nível de temperatura superior, 450 K, se comparado ao problema original.

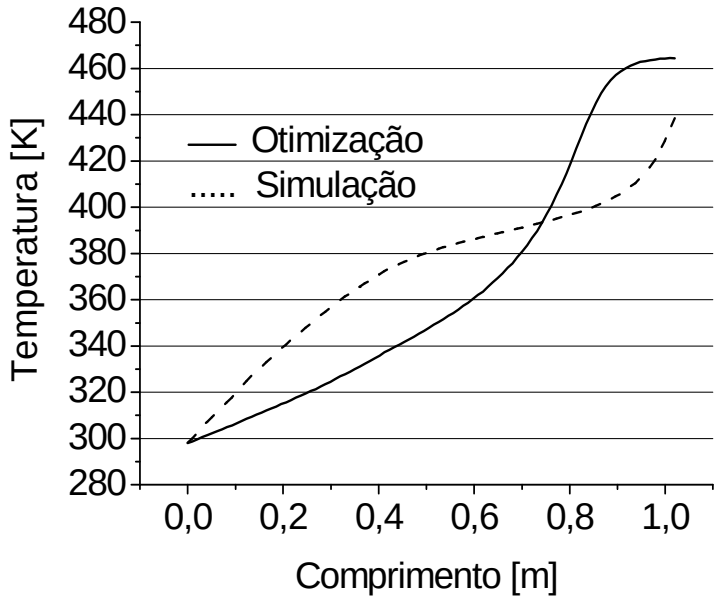


Figura 4.26. Perfil de temperatura ótimo no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$.

A Figura 4.27 mostra claramente a busca pelo perfil de cura ótimo pelo algoritmo de otimização. Da mesma maneira que no cálculo relativo à velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$, o algoritmo ajusta o perfil de cura, Figura 4.27 **(c)**, de forma que a resina cure acima de 0,95. Já no problema original, o material reage pouco, atingindo um valor de grau de cura de 0,45. Esse resultado pode ser visualizado com mais detalhe na Figura 4.28, a qual representa graficamente o perfil de cura do centro do compósito.

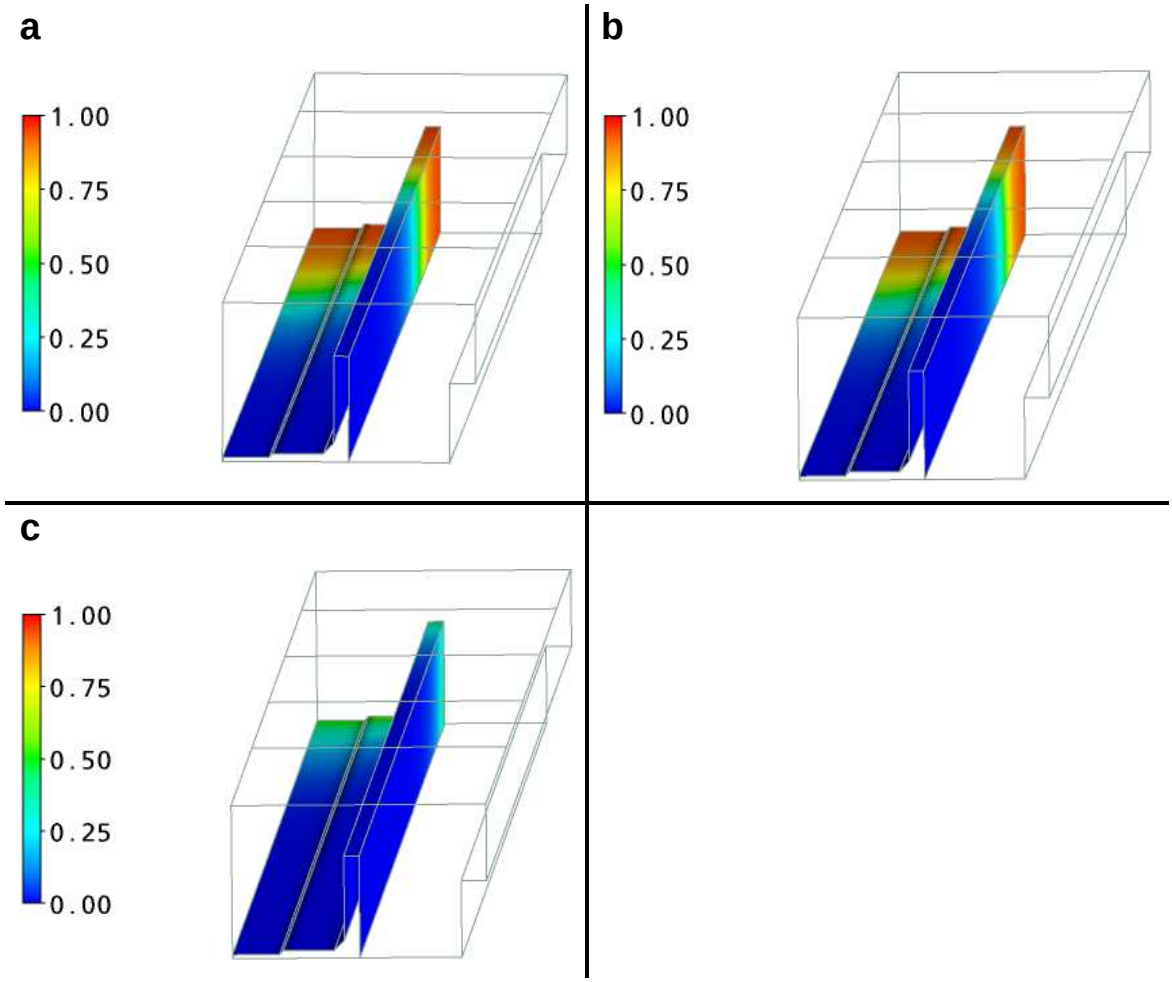


Figura 4.27. Perfil de cura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** resultados da simulação.do caso anterior.

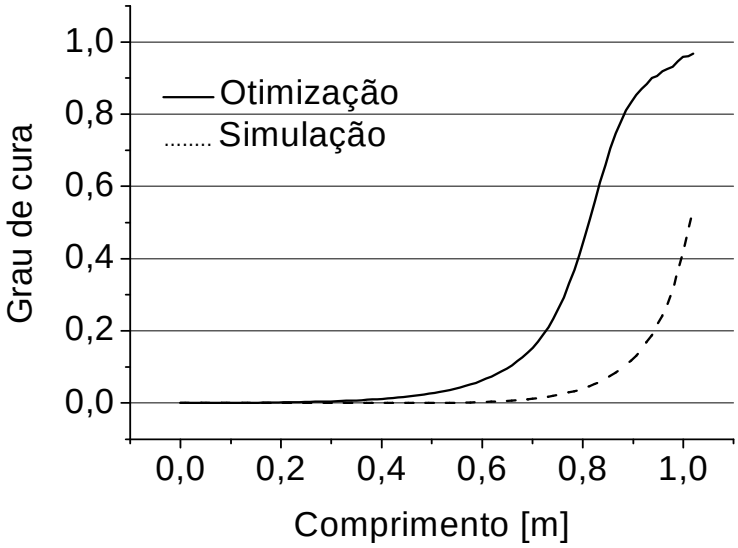


Figura 4.28. Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização, na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$

Os resultados da otimização do processo, configurado na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$, são interessantes pois para aumentar o grau de cura de 50% para um valor superior a 95 % o algoritmo de otimização eleva a energia utilizada para aquecer ainda mais a resina, com o objetivo de curar o material a um nível mais elevado. A otimização, nesse caso, mostra-se um procedimento importante pois, o caminho natural seria elevar a taxa de energia sem saber, ao certo em qual aquecedor e também o nível de aquecimento. Entretanto, com o procedimento de otimização, é possível calcular esse valor de forma a evitar o desperdício de energia, pois nesse caso, é possível calcular a distribuição ótima de energia ao longo da peça.

4.4 Otimização do Processo de Pultrusão Utilizando Aquecedores Internos

A terceira etapa deste estudo é semelhante à etapa anterior, porém, propõe-se modificar a arquitetura de aquecedores do molde com o objetivo de minimizar ainda mais a taxa de energia utilizada para aquecer o molde e curar o material. De acordo com os resultados da otimização da etapa anterior, observou-se que a disposição de aquecedores utilizada por LIU (2001) pode ser modificado, se o objetivo for minimizar a energia. Por exemplo, no primeiro cálculo, a solução desconsidera a utilização do aquecedor lateral. Dessa forma, estima-se que dois aspectos relevantes podem ser considerados para a otimização: dimensão e posição dos aquecedores no molde. A posição dos aquecedores exerce influência direta sobre o valor da taxa de energia despendida. Se uma quantidade muito elevada de energia for aplicada, por exemplo, próximo à seção de entrada do molde, como ilustrado na Figura 4.29, a reação de cura pode iniciar muito rapidamente, fato que pode comprometer a estrutura do material. Além disso, dependendo da dimensão do aquecedor, a potência aplicada pode ser insuficiente para manter o molde aquecido até o final da seção e continuar a reação de cura.

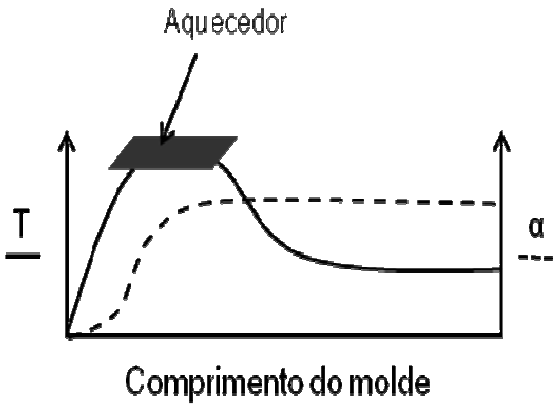


Figura 4.29. Ilustração do perfil de temperatura e grau de cura resultantes do posicionamento do aquecedor térmico próximo à seção de entrada do molde.

Uma alternativa para evitar esse problema e curar o material a um nível elevado seria aumentar a área superficial do aquecedor ou posicioná-lo em uma região intermediária do molde, Figura 4.30.

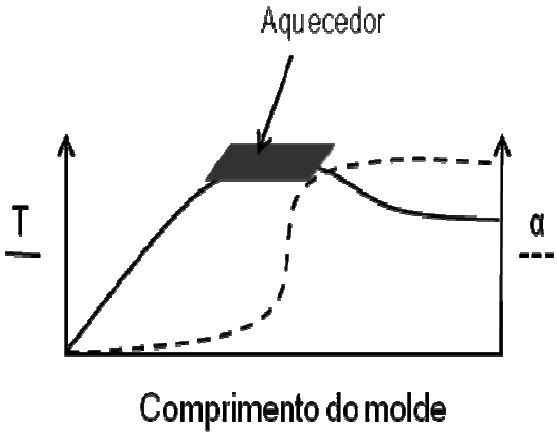


Figura 4.30. Ilustração do perfil de temperatura e de grau de cura resultantes do posicionamento do aquecedor térmico próximo à seção intermediária do molde.

Porém, se a dimensão do aquecedor for muito elevada ou se utilizarem mais aquecedores cobrindo grande parcela da superfície do molde, conforme ilustra a Figura 4.31, pode-se desperdiçar energia aquecendo excessivamente o material sem necessidade.

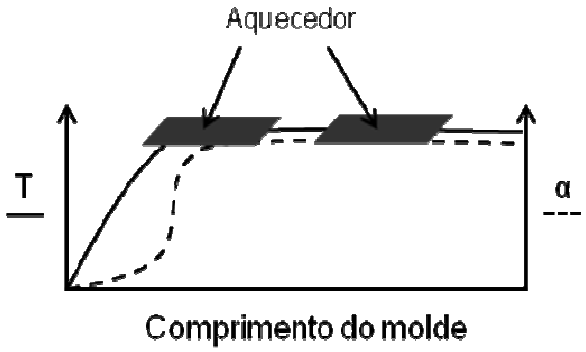


Figura 4.31. Ilustração do perfil de temperatura e de grau de cura resultantes do posicionamento do aquecedores na seção intermediária do molde.

As Figuras 4.30 e 4.31 ilustram um exemplo desse efeito. Em ambos os casos seria possível a obtenção de um material curado com mesmo grau de cura; porém, na Figura 4.31 utilizar-se-ia mais um aquecedor desnecessariamente, gastando-se maior quantidade de energia que na configuração utilizada na Figura 4.30. Consequentemente, essa interpretação sugere que a melhor maneira de aquecer a resina de forma que cure gradualmente conforme passa pelo molde seria utilizar aquecedores de área superficial pequena em comparação à área superficial do molde, Figura 4.31, permitindo assim distribuir a energia de forma otimizada, ou seja, impondo gradientes de temperatura pontuais ao longo da peça.

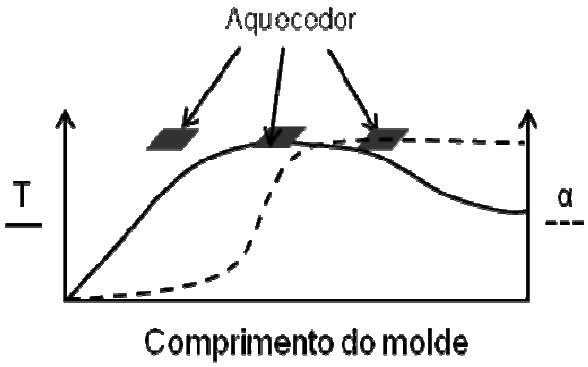


Figura 4.32. Ilustração do perfil de temperatura e de grau de cura resultantes de aquecedores de área supercicial pequena comparada à área superficial do molde.

Com o objetivo de minimizar a limitação causada pelo posicionamento e dimensão dos aquecedores, propõe-se simular um processo com aquecedores internos, de área superficial pequena comparada ao molde, conforme ilustra a Figura 4.33. Dessa

maneira, o algoritmo de otimização tem maior número de opções de manipular os valores dos fluxos dos aquecedores, para encontrar a solução ótima, além de possibilitar a obtenção da cura gradual da resina, gastando-se menor quantidade de energia além de isolar a superfície externa do molde.

Para esta etapa, consideram-se cinco aquecedores internos, com seção transversal cilíndrica de diâmetro 0,02 m e área superficial de 0,005 m^2 distribuídos em um molde, conforme ilustra a Figura 4.34. Da mesma forma que na etapa anterior, realizou-se a otimização do processo configurado nas velocidades de 4 e 5 $mm \cdot s^{-1}$.

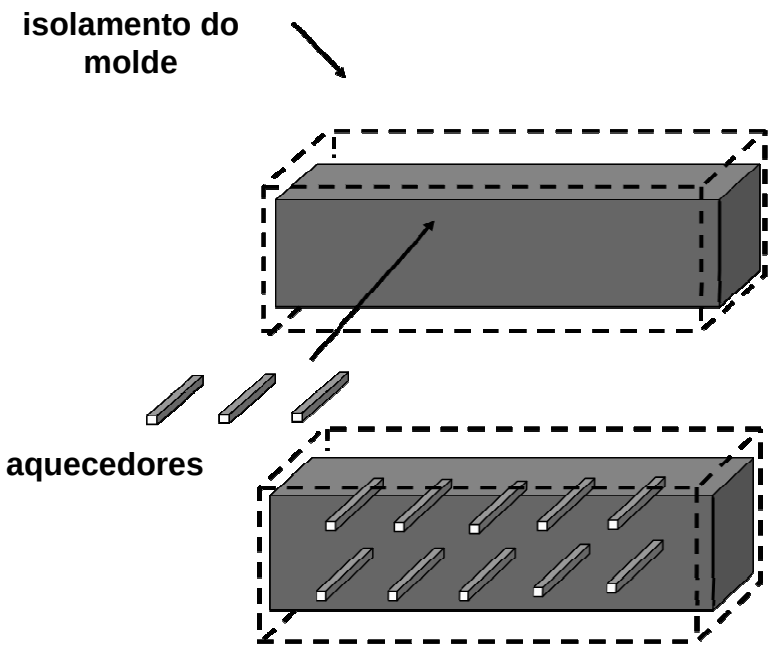


Figura 4.33. Sugestão de configuração de aquecedores internos no molde de pultrusão.

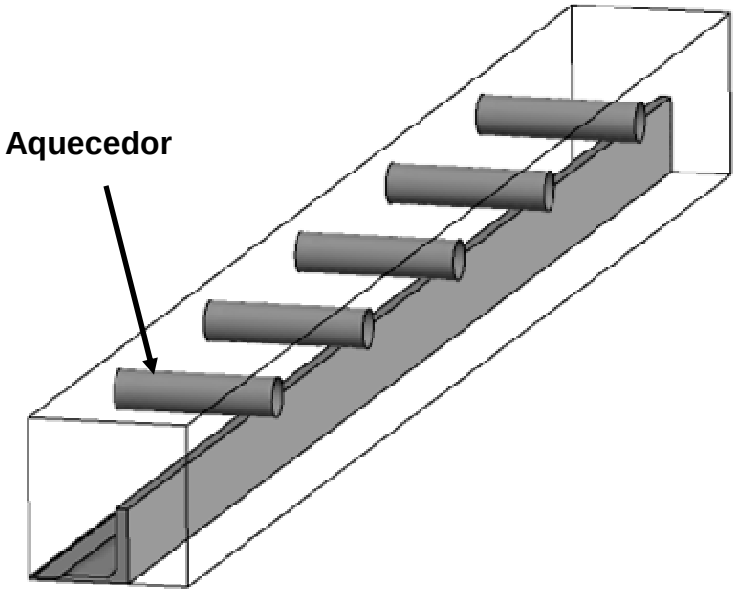


Figura 4.34.. Desenho da estrutura (um quarto de um molde com cavidade de geometria “I”) utilizando aquecedores internos.

(i) Velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$.

A Tabela 4.8 mostra os resultados dos cinco cálculos da otimização realizados pela Técnica de Enxame de Partículas. De acordo com os resultados, o valor mínimo encontrado corresponde a 260 W, o que corresponde à taxa de energia mínima despendida para curar o material a 95% na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. Esse valor é aproximadamente 30 % inferior ao valor encontrado no cálculo da otimização com aquecedores retangulares da etapa anterior, que foi 374 W. Os resultados do cálculo de otimização são mostrados na Tabela 4.9. Nota-se que o algoritmo de otimização minimiza a taxa de energia na direção da passagem do compósito pelo molde, evitando, dessa forma, o aquecimento excessivo do compósito nessa região, somado ao calor liberado pela reação de cura.

Tabela 4.8 Resultados da otimização a 4 $mm \cdot s^{-1}$

Cálculo	Função-objetivo: taxa total $[W]$
1	301
2	288
3	278
4	298
5	260

Tabela 4.9 Resultado da otimização do processo à velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$

Iteração	q_1	q_2	q_3	q_4	q_5	Função-Objetivo: taxa total $[W]$	Grau de cura mínimo na seção final do molde
1	16324	28595	11799	20974	201	389	0,98
2	12828	12333	11370	8117	7512	260	0,95

Nas Figuras 4.35 e 4.36 ilustram-se os resultados do cálculo da otimização, representando-se o perfil de temperatura do molde e do compósito equivalente a cada iteração da Tabela 4.9. Na primeira iteração do algoritmo de otimização, Figura 4.35 **(a)**, percebe-se que são encontrados valores de fluxo térmico elevados para os aquecedores, resultando em um molde bastante aquecido, com temperatura média em torno de 475 K, aproximadamente, a partir da metade do molde até o final. Entretanto, na otimização com aquecedores retangulares, Figura 4.35 **(c)**, a temperatura não ultrapassa 475 K. Já na segunda iteração, Figura 4.35 **(b)**, o molde apresenta-se bem menos aquecido que na interação anterior, Figura 4.35 **(b)**, sendo visível a redução da energia térmica para aquecer a peça. Nota-se que na configuração ótima com aquecedores internos, o molde apresenta um perfil de temperatura variado, porém,

sendo mais aquecido na etapa inicial, 340 K e menos aquecido na extremidade final, 430 K, do molde, quando comparado à Figura 4.35 **(c)**.

O perfil de temperatura do compósito, resultante do cálculo de otimização, é ilustrado na Figura 4.36. Percebe-se que, na comparação entre as Figuras 4.36 **(b)** e **(c)**, é notável que na configuração ótima, utilizando aquecimento interno, o compósito apresenta valores de temperatura menores que na otimização do caso anterior em uma localidade próxima à seção de saída do molde.

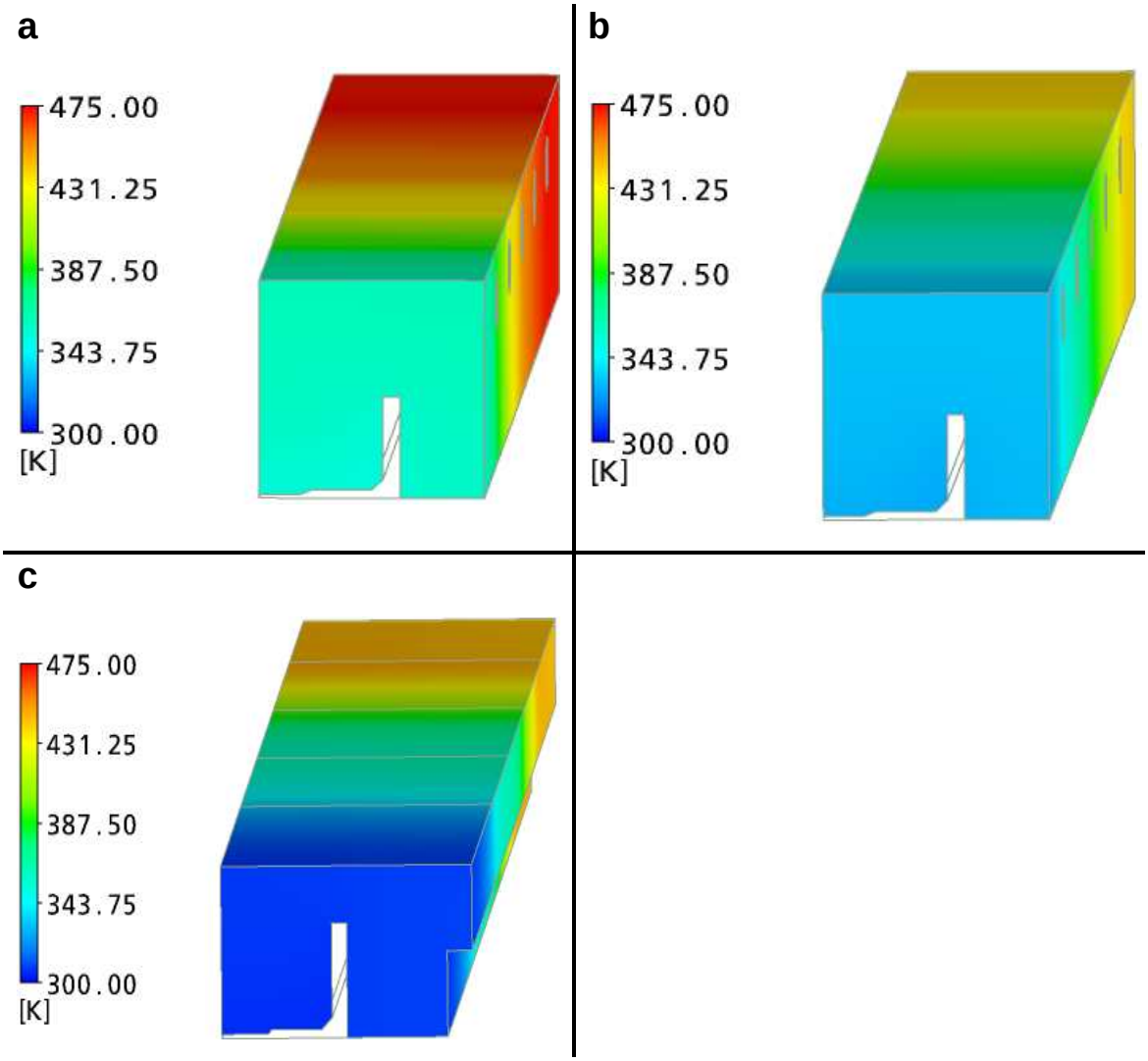


Figura 4.35. Perfil de temperatura do molde **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e, **(c)** otimização com aquecedores retangulares a 4 $mm \cdot s^{-1}$.

O perfil de temperatura no centro do compósito é representado na Figura 4.37. Percebe-se que, apesar da energia utilizada para aquecer o material ter sido 30 % inferior comparada ao caso anterior, o nível de temperatura no centro do compósito apresenta valores bem próximos, com exceção da etapa final, onde a temperatura é um pouco menor, alcançando 450 K.

Na Figura 4.38, é possível observar que o perfil de cura obtido a partir da configuração térmica com aquecedores internos é semelhante ao perfil obtido na etapa anterior, porém, é possível observar que a resina cura de forma mais gradual ao longo do molde e não somente na etapa final como na etapa anterior. Apesar disso, no centro do compósito, o perfil de cura é bem semelhante, conforme mostra a Figura 4.39.

Os resultados dessa etapa mostram que a modificação da configuração térmica, utilizada por LIU (2001), para a arquitetura de aquecedores internos com menor área superficial, minimiza o desperdício de energia térmica aproximadamente 30% para obter um compósito 95% curado. Ainda assim, essa configuração permite aumentar o número de opções (variáveis de decisão) do algoritmo de otimização para a procura da solução ótima.

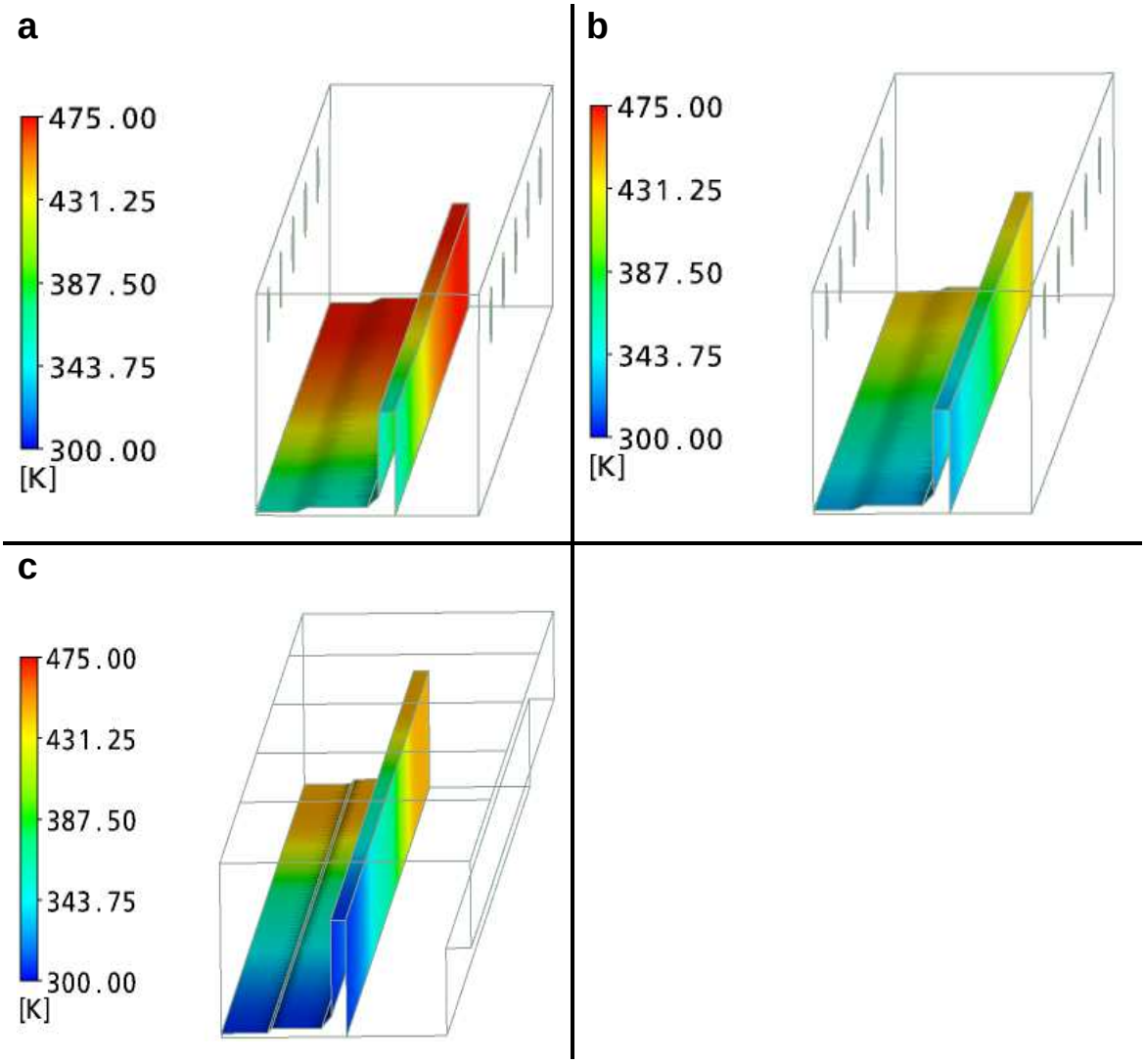


Figura 4.36. Perfil de temperatura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** otimização com aquecedores retangulares a 4 $mm \cdot s^{-1}$.

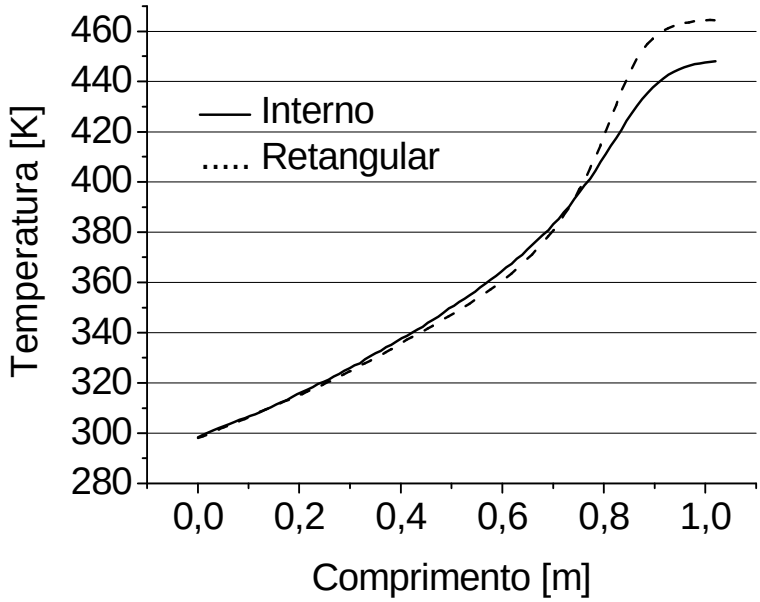


Figura 4.37. Perfil de temperatura ótimo no centro do compósito, resultante da otimização com aquecedores internos, na velocidade de $4\,mm \cdot s^{-1}$.

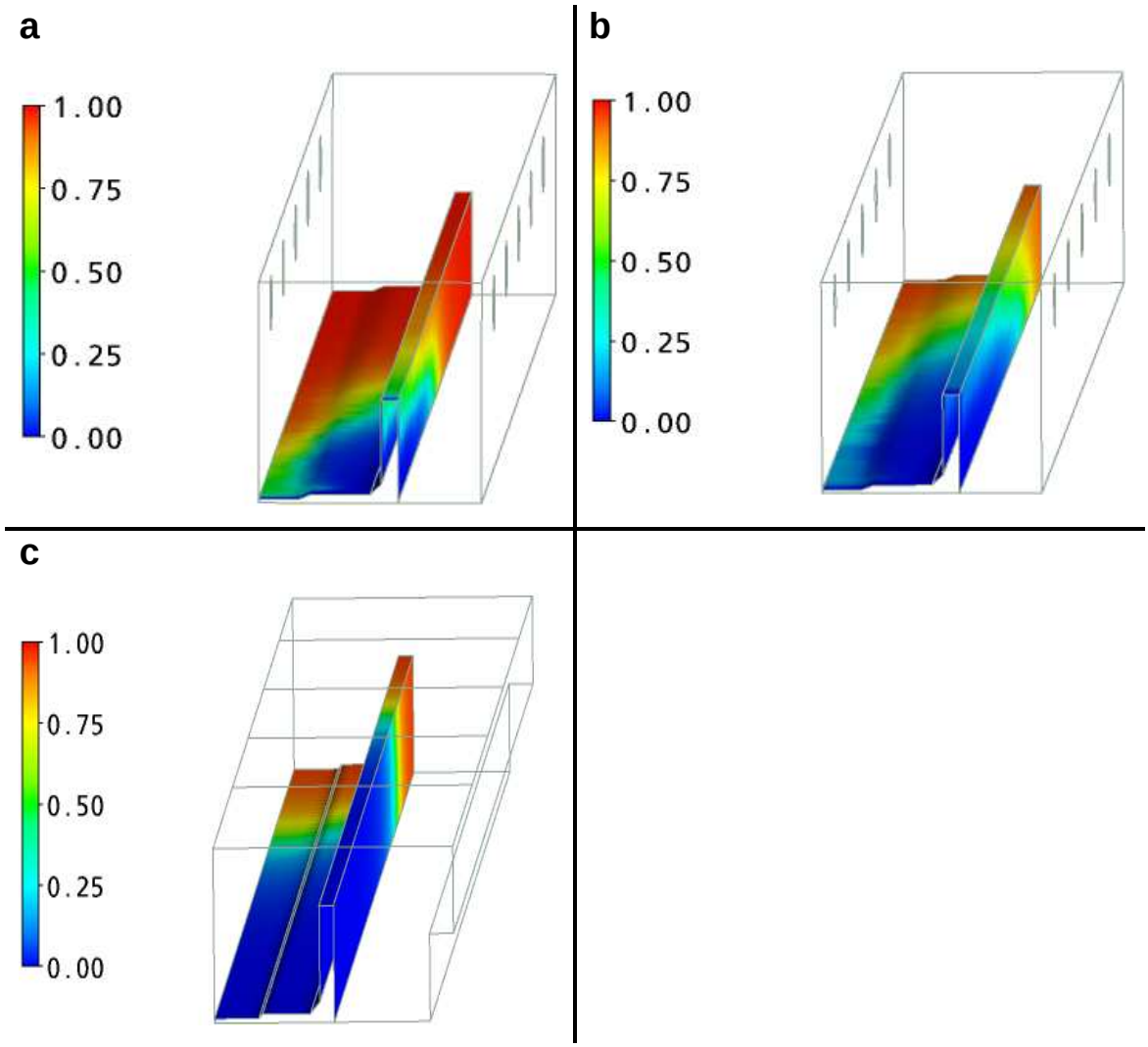


Figura 4.38. Perfil de cura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** otimização com aquecedores retangulares a 4 $mm \cdot s^{-1}$.

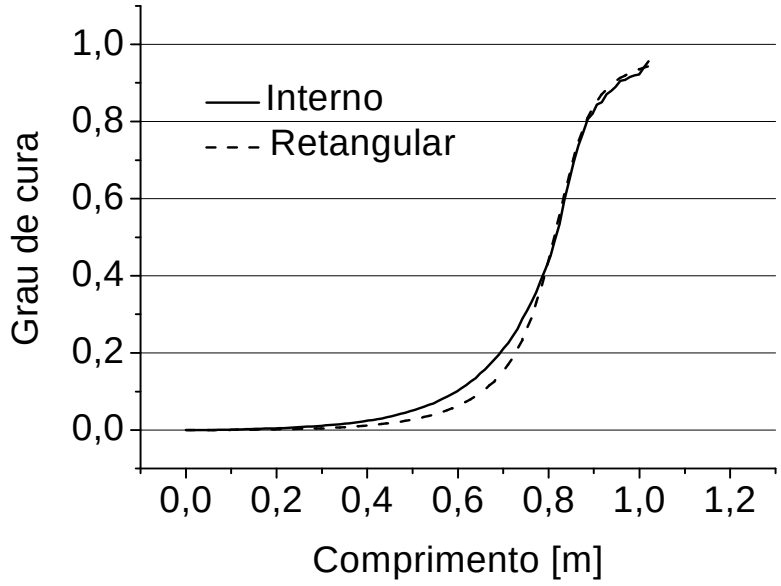


Figura 4.39. Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização com aquecedores internos, na velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$

(ii) Velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$.

A Tabela 4.10 mostra os resultados dos cinco cálculos da otimização realizados pela Técnica de Enxame de Partículas, na velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$. De acordo com os resultados, o mínimo valor encontrado corresponde a 305 W, que corresponde à taxa de energia mínima usada para curar o material acima de 95%. Esse valor é aproximadamente 40 % inferior ao valor encontrado no cálculo da otimização, 502 W, com a utilização de aquecedores retangulares. O resultado desse cálculo é mostrado na Tabela 4.11.

Tabela 4.10 Resultados da otimização à 5 $mm \cdot s^{-1}$

Cálculo	Função-objetivo: taxa total $[W]$
1	315
2	318
3	322

4	**305**
5	361

Tabela 4.11 Resultado da otimização do processo à velocidade de 5 $mm \cdot s^{-1}$

Iteração	q_1	q_2	q_3	q_4	q_5	Função-objetivo: taxa total $[W]$	Grau de cura mínimo no final da seção do molde
1	13343	45880	36546	2365	8498	492	0,99
2	29458	17450	7474	4561	21250	305	0,95

Nas Figuras 4.40 e 4.41 ilustram-se os resultados do cálculo da otimização, representando-se o perfil de temperatura do molde e do compósito equivalente a cada iteração da Tabela 4.11.

a | **b**

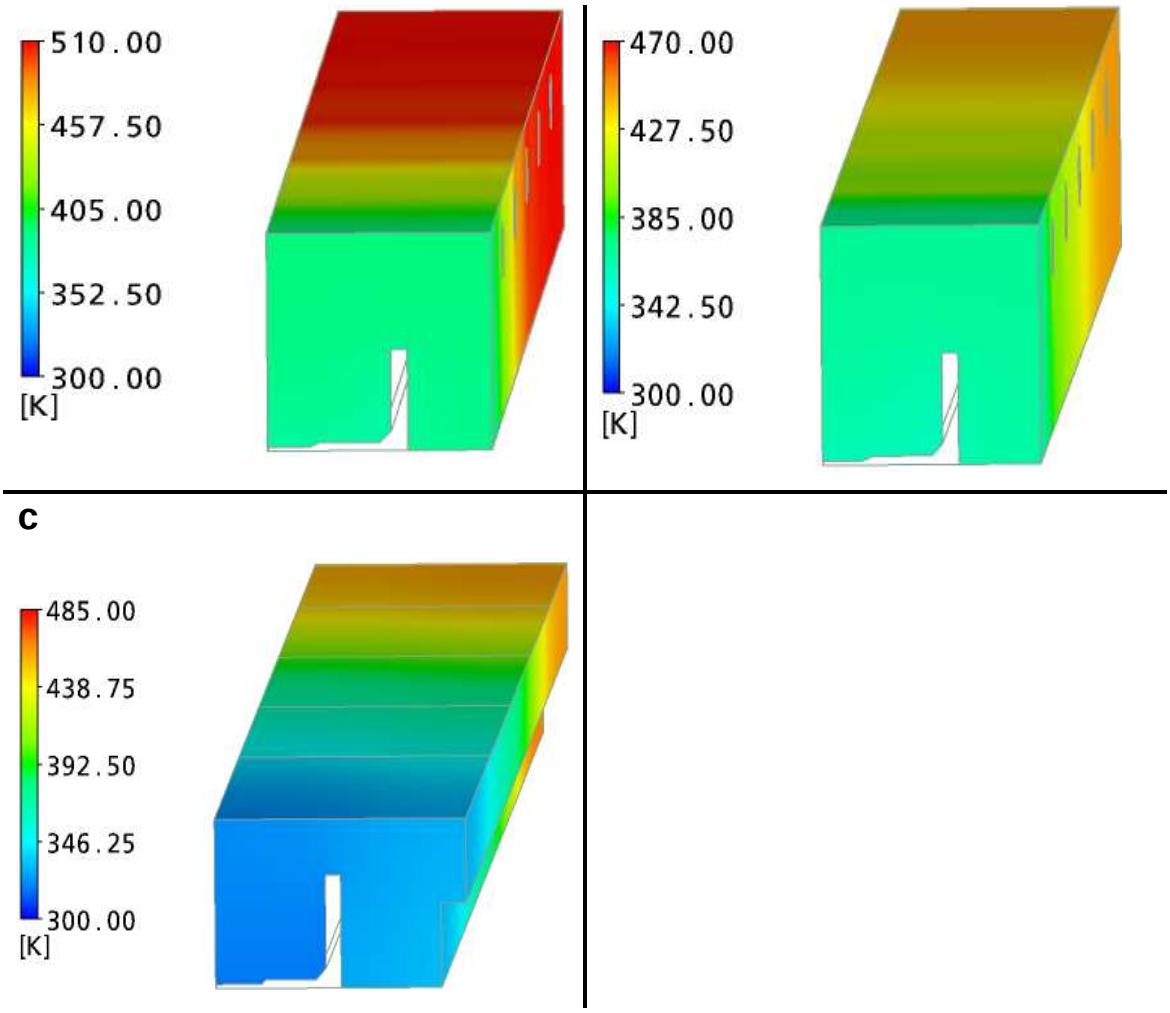


Figura 4.40. Perfil de temperatura do molde **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 (**c)** otimização com aquecedores retangulares a 5 $mm \cdot s^{-1}$.

Comparando-se a configuração térmica ótima obtida com aquecimento interno, Figura 4.40 **(b)**, com solução ótima obtida na etapa anterior, 4.40 **(c)**, nota-se que na solução com aquecedores internos o molde apresenta um perfil de temperatura que varia aproximadamente de 340 K a 440 K, enquanto que na etapa anterior o molde é visivelmente aquecido a um maior nível de temperatura, próximo a 480 K, na seção de saída, devido à reação exotérmica de cura.

O perfil de temperatura do compósito, resultante do cálculo da otimização, é ilustrado na Figura 4.41. Percebe-se que, na comparação entre as Figuras 4.41 **(b)** e **(c)**, é notável que na configuração ótima o compósito apresenta valores de temperatura inferiores aos resultados da otimização do caso anterior.

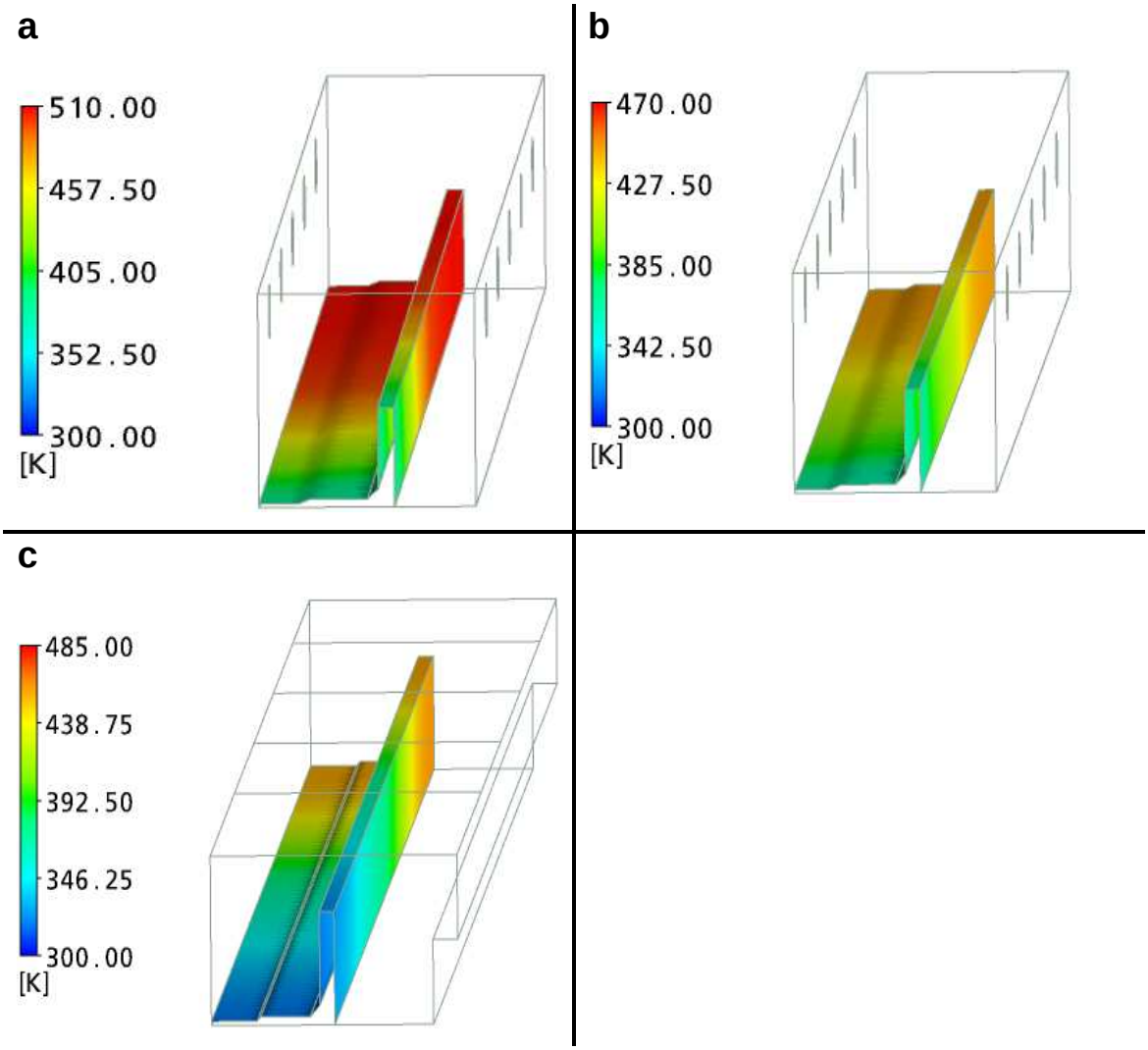


Figura 4.41. Perfil de temperatura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 e **(c)** otimização com aquecedores retangulares a 5 $mm \cdot s^{-1}$.

O perfil de temperatura no centro do compósito é representado na Figura 4.42. Apesar da energia utilizada para aquecer o material ter sido cerca de 20 % inferior, o nível de temperatura é um pouco menor, inferior a 460 K.

Na Figura 4.43, é possível observar que no perfil de cura, obtido a partir da configuração térmica com aquecedores internos, a resina cura de forma gradual ao longo do molde e não somente na etapa final. Na Figura 4.44 nota-se que no centro do compósito o perfil de cura é mais adiantado que utilizando aquecedores retangulares.

Em resumo, pode-se concluir que, semelhantemente ao caso anterior, a alternativa de se reduzir a área superficial dos aquecedores mostra-se consideravelmente eficaz para redução da energia térmica utilizada para curar o material. Nesse caso, foi possível reduzir em 40% a energia e obter o mesmo nível de cura da etapa anterior.

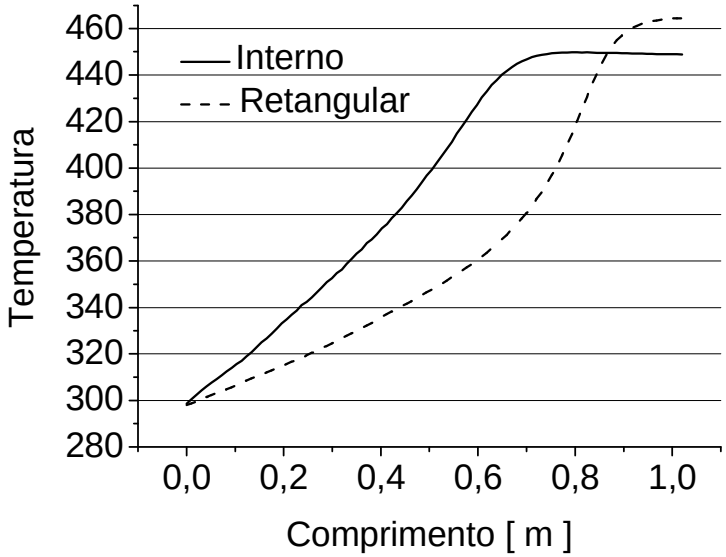
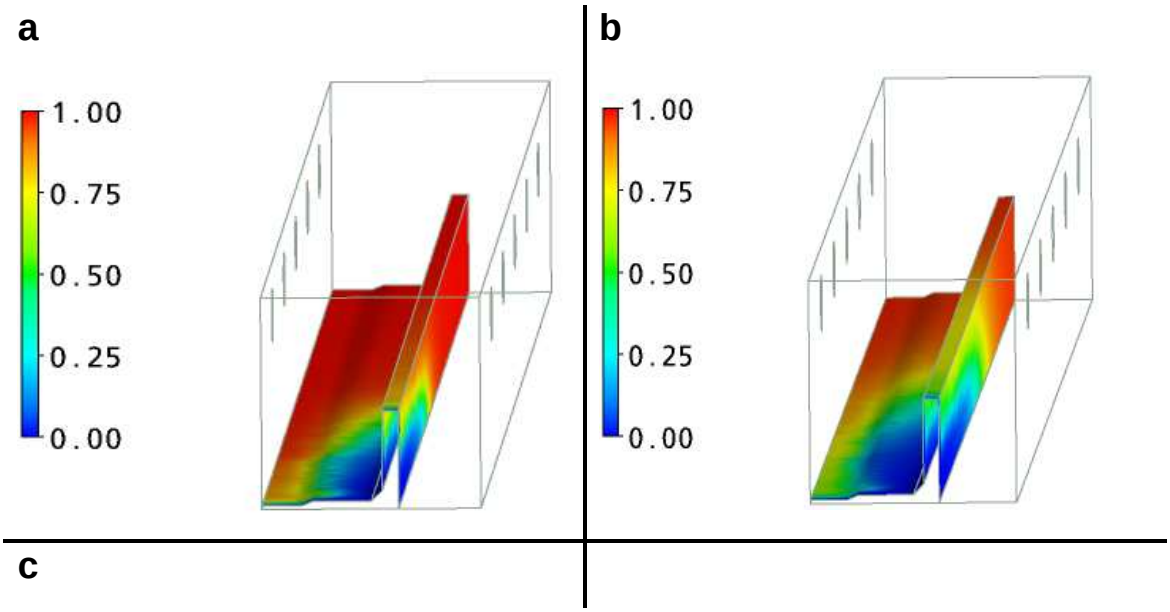


Figura 4.42. Perfil de temperatura ótimo no centro do compósito, resultante da otimização com aquecedores internos, na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$.



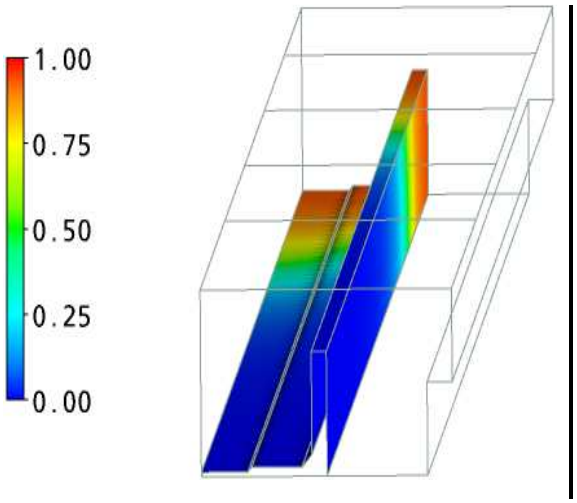


Figura 4.43. Perfil de cura do compósito **(a)** iteração 1, **(b)** iteração 2 **(c)** otimização usando aquecedores retangulares.

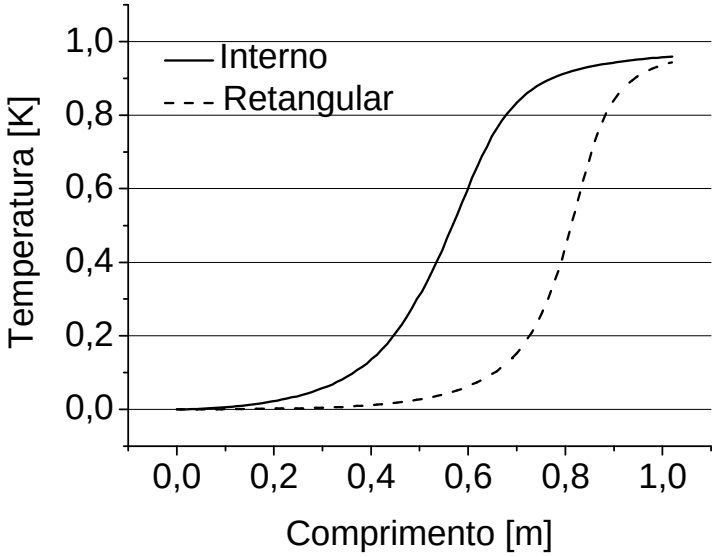


Figura 4.44. Grau de cura no centro do compósito, resultante da otimização utilizando aqucecedores internos, na velocidade de $5\,mm \cdot s^{-1}$

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

"Uma idéia verdadeira deve concordar com o objeto de que é idéia"

Baruch de Spinoza

5.1 Conclusões

Esta dissertação teve como objetivo propor uma ferramenta baseada em CFD para otimização do processo de pultrusão, com o objetivo de reduzir a energia térmica utilizada para aquecer o material e promover a reação de cura. De acordo com os resultados, podem-se tirar as seguintes conclusões deste trabalho:

(i) O modelo matemático, resolvido numericamente por meio do software CFD é adequado para simular computacionalmente o processo de pultrusão e o software revela-se uma ferramenta útil para simular esse tipo de processo, principalmente para produção de compósitos de geometria irregular, pois permite desenhar estruturas complexas.

(ii) Apesar do método de enxame de partículas ser um método estocástico, tem como principal vantagem calcular o valor ótimo sem a necessidade de cálculo do gradiente da função objetivo. Os resultados mostram que esse método pode ser utilizado para estudo da otimização do processo, pois foi capaz de minimizar a função objetivo custo do processo não otimizado.

(iii) A conexão entre o pacote CFD ANSYS CFX e o algoritmo de otimização de enxame de partículas apresenta-se como uma ferramenta bastante útil para otimizar problemas dessa natureza. Esse programa gerenciador permite a comunicação com o software CFD de forma a gerar várias simulações sucessivas manipulando-se a variável de projeto em busca do valor ótimo.

(iv) A metodologia proposta por este estudo foi aplicada a um problema especial da literatura, estudado por LIU em 2001. A simulação no ANSYS CFX coincidiu razoavelmente com os resultados do autor: tanto o perfil de temperatura como o perfil de cura. Posteriormente, otimizou-se o mesmo processo, com a ferramenta desenvolvida, e se obtiveram resultados interessantes, com redução da energia no caso da velocidade de 4 $mm \cdot s^{-1}$. A proposta de modificação da arquitetura de aquecedores no molde, com uso de aqucedores internos de área superficial significantemente menor, mostrou-se eficaz para reduzir ainda mais a energia utilizada no processo, comprovando que a redução da área dos aquecdores pode ser favorável à produção do material de forma mais econômica.

3.2 Sugestões

Conforme estudado nesta dissertação, ainda há poucos trabalhos realizados sobre o otimização do processo de pultrusão. Acredita-se que este trabalho possa contribuir para estudos futuros sobre otimização desse processo e possíveis aplicações em processos industriais no Brasil. Para o aprimoramento deste estudo tem-se como sugestões:

(i) Realizar estudos experimentais para validação da modelagem computacional do processo por meio de comparação entre resultados experimentais e teóricos;

(ii) Propor diferentes funções-objetivo, por exemplo, baseada em critérios termodinâmicos, ambientais etc.;

(iii) Aperfeiçoamento do software, com objetivo de possibilitar a variação do grau de refinamento da malha e dimensão e posição dos aquecedores no molde durante o cálculo da otimização.

REFERÊNCIAS

ABMACO – ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE MATERIAIS COMPÓSITOS. Disponível em: http://www.abmaco.org.br.

ALMEIDA, S.P.S. *Avaliação das propriedades mecânicas de compósitos pultrudados de matriz polimérica com reforço de fibra de vidro* 2004. 87 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil), Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro.

AMORIM, W.F. *Processamento de placa espessa de compósito através de moldagem por transferência de resina* 2007. 232p. Tese (Doutorado em Engenharia Metalúrgica e de Materiais), Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro.

AYLWARD, L., C. DOUGLAS, ROYLANCE, D. *A transient finite element model for pultrusion processing.* Polymer Process Engineering, v. 3, n. 3, p. 247-261, 1985.

BAI Y., VALLÉE T., KELLER T. *Modeling of thermal responses for FRP composites under elevated and high temperatures***.** Composite Science and Technology, v. 68, n. 2, p. 47-56, 2008.

BANK, L.C.; GENTRY, T.R. *Development of a pultruded composite material highway guardrail.* Composites Part A, v. 32, p. 1329-1338, 2001.

BASUKI, R.S., LIN, Y., MAI, Y.W. *Simulation of temperature and curing profiles in pultruded composite rods*. Composite Science and Technology, v. 58, n. 2, p. 191-197, 1998.

BATCH, G.L.; MACOSKO, C.W. *Kinetic model for crosslinking free radical polymerization including diffusion limitations*. Journal Applied Polymer and Science 1992; v. 44, p. 1992.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N.; *Transport Phenomena*, New York, EUA: John Wiley & Sons, 2002.

BUTT J.B. *Reaction kinetics and reactor design***.** 1999, NY, EUA: Marcel Dekker.

CALADO, V. M. A.; ADVANI, S. G. Thermoset *Cure Kinetics And Rheology*. In: Raju S. Dave; Alfred C. Loos. (Org.). Processing of Continuous Fiber Reinforced Composites. 1 ed. EUA: Hanser Publishers, 2000, p. 32-107.

CARLONE, P., PALAZZO, G.S., PAQUITO, R. *Cure optimization by hybrid computational methods***.** Computers & Mathematics with Applications, v. 53, n. 9, p.1464-1471, 2007.

CARLONE, P., PALAZZO, G.S., PAQUITO, R. *Pultrusion manufacturing process development by computational modeling and methods*. Mathematical and Computer Modeling, v. 44, n. 7, p.701-709, 2006.

CARVALHO A. *Cura e Pós Cura de Resinas Poliéster e Viniléster*, 2002.

COELHO, R.M.L., CALADO, V.M.A. *An optimization procedure for the pultrusion process based on a finite element formulation*. Polymer Composites, v. 23, n. 3, p. 329-341, 2002.

CONTANT S., LONA, L.M.F., CALADO, V.M.A. *Predição do comportamento térmico de tubos compósitos através de redes neurais*. Polímeros: Ciência e Tecnologia, v. 14, n. 5, p. 295-300, 2004.

DISPENZA C., PISANO A.A., FUSCHI, P. *Numerical simulations of mechanical characteristics of glass fiber reinforced C-profiles*. Composite Science and Technology, v. 68, n. 2, p. 47-56, 2006.

HAN, C.H., LEE, D.S., CHIN, H.B. *Development of a mathematical model for the pultrusion process*. Polymer Engineering and Science, v. 26, n. 6, p. 393-403, 1986.

HIMELBLAU, D.M.; EDGAR, T.F. *Optimization of Chemical Processes*. 2 ed., NY, USA: The McGraw-Hill Companies, 2001, 650 p.

JOSHI S. C.; LAM Y.C., *Three dimensional finite-element/ nodal control-volume simulation of the pultrusion process with temperature-dependent material properties including resin shrinkage*. Composite Science and Technology, v. 61, n.11, p. 457-467, 2001.

JOSHI, S.C., LAM, Y.C., TUN, U. *Improved cure optimization in pultrusion with pre-heating and die-cooler temperature*. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, v. 34, n. 12, p1151-1159, 2003.

KENNEDY, J., EBERHART, R. Particle Swarm Optimization. *In*: PROC. IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEURAL NETWORKS, 1995 Perth, Australia, pp. 1942-1948.

KERBIRIOU, V.; FRIEDRICH, K. *Pultrusion of thermoplastic composites process optimization and mathematical modeling.* v. 96, n. 12, p. 96 -120, 1999.

KERSTING, D.F. Avaliação de Resinas epóxi para fabricação de materiais compósitos pelo processo de pultrusão. . 2004. 102 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

KIM, D.F.; LEE, W.I.; FRIEDRICH, K. *A model for a thermoplastic pultrusion process using commingled yarns*. Composite Science and Technology, v. 61, n. 8, p. 1065-1077, 2001.

LANGAN, L. J. *The modeling and control of the pultrusion composite manufacturing process*. Dissertação de Mestrado, 1986, MIT, EUA.

LI, J., JOSHI. C.S., LAM, Y.C. *Curing optimization for pultruded composite sections***.** Composite Science and Technology, v. 62, n.3, p. 457-467, 2001.

LIANG, G., GARG, A., CHANDRASHEKHARA K., FLANIGAN V. AND KAPILA S. *Cure characterization of pultruded soy-based composites*. Journal of Reinforced Plastics and Composites, v. 24, n.14, p. 1509-1520, 2005.

LIU, X.L. *A finite element/nodal volume technique for flow simulation of injection pultrusion.* Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, v. 34, n.7, p.649-661, 2003.

LIU, X.L. *Numerical modeling of composite I beam*. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, v. 32, n. 5, p. 663-681, 2001.

LIU, X.L., HILLIER, W. *Heat transfer and cure analysis for the pultrusion of a fiberglass-vinyl ester I beam*. Composite Structures, v. 47, n. 4, p. 581-588, 1999.

MA, C.C.M., LEE K.Y., LEE, Y.D., HWANG, J.S. *The correlations of processing variables for optimizing the pultrusion process*. SAMPLE J, v. 22, n. 5, p. 42, 1986.

MACCRUM, N.G., BURKLEY, C.P., BUCKNALL, C.B. *Principles of polymer Engineering*. Oxford, Nova York, EUA: Oxford University Press Inc., 1999.

MALISKA, C.R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.* 2. ed. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2004. 453 p.

MEHRDAD, N.G.N. *Thermal analysis for thermoplastic composite tow/tape preheating and pultrusion*. Journal of Thermoplastic Composite Materials., v. 10, p. 504-523, 1997.

MEYER, R. *Handbook of pultrusion technology*. Londres, ING: Chapman & Hall, 1985, 105 p.

MOSHIAR, S.M., REBOREDO, M.M., LARRONDO H., VAZQUEZ, *A. Pultrusion of epoxy matrix composites: puling force model and thermal stress analysis*. Polymer Composites; v.17, n. 6, p.850-858, 1996.

NASCIMENTO, C.E.M. *Modelagem em elementos finitos de dutos de aços reforçados por compósitos de matriz polimérica.* 2008. 136 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Materiais), Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S.J. *Numerical Optimization*. 2. ed. NY, USA: Springer, 2000, 680 p.

PACHINOS, R.B. *Faturamento encolhe, mas o setor investe em novas tecnologias para ganhar mercado*. Plástico Reforçado. n 350, Dez. 2003 Disponível em http://www.plastico.com.br.

PAGANO, R.L., SANTOS, L.S., CALADO, V.M.A., BISCAIA, E.C. *Pultrusion process: modeling of heat transfer and cure kinetic.* In: WORLD POLYMER CONGRESS 2006 Rio de Janeiro, Brazil, v. 245-246, p.1-680.

PALMESE G. R. *Cure of thermosetting resins in RTM*. In: Joint Composites Workshop 1995.

PANTALEÂO A. V., DE ANDRADE C. R., ZAPAROLI E. L.. *The effect of anisotropic conductivity on the pultrusion process simulation*. International. Communications in Heat and Mass Transfer 2002, v. 29, n 5, p. 611-621.

PARENTE, R.A. Elementos Estruturais de Plástico Reforçado. 2006. 153 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Estruturas), Universidade Federal de São Carlos, São Paulo.

PINTO, J. C.; LAGE, P. L. C. Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química. 1. ed. Rio de Janeiro: E-papers Servicos Editoriais Ltda., 2001. v. 1., 316 p.

PRICE, H.L. *Curing and flow of thermosetting resins for composite material pultrusion.* 1979. Tese PhD, Old Domination University, EUA.

RAPER, K.S., ROUX, J.A., MCCARTY T.A., VAUGHAN J.G. *Investigation of the pressure behavior in a pultrusion die for graphite/epoxy composites*. Composites Part A, v. 30, n.9, p.1123-1132, 1999.

ROUX J.A., VAUGHAN, J.G., SHANKU, R. *Comparison of measurements and modeling for pultrusion of a fiberglass/epoxy I-beam.* Journal of Reinforced Plastics and Composites, v. 17, n 17, p. 1557-1578, 1998.

SANTIAGO, D., LOMBERA G., URQUIZA, S., MOSCHIAR, S.M. *Modelado numérico del processo de pultrusion en materiales compuestos*. Materials Research, v. 6, n. 4, p. 583-589, 2003.

SANTOS, L.S., PAGANO, R.L., CALADO, V.M.A., BISCAIA, E.C. *Cure of a fiberglass-vinyl ester I beam composite: a new heating strategy*. In: 10TH INTERNATIONAL CHEMICAL AND BIOLOGICAL ENGINEERING CONFERENCE, 2008A, BRAGA. Proceedings of the 10th International Chemical and Biological Engineering Conference. Braga/Portugal : Universidade do Minho, v. 1. p. 49-58.

SANTOS, L.S., PAGANO, R.L., CALADO, V.M.A., BISCAIA, E.C.*Simulação do processo de pultrusão utilizando aquecedores internos* . In: XVII COBEQ, 2008, RECIFE/PE. Anais do XVII COBEQ. Recife : ABEQ, 2008b. v. 1. p. 705-712.

SHI, Y., EBERHART, R. A Modified Particle Swarm Optimizer. *In:* PROC. CONFERENCE ON EVOLUTIONARY COMPUTATION, 1998, Anchorage, Alaska, pp. 69-73.

SCHWAAB, M *Avaliação de algoritmos heurísticos de otimização em problemas de estimação de parâmetros*. 2005. 149 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro

SCHWAAB, M., BISCAIA, E.C., MONTEIRO, J.L, PINTO, J.C. *Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization.* Chemical Engineering Science, v.63, n.6, Mar, p. 1542-1552, 2008.

SRINIVASAGUPTA, D., KARDOS, J. L., JOSEPH B. *Rigorous dynamic model-based economic design of the injected pultrusion process with controllability considerations*. Journal of Composite Materials, v. 37, n. 20, p. 1851-1880, 2003.

SRINIVASAGUPTA, D; KARDOS, J.L. *Ecologically and economically conscious design of the injected pultrusion process via multi-objective optimization*. Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering, v. 12, S205-S219, 2004.

STROLLER, R.G. *Modelagem e simulação térmica do processo de pultrusão*. 2005. 94 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Aeronáutica e Mecânica) – Instituto Tecnológico da Aeronáutica, São José dos Campos, SP.

SURATNO, B.R., LIN, Y., MAI, Y.W. *Simulation of temperature and curing profiles in pultruded composites rods.* Composite Science and Technology, v. 58, n.8, p. 191-197, 1998.

TRIVISANO, A., MAFFEZZOLI, J.M., KENNY, J.M., NICOLAIS, L. *Mathematical modeling of the pultrusion of epoxy based composites*. Advances in Polymer Technology, v. 10, p. 251, 1990.

TULIG, T.J. *A heat transfer and reaction model for pultrusion*. In: AICHE Meeting 1985; Chicago – EUA.

VERSTEEG, K.K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction Computational Fluid Dynamics the Finite Volume Method*. 2. ed. NY, USA: John Wiley & Sons, 1995.

VIEIRA J. D**.** *Estudo do comportamento estrutural de perfis pultrudados sob efeito de alta temperatura*. 2008. 170 p. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro.

VOORAKARANAM, S., KARDOS, J.L., JOSEPH, B. *Model-Based control of injection pultrusion process*. In: PROCEEDINGS OF THE AMERICAN CONTROL CONFERENCE, 1998 Washington, EUA.

WILCOX, J.A.D.; WRIGHT, D.T. *Towards pultrusion process optimization using artificial neural networks.* Journal of Materials Processing Technology, v. 83, n.1, p. 131-141, 1998.

YANG, Y.S.; LEE, L.J. *Rheokinetic studies of unsaturated polyester resins.* Polymer Process Engineering, vol. 5, p. 327, 1988.

ANEXOS

CÓDIGO COMPUTACIONAL DO ALGORITMO

Neste anexo é descrito o código computacional do algoritmo de comunicação com o CFX e o código da Técnica de Enxame. O programa é escrito na linguagem de programação FORTRAN 90 e se divide nas seguintes sub-rotinas:

(1) psox.f90 programa principal
(2) swarm.f90 algoritmo da técnica de enxame
(3) function.f90 função objetivo – link com CFX
  (3.1) textchange.f90 alterações no arquivo **.def**
  (3.2) readingout.f90 leitura de resultados
  (3.3) systemcalc.f90 comunicação com o CFX
  (3.4) verify.f90 sub-rotina para substituição do .def para **.txt** para modificações no arquivo.

O software que realiza a interface entre o CFX e o algoritmo de otimização foi escrito na linguagem de programação FORTRAN 90. Esse software, primeiramente, carrega um arquivo (extensão **.def**), gerado no CFX-PRE, o qual dispõe de todas as informações que contém as variáveis da simulação (equacionamento, condições de contorno, dimensões etc.). Em seguida, esse arquivo é modificado através da substituição dos valores antigos, ou *defaults*, da variável de decisão do problema, por novos valores estimados pelo algoritmo de otimização.Em seguida, o CFX SOVER é iniciado com o arquivo **.def** modificado para realizar os cálculos. Ao final da simulação, o software lê os valores das variáveis calculadas (grau de cura e temperatura), os quais se encontram em um arquivo de saída com extensão .**out**, e as transfere para o algoritmo de otimização realizar os cálculos da função objetivo e restrições. Essa seqüência de cálculo se repete por um determinado número de iterações, configurado no algoritmo de otimização.

Para que o código funcione é preciso que todos os arquivos **.f90** e o arquivo **.def** estejam localizados na pasta %systemroot%\Arquivos de programas\ANSYS Inc\v110\CFX\bin\. Um primeiro arquivo **.def** precisa ser gerado a partir do CFX PRE para que o código possa ser iniciado a partir desse arquivo e uma pasta chamada saída deve ser criada dentro do diretório %systemroot%\Arquivos de programas\ANSYS Inc\v110\CFX\bin\ para armazenar os arquivos de saída de cada simulação. A Figura A.1 ilustra essa primeira etapa:

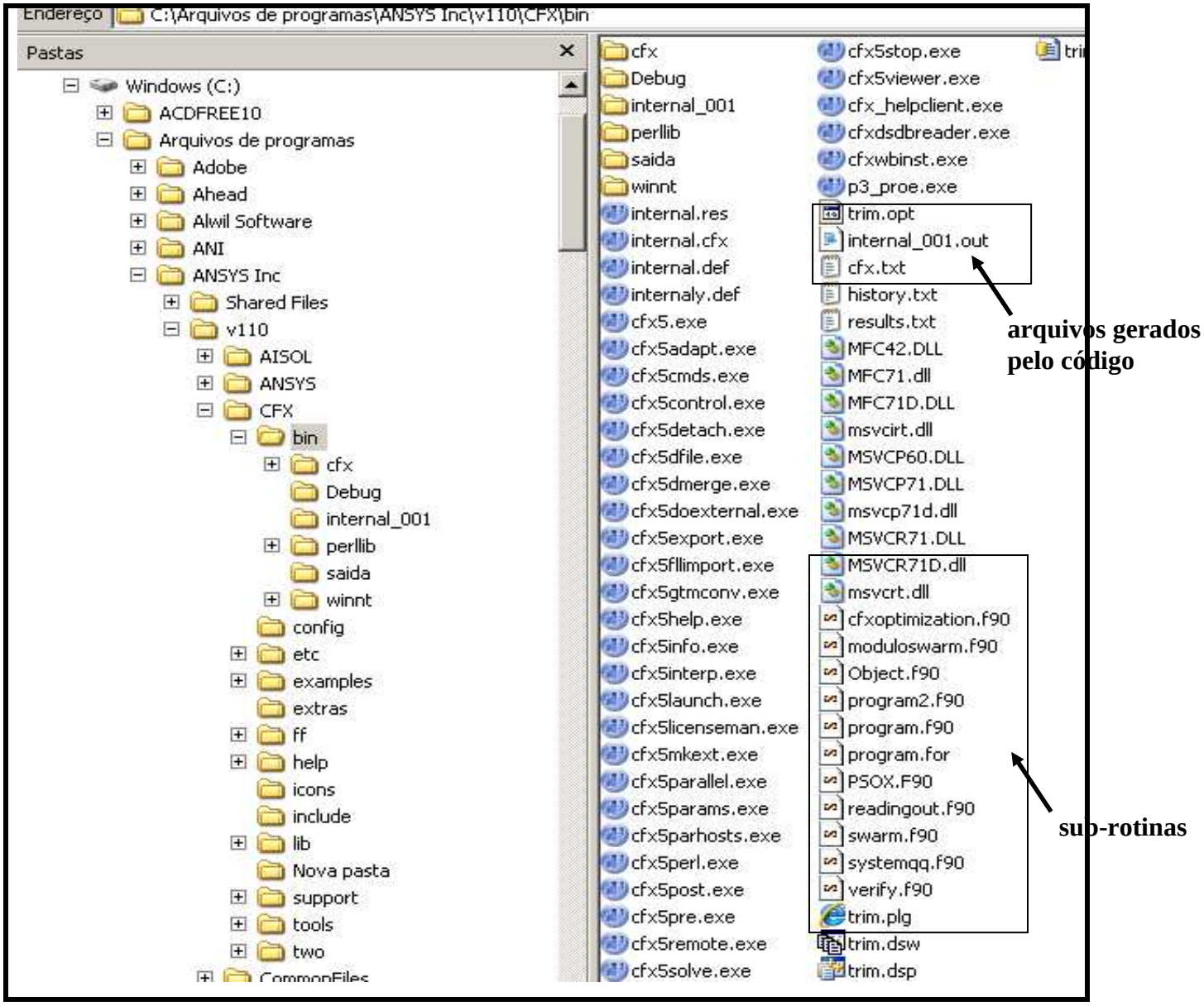


Figura A.1. Diretório de localização do código.

Dentro do CFX PRE deve-se criar as variáveis que terão seus valores alterados a cada simulação, (variáveis de decisão) e nomeá-las com o mesmo nome especificado no programa principal psox.f90. Deve-se adaptar o algoritmo para cada tipo de problema, principalmente na sub-rotina readingout.f90 que lê os dados de saída do CFX. Durante a simulação, os arquivos [**.txt**], chamados historico.txt e results.txt são gerados e armazenam os dados de cada iteração. A parte principal do código computacional pode ser conferido a seguir:

```
program PSOX

        !Lizandro de Sousa Santos - Escola de Quimica - UFRJ
        !#####################################################

        !Esse programa chama uma rotina que estima variáveis de entrada do CFX. Essas variáveis são
        !especificadas pelo usuário e dependem do problema. Por exemplo, posso estimar a temperatura e pressão de entrada
        !do escoamento de uma tubulação. O número de variáveis também depende do usuário e do problema. Se o problema,
        !tiver, por exemplo, dez condições de contorno com valores de fracoes massicas de soluto, posso especificar essas
        !dez variáveis.

        !Estimados os valores de entrada, o algoritmo invoca o CFX Solver. O que o programa faz, especificamente, é modificar
        !valores no arquivo .def. Daí, o CFX solver roda normalmente... Ao término da simulação, é gerado automaticamente
        !um arquivo .out. Esse arquivo contém os valores das variáveis de saída do problema. Se essas variáveis forem
        !relevantes para a análise do problema, uso-as como parametro de convergência ou para o cáculo
de uma dada função
        !objetivo.

        !Calculada a função objetivo, retornamos para a etapa [1] e assim sucessivamente até encontra-se a função de mínimo
        !valor.

        use object   ! estrutura string_type

        integer i,j,dim,num_var
   type (string_type), pointer:: str(:) ! str do tipo string_type

        num_var = 1  ! numero de variáveis (i.e. potencia -> 1 variável; potencia e velocidade -> duas variáveis)

        allocate(str(num_var))      ! alocação de memória
        allocate(num_val(num_var))

        do i=1,num_var                          ! recebo  a quantidade de variaveis de cada srt
         num_val(i)=5     ! numero de variaveis de i
         str(i)%quant = num_val(i)            ! quant de str (quantidade de valores da variavel str) recebe numero de valores...
         allocate(str(i)%var(str(i)%quant))              !entao o numero de variaveis é um vetor de tamanho quant
```

```
            allocate(str(i)%simbol(str(i)%quant))          !o mesmo valendo para os simbolos
            soma = soma + str(i)%quant
           end do

           dim = soma

   allocate(SI(dim))

           jj_count=0                              ! orientado a objeto...gravo as variaveis em str!



           do kk=1,num_var                         ! estruturação da variável de decisão ou de projeto
                    do jj=1,str(kk)%quant          ! quantidade de valores pertencentes a dterminada variável

                     SI(jj+jj_count) = 'Q'//char(48+jj+jj_count)  ! character especificando o simbolo da variavel
                    str(kk)%unit = 'W m^-2'   ! character especificando a unidade da variavel
                    str(kk)%simbol(jj) = SI(jj+jj_count)
                    end do
                    jj_count = jj+jj_count-1
           end do


           ! interface de impressão
   write(*,*)''
           write(*,*)'#################################################################'
   write(*,*)''
           write(*,*)'                              OTIMIZADOR SWARM-CFX'
   write(*,*)''
           write(*,*)'#################################################################'
           write(*,*)''
           write(*,*)'Informacoes...'
           write(*,*)''
           write(*,*)'Variavel de Projeto: Potencia do aquecedor'
           write(*,*)'Algoritmo de otimizacao: Particle Swarm Optmization (PSO) '
           write(*,*)'Pacote Simulador: Ansys CFX 11.0'
           write(*,*)''
           write(*,*)'Iniciando os calculos...'


           call swarm(dim,str,num_var)                              ! chamada do algoritmo de otimização

end program

*****************************************************************************************************************

module object

  type string_type ! tipo...
            character*2, pointer:: simbol(:)
            integer quant ! quantidade de valores
            real*8, pointer:: var(:)      ! valores...
            character*10 unit
  end type

  integer::kk, jj_count, jj, soma
  integer, pointer:: num_val(:)

  character*2, pointer:: SI(:)
end module
```

```
*****************************************************************************************************
module moduloswarm


   integer, parameter:: m= 20          !numero de iterações.
   integer, parameter:: n= 10          !numero de particulas

   !parametros do swarm:

            real*8, parameter:: wf= 0.75d0  !pesos do enxame

            real*8, parameter:: w0= 1.0d0
            real*8, parameter:: c1 = 1.5d0
            real*8, parameter:: c2 = 1.5d0

end

*****************************************************************************************************
function f(dim,str,num_var)

 ! Cálculo da função objetivo...

 ! var -> variaveis de projeto
 ! dm -> numero de variaveis de projeto
 ! dim -> tipos de vatiaveis de projeto
 use object

 integer dm,i,dim,num_var,h
 real*8 variaveis(dim), lucro, custo, penal, gc, gcot, param, rest, f
 common h
 type (string_type):: str(num_var) ! str do tipo string_type

 write(*,*) 'Valor estimado de Q pelo algoritmo de otimizacao'            ! interface de comunicação
 write(*,*) ''
 write(*,*) str(1)%var(1), str(1)%unit
 write(*,*) str(1)%var(2), str(1)%unit
 write(*,*) str(1)%var(3), str(1)%unit
 write(*,*) str(1)%var(4), str(1)%unit
 write(*,*) str(1)%var(5), str(1)%unit

 write(7,*) 'Valor estimado de Q pelo algoritmo de otimizacao'
 write(7,*) ''
 write(7,*) str(1)%var(1), str(1)%unit
 write(7,*) str(1)%var(2), str(1)%unit
 write(7,*) str(1)%var(3), str(1)%unit
 write(7,*) str(1)%var(4), str(1)%unit
 write(7,*) str(1)%var(5), str(1)%unit

 write(*,*)''
 write(*,*)'Fazendo comunicacao com o CFX...'
 write(*,*)''

 write(7,*)''
 write(7,*)'Fazendo comunicacao com o CFX...'
 write(7,*)''
```

```
call verify          !subrotina que verifica se há algum .txt
write(*,*)'Setando valores de entrada do arquivo [.def] com valor sorteado de Q '
write(7,*)'Setando valores de entrada do arquivo [.def] com valor sorteado de Q '

call textchange(dim,str,num_var) !subrotina que modifica o aqrquivo com os valores de entrada

write(*,*)'Arquivo [.def] modificado'
write(*,*)'Chamando o CFX Solver...'
write(*,*)'Realizando calculos..., por favor espere ate a convergencia'

write(7,*)'Arquivo [.def] modificado'
write(7,*)'Chamando o CFX Solver...'

write(7,*)'Realizando calculos..., por favor espere ate a convergencia'

call systemcalc   ! etapa de calculo
write(*,*)'Cálculos realizados com sucesso'
write(*,*)'Recuperando dados do arquivo de saida...'

write(7,*)'Cálculos realizados com sucesso'
write(7,*)'Recuperando dados do arquivo de saida...'


call readingout(x) ! subrotina que le dados de arquivo de saida.
write(*,*)''
 write(7,*)''

!Cálculo da função objetivo:


Area_Aquecedor = 0.005d0 !        [m2]  ! Area de cada aquecedor
Preco_Energia = 1.0d0 ! [R$/J]  ! preco por joule
Velocidade = 0.005d0 ! [m/s]   ! velocidade de tração
Densidade = 1100.0d0 ! [kg/m^3]
Area_Secao_Transversal = 2.0d0*3.1416d0*(0.0063d0)**2.0d0 ! m^2
Preco_Kilograma = 1.0d0 ! R$/kg
Fluxo_Aquecedores = ( str(1)%var(1)+str(1)%var(2)+str(1)%var(3)+str(1)%var(4)+str(1)%var(5)) ! W/m^2
custo = Fluxo_Aquecedores*Area_Aquecedor*Preco_Energia ! R$/s
gc = x ! grau de cura obtido
gcot = 0.97d0 ! restricao de grau de cura
param = 20.0d0
penal = (gcot - gc) ! restrição


f = ( - custo ) - max(penal,0.0d0)**2.0d0*param


write(*,*) 'Valor do Grau de Cura'
write(*,*) x
write(*,*) 'Fluxo total'
write(*,*) Area_Aquecedor*4.0d0*Fluxo_Aquecedores
write(*,*) ''
write(*,*) 'Valor de Fobj'
write(*,*) -f

write(7,*) 'Valor do Grau de Cura'
write(7,*) x
write(7,*) 'Fluxo total'
write(7,*) Area_Aquecedor*4.0d0*Fluxo_Aquecedores
write(7,*) ''
```

```
 write(7,*) 'Valor de Fobj'
 write(7,*) -f

end function

*****************************************************************************************************************************



subroutine  swarm(dim,str,num_var)
 ! Particle Swarm Optimization
 ! Instrução ao usuário:
 !**********************
 ! dim -> número de dimensões.
 ! n -> número de partículas.
 ! tch(dim,n) -> temperatura de cada partícula. Cada partícula possui "dim" temperaturas.
 ! tchbest(dim,n) -> melhores valores de tch de cada partícula.
 ! vtch -> velocidade de cada partícula.
 ! tex -> valores da variavel de projeto que entram na função.
 ! num_var -> numero de variaveis
 use moduloswarm ! módulo com os parametros do swarm.
 use object
 implicit none ! forço a declaração de variáveis.
 integer h,k,i,j,num_var,dim
 type (string_type):: str(num_var) ! str do tipo string_type
 real*8 f,nn,fa,la,laa,u,n_aleat,tchmin,tchmax,w,fg
 real*8 aleat2(2*n),aleat(n),fbest(n)
 real*8, allocatable:: vtch(:,:),tch(:,:),tchbest(:,:),tchg(:),tchn(:,:),tex(:),tmin(:), tmax(:)
 common h
 allocate ( vtch(dim,n),tch(dim,n),tchbest(dim,n),tchg(dim),tchn(dim,n),tex(dim),tmin(dim), tmax(dim) )
call random_seed() !chamar um número ramdomico entre 0 e 1.
 open(unit=147,file='results.txt')
 tmin=0.  !faixa de valores estimados: uso a mesma para todas as variaveis
 tmax=2.5d4
 vtch=0.0d0 ! <-- condicoes iniciais de velocidade
 tchn=0.0d0 ! <-- condicoes iniciais de temperatura
 tch = tchn ! <-- igualdade ...

!*****************************************************************************
open(unit=7,file='history.txt') ! abrindo o arquivo...
write(*,*) ''
write(*,*) '==============================================================='
```

```
write(*,*) ''
write(*,*) 'Parametros do Swarm'
write(*,*) ''
write(*,*) 'Numero total de particulas:',n
write(*,*) 'Limite inferior de chute:',tmin(1)
write(*,*) 'Limite superior de chute:',tmax(1)
write(*,*) 'Numero de dimensoes:',dim
write(*,*) ''
write(*,*) '================================================================='
write(*,*) ''
write(*,*) 'Calculos iniciais para cada particula'
write(*,*) ''
!*********************************************************************************
!*********************************************************************************
write(7,*) ''
write(7,*) '================================================================='
write(7,*) ''
write(7,*) 'Parametros do Swarm'
write(7,*) ''
write(7,*) 'Numero total de particulas:',n
write(7,*) 'Limite inferior de chute:',tmin(1)
write(7,*) 'Limite superior de chute:',tmax(1)
write(7,*) 'Numero de dimensoes:',dim
write(7,*) ''
write(7,*) '================================================================='
write(7,*) ''
write(7,*) 'Calculos iniciais para cada particula'
write(7,*) ''
!*********************************************************************************
 do i=1,n                !(condições iniciais) [n é o número de partículas... ]
do j=1,dim !dim é o numero de dimensoes.
call random_number(n_aleat)  !lâmbida recebe um valor aleatório...
tch(j,i) = tmin(j) + n_aleat*(tmax(j)-tmin(j))  !valor de tch individual recebido
tchbest(j,i)=tch(j,i) !melhores valores de tch individual
tex(j) = tch(j,i)        ! temperaturas para a partícula i.
end do
jj_count=0                              ! orientado a objeto...gravo as variaveis em str!
do kk=1,num_var
do jj=1,str(kk)%quant
str(kk)%var(jj) = tex(jj+jj_count)
```

```
end do
jj_count = jj+jj_count-1
end do
fbest(i)=f(dim,str,num_var)            !melhor valor da função para a particula i. (como condição inicial)
write(*,*) ''
write(*,*) '==================================================================='
write(*,*) ' '
end do  ! fecho o laço.
 !valores iniciais para o cálculo.
 do i=1,dim  ! dim é o numero de dimensoes.
 tchg(i) = tchbest(i,1)
 end do
 fg=fbest(1)              !gravo o valor de f global
write(*,*) ''
write(*,*) 'Segunda etapa do Swarm'
write(*,*) ''
write(*,*) '--------------------------------'
write(*,*) 'Valor da função em cada iteração'
write(*,*) '--------------------------------'
write(*,*) ' '
write(*,*) 'Teremos',m,'iteracoes...'
do h=1,m  !m é o número de iterações...
w = w0 + (wf- w0)*( (dble(h)-1.0d0)/(dble(m)-1.0d0) )           ! peso variável
write(*,*) ''
write(*,*) 'iteracao',h
!laço para armazenamento dos aleatorios...n deles [para cada particula tenho um grupo]
do k =1,n*2 ! número de partículas...
call random_number(n_aleat)   !chutes aleatórios...
aleat2(k) = n_aleat !armazenamento do aleatório
end do
do j=1,n                  !n é o número de partículas...
do i=1,dim !para cada partícula tenho 'dim' [dimensoes] valores...
vtch(i,j) = w*vtch(i,j) + c1*aleat2(j)*(tchbest(i,j)-tch(i,j)) + c2*aleat2(j+n)*( tchg(i) - tch(i,j) ) !velocidades
tchn(i,j) = tch(i,j) + vtch(i,j) !temperaturas para partícula [j]
end do
 tch=tchn
!averiguando se está no intervalo estipulado:
do i=1,dim ! 'dim' variáveis [temperaturas locais]
if ( tch(i,j) < tmin(i)) then
 tch(i,j) = tmin(i)       !a partícula esta fixa [j], ela terá [i] temperaturas.
```

```
vtch(i,j) = 0.0d0                ! o algoritmo zera a velocidade nesse caso.
end if
if ( tch(i,j) > tmax(i)) then ! temperatura
tch(i,j) = tmax(i)
vtch(i,j)=0.0d0
end if
str(1)%var(i) = tch(i,j)
end do
fa = f(dim,str,num_var) !valor de f atual
if ( fa > fbest(j) ) then  ! se for maior que o melhor f...
do i=1,dim
tchbest(i,j)=tch(i,j)   !O valor global de x será o valor de x atual (melhor valor)
end do
fbest(j)=fa     !O melhor valor da função (partícula) será justamente esse.
end if
if ( fa > fg) then    ! se for maior que o global
do i=1,dim
tchg(i)=tch(i,j)  ! a variavel global assume esse valor...
end do
fg=fa
end if
end do                        !acaba a iteração de [n]
write(*,*) 'Informações da Iteracao:'
write(*,*) 'iteração:',h
write(*,*) 'valor otimo da funcao:',fg
write(*,*) 'Valores dos aquecedores'
write(*,*) 'Q1',tchg(1)
write(*,*) 'Q2',tchg(2)
write(*,*) 'Q3',tchg(3)
write(*,*) 'Q4',tchg(4)
write(*,*) 'Q5',tchg(5)
write(147,*) fg, tchg(1), tchg(2), tchg(3), tchg(4), tchg(5)
write(*,*) ''
write(*,*) ''
write(*,*) ''
write(*,*)'*************************************************'
write(7,*) 'Informações da Iteracao:'
write(7,*) 'iteração:',h
write(7,*) 'valor otimo da funcao:',fg
write(7,*) 'Valores dos aquecedores'
```

```
  write(7,*) 'Q1',tchg(1)
  write(7,*) 'Q2',tchg(2)
  write(7,*) 'Q3',tchg(3)
  write(7,*) 'Q4',tchg(4)
  write(7,*) 'Q5',tchg(5)
  write(7,*) ''
  write(7,*) ''
  write(7,*) ''
  write(7,*)'************************************************'
  end do                !acaba a iteração de [m]
  write(*,*)'##############################################'
  write(*,*)'Valores otimos'
  write(7,*)'##############################################'
  write(7,*)'Valores otimos'

end subroutine
```

Figura A.2 Janela de visualização dos cálculos de otimização.