

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DOUTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS

**Modelagem Matemática em Coordenadas
Generalizadas e Desenvolvimento de Simulador
Computacional para Aplicação em Processos de
Moldagem por Transferência de Resina**

Autor: **Brauner Gonçalves Coutinho**

Orientador: **Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima**

Campina Grande, agosto de 2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DOCTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS

**Modelagem Matemática em Coordenadas
Generalizadas e Desenvolvimento de Simulador
Computacional para Aplicação em Processos de
Moldagem por Transferência de Resina**

Autor: **Brauner Gonçalves Coutinho**

Orientador: **Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima**

Curso: **Doutorado em Engenharia de Processos**

Área de Concentração: **Térmica e Fluidos**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação Engenharia de Processos, como requisito para a obtenção do título de Doutor em Engenharia de Processos.

Campina Grande, agosto de 2013

PB - Brasil

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

C871m Coutinho, Brauner Gonçalves.

Modelagem matemática em coordenadas generalizadas e desenvolvimento de simulador computacional para aplicação em processos de moldagem por transferência de resina / Brauner Gonçalves Coutinho. – Campina Grande, 2013.

199f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

“Orientação: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima”.

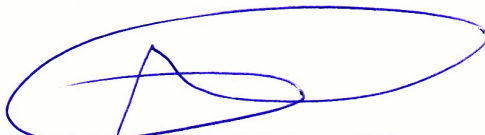
Referências.

1. RTM. 2. Simulação. 3. Método dos Volumes-Finitos. 4. Coordenadas Generalizadas. I. Lima, Antonio Gilson Barbosa de. II. Título.

CDU 658.5:51-7(043)

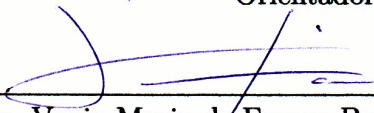
MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE BRAUNER GONÇALVES COUTINHO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS DO CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE

Tese aprovada em 29 agosto de 2013.



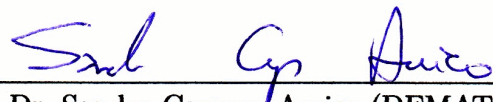
Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (UAEM / CCT / UFCG)

Orientador



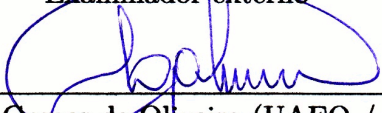
Profa. Dra. Vanja Maria de França Bezerra (DEQ / CT / UFRN)

Examinadora externa



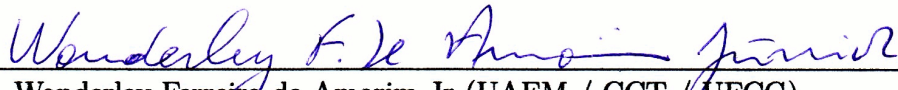
Prof. Dr. Sandro Campos Amico (DEMAT / UFRGS)

Examinador externo



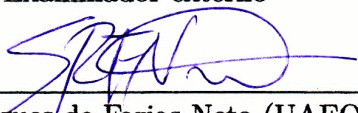
Prof. Dr. Laércio Gomes de Oliveira (UAEQ / CCT / UFCG)

Examinador externo



Prof. Dr. Wanderley Ferreira de Amorim Jr (UAEM / CCT / UFCG)

Examinador externo



Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto (UAEQ / CCT / UFCG)

Examinador interno

Campina Grande - PB, Brasil

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, Antonio Coutinho e Maria do Carmo
e à minha esposa, Ana Emília.

AGRADECIMENTOS

A Deus, que me deu saúde, coragem e inspiração para a realização deste trabalho.

Aos meus pais e esposa, pelo apoio incondicional.

Ao professor Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima, pela confiança e orientação que possibilitaram o desenvolvimento deste trabalho e por estar disposto a ajudar em todos momentos.

Ao Professor Dr. Francisco Marcondes, pela orientação de mestrado que serviu como base para esta pesquisa.

À Professora Dra. Vanja Maria de França Bezerra, pelas contribuições no início da caminhada.

À UEPB, Universidade Estadual da Paraíba, que forneceu apoio financeiro e permitiu meu afastamento das atividades docentes para capacitação profissional.

À UFCG, que cedeu as instalações para realização da pesquisa e aos sinceros amigos que lá conheci no decorrer do meu período de permanência.

Ao CNPq, FINEP e à CAPES (PROCAD NF/2009) pelo apoio financeiro.

CITAÇÃO

“O maior inimigo do conhecimento não é a ignorância,
é a ilusão do conhecimento.”

Stephen Hawking

RESUMO

COUTINHO, Brauner Gonçalves, *Modelagem Matemática em Coordenadas Generalizadas e Desenvolvimento de Simulador Computacional para Aplicação em Processos de Moldagem por Transferência de Resina*, Coordenação de Doutorado em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, PB, 2013. 199f. Tese (Doutorado).

O processo RTM é amplamente utilizado para a produção de materiais compósitos de alta qualidade. As simulações computacionais podem desempenhar um importante papel na otimização deste processo, reduzindo custos e tornando-o mais eficiente. Neste trabalho, foi desenvolvida uma modelagem matemática bidimensional transiente para a etapa de preenchimento do molde em processos RTM que prediz o escoamento de duas fases (ar-resina) em meios porosos. O conjunto de equações diferenciais parciais, escritas em coordenadas generalizadas, é discretizado utilizando o método de volumes finitos e resolvido por meio de uma abordagem totalmente implícita via método de Newton com um esquema de passo de tempo variável. Foi desenvolvido um simulador computacional com ferramentas de pré e pós-processamento para ajudar na definição de parâmetros de simulações e na visualização dos resultados obtidos. Para validar a metodologia matemática proposta, resultados numéricos de tempo de preenchimento, posição da frente de fluxo, pressão e vazão de injeção para escoamentos radiais e retilíneos foram comparados com resultados analíticos conhecidos. Como aplicação, o modelo foi usado para descrever o escoamento de óleo vegetal em uma pré-forma de fibra de vidro no interior de uma cavidade retangular e os resultados comparados com dados oriundos de estudos experimentais. Também foram simulados casos envolvendo fronteiras irregulares arbitrárias. O modelo proposto e o simulador mostraram-se consistentes produzindo resultados fisicamente coerentes para as variáveis do processo.

Palavras-chave: RTM, simulação, método dos volumes-finitos, coordenadas generalizadas.

ABSTRACT

COUTINHO, Brauner Gonçalves, *Mathematical Modelling Using Boundary Fitted Coordinates and Development of a Computational Simulator for Applications in Resin Transfer Molding Processes*, Process Engineering Doctorate, Federal University of Campina Grande, PB, 2013. 199f. Thesis (Doctorate).

The RTM process is widely used for the production of high quality composite materials. Computer simulations can play an important role in the optimization of this process, reducing costs and increasing efficiency. In this work, it was developed a 2D transient mathematical model for the mold filling stage in RTM process which predicts the two-phase flow (air-resin) through porous media. The set of partial differential equations, written in boundary fitted coordinates, is discretized using the finite volume method in a fully implicit approach and solved by using the Newton's method. It was developed a computational simulator with pre- and post-processing tools to help the definition of simulations parameters and the visualization of the results. To validate the mathematical methodology, numerical results for filling time, flow front position, injection pressure and injection flow rate for rectilinear and radial flows were compared to analytical results from known models. The model was employed to describe the fluid flow of a vegetable oil in a glass fiber preform within a rectangular cavity and the results were compared to experimental data. Some cases involving arbitrary irregular boundaries were also simulated. The proposed model and the simulator generated physically consistent results of the process variables.

Keywords: RTM, simulation, finite volume method, boundary fitted coordinates.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xv
Nomenclatura	xvi
1 Introdução	1
1.1 Objetivo Geral	3
1.2 Objetivos Específicos	3
1.3 Organização do Trabalho	4
2 Revisão Bibliográfica	6
2.1 Materiais compósitos	6
2.1.1 Características gerais	6
2.1.2 Processamento de compósitos poliméricos e a moldagem por transferência de resina (RTM)	9
2.2 Escoamento em meios porosos	12
2.2.1 Meios porosos e o processo RTM	13
2.2.2 Parâmetros do processo e propriedades dos materiais	14
2.2.2.1 Conceitos gerais	14
2.2.2.2 Propriedades do meio	16
2.2.2.3 Propriedades das fases	21

2.2.2.4	Parâmetros do processo	23
2.2.3	Lei de Darcy	27
2.3	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (CFD)	32
2.3.1	CFD e a otimização de processos RTM	33
2.3.2	Métodos numéricos	34
2.3.2.1	Discretização das equações	36
2.3.2.2	Discretização da geometria: a malha numérica	37
2.3.3	Ambiente de simulação	42
2.3.4	Conceitos de programação de computadores	44
2.3.4.1	Orientação a objetos	45
2.3.4.2	Linguagens	46
2.4	Breve estado da arte sobre CFD em RTM	49
3	Modelagem	56
3.1	Equação de conservação da massa	56
3.1.1	Escoamento monofásico	56
3.1.2	Escoamento multifásico imiscível	59
3.1.2.1	Formulação em saturações	59
3.1.2.2	Formulação em frações mássicas	60
3.1.3	Modelo utilizado no presente trabalho	61
3.2	Solução Numérica	63
3.2.1	Coordenadas cartesianas	64
3.2.2	Coordenadas generalizadas	66
3.2.2.1	As métricas e o Jacobiano da transformação	67
3.2.2.2	Transformação das equações	70
3.2.2.3	Integração das equações transformadas	71
3.2.3	Metodologia Totalmente Implícita e Método de Newton	73
3.3	Detalhes da Solução Numérica	76
3.3.1	Geração do sistema de coordenadas	76
3.3.2	O esquema UDS (<i>Upwind Difference Scheme</i>)	81
3.3.3	Derivação das funções residuais	82
3.3.3.1	Derivação dos termos fonte e acumulativo	83

3.3.3.2	Derivação dos termos convectivos	83
3.3.3.3	Derivação dos termos convectivos cruzados	85
3.3.4	Considerações a respeito das derivadas numéricas	86
3.3.5	Estrutura da matriz jacobiana e procedimento iterativo de solução	87
3.3.5.1	Convergência do método de Newton	89
3.3.6	Método de solução do sistema linear	90
3.3.7	Esquema de passo de tempo variável	92
3.3.8	Condições de contorno	94
4	Metodologia	96
4.1	Validação do modelo proposto e metodologia numérica	96
4.1.1	Análítica	97
4.1.1.1	Escoamento radial	97
4.1.1.2	Escoamento retilíneo	99
4.1.2	Ajuste de permeabilidade	101
4.2	Aplicação em casos experimentais	102
4.2.1	Experimentos com fluxo radial em cavidade retangular	102
4.2.1.1	Caso E1	103
4.3	Aplicação em casos com geometrias irregulares	105
4.3.1	Caso G1: injeção pela borda	105
4.3.2	Caso G2: injeção multiponto	106
4.4	Desenvolvimento do simulador	108
4.4.1	Bibliotecas utilizadas	108
4.4.1.1	WxPython	108
4.4.1.2	O Visualization Toolkit - VTK	109
4.4.1.3	MayaVi	112
4.4.1.4	Outras bibliotecas	114
4.4.2	Detalhes do simulador numérico	114
5	Resultados e discussão	117
5.1	Validação do modelo	117
5.1.1	Via solução analítica	117
5.1.1.1	Escoamento radial	117

5.1.1.2	Escoamento retilíneo	124
5.2	Aplicação em casos experimentais	125
5.3	Aplicação em casos com bordas irregulares	133
5.3.1	Caso G1: injeção pela borda	133
5.3.2	Caso G2: injeção multiponto	136
5.4	O sistema computacional desenvolvido	139
5.4.1	Plataforma para utilização do software	139
5.4.2	Fluxo de dados e informações no sistema	140
5.4.3	Interface gráfica (pré e pós-processamento)	142
5.4.3.1	Menu principal	144
5.4.3.2	Abas de propriedades e parâmetros	144
5.4.3.3	Ferramenta de visualização	148
5.4.3.4	Ferramentas para gráficos no plano cartesiano	151
6	Conclusões e sugestões	156
6.1	Conclusões	156
6.2	Sugestões para trabalhos futuros	160
	Referências Bibliográficas	162

LISTA DE FIGURAS

2.1	Aplicação de compósitos no Stealth B-2	8
2.2	Fases de um material compósito	8
2.3	Tipos de sistemas de compósitos	9
2.4	Etapas de um processo RTM típico	11
2.5	Meio poroso com um ou dois fluidos	12
2.6	Escoamentos em escala micro e macroscópica	13
2.7	Definição do volume elementar representativo em um plano	15
2.8	Variação da porosidade com a dimensão do REV	16
2.9	Mudança de quantidades da escala microscópica para a macroscópica	16
2.10	Tipos de experimentos para medição da permeabilidade unidimensional e radial	20
2.11	Permeabilidades relativas da resina e do ar como função linear da saturação	26
2.12	Permeabilidades relativas da resina e do ar como função quadrática da saturação	26
2.13	Interface fluido-fluido devido à capilaridade: tubo capilar e meio poroso	27
2.14	Reprodução da ilustração original do dispositivo usado por Darcy	28
2.15	Dispositivo proposto para generalizar a lei de Darcy para diversas inclinações	29
2.16	Solução numérica de problemas de engenharia	36
2.17	Exemplo de discretização	38
2.18	Exemplos de malha estruturada e não-estruturada	39

2.19	Discretização de geometria complexa com malhas estruturadas cartesianas e coincidente com as fronteiras	40
2.20	Malhas cartesianas em duas aplicações distintas para um problema “five-spot”	40
2.21	Exemplo de um ambiente completo de simulação CFD e visualização	43
2.22	Diferenças na execução de programas em linguagens compiladas e/ou interpretadas	44
2.23	Exemplos de representação de um sistema bifásico em XML	49
3.1	Volume infinitesimal	57
3.2	Volume para integração em coordenadas cartesianas	65
3.3	Planos (a) físico e (b) computacional transformado	67
3.4	Volume para integração em coordenadas generalizadas	71
3.5	Avaliação de uma propriedade geral Φ na interface “e” a partir dos seus valores nos volumes vizinhos P e E pelo esquema UDS	81
3.6	Discretização cartesiana com nove volumes (3x3)	87
4.1	Geometria para escoamento radial	98
4.2	Malha numérica e distribuição de pontos de injeção de resina e saída de ar para os casos de escoamento radial	98
4.3	Geometria para escoamento unidirecional	100
4.4	Malha numérica e distribuição de pontos de injeção de resina e saída de ar para o caso de escoamento retilíneo	101
4.5	Equipamentos utilizados nos experimentos	103
4.6	Estrutura do molde utilizado nos experimentos	104
4.7	Pressão de injeção em função do tempo para o caso E1	104
4.8	Geometria de fronteiras irregulares com entrada de resina e saída de ar em extremidades opostas (caso G1)	105
4.9	Malha computacional referente ao caso G1	106
4.10	Geometria irregular a ser preenchida com no mínimo dois pontos de injeção de resina (caso G2)	107
4.11	Malha com 49 x 31 volumes para o caso G2 e esquemas de distribuição de pontos testados	107

4.12	Pipeline de visualização	110
4.13	Exemplo de um arquivo vtk	111
4.14	Exemplo de arquivo VTK <i>legacy</i> para malha de 3x3 volumes e sua respectiva visualização	113
4.15	Arquitetura de software do MayaVi em termos das linguagens de programação e bibliotecas utilizadas	114
4.16	Diagrama de classes do solver numérico	115
4.17	Fluxograma representando o algoritmo do solver numérico	116
5.1	Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de vazão de injeção constante	118
5.2	Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de vazão de injeção constante	119
5.3	Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de injeção com pressão constante	120
5.4	Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de injeção com pressão constante	120
5.5	Detalhe dos volumes na frente de avanço.	122
5.6	Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de vazão de injeção constante com a permeabilidade corrigida	123
5.7	Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de vazão de injeção constante com a permeabilidade corrigida	124
5.8	Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de injeção com pressão constante e permeabilidade corrigida	125
5.9	Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de injeção com pressão constante e permeabilidade corrigida	125

5.10	Evolução da posição da frente do escoamento linear no decorrer do tempo obtida numérica e analiticamente	126
5.11	Comparação entre a curva de pressão de injeção no tempo, numérica e analítica	126
5.12	Comparação dos raios da frente de resina experimentais e numéricos	127
5.13	Análise da frente de avanço da resina referente ao caso E1. Imagens do experimento e campos obtidos via simulação numérica para 100, 300 e 600 s	128
5.14	Imagens representando campos de saturação geradas com 5 e 2 cores	129
5.15	Variação da pressão dentro da cavidade do molde ao longo da linha horizontal qua passa pelo ponto de injeção de resina	130
5.16	Linha horizontal passando pelo ponto de injeção de resina indicando as posições usadas para avaliar o campo de pressão	130
5.17	Campos de pressão obtidos numericamente para 100, 300 e 600 s	131
5.18	Visualização em 3D do campo de pressão em 600 s	131
5.19	Vazão de injeção de resina calculada numericamente ao longo do tempo . .	132
5.20	Posição da frente de resina para três instantes de tempo	133
5.21	Campo de pressão no interior da cavidade em $t=35$ s	134
5.22	Detalhe do campo de pressão na região de injeção de resina em $t=35$ s . .	135
5.23	Curva de pressão na região de injeção de resina em $t=35$ s	135
5.24	Curva de pressão na região de injeção de resina em $t=35$ s	136
5.25	Evolução da pressão ao longo do tempo de processo para os “sensores” 1 e 2	136
5.26	Perfil da pressão ao longo da linha de simetria da geometria para três instantes de tempo	137
5.27	Perfil da pressão ao longo da linha de simetria da geometria para $t=5$ s . .	137
5.28	Posição da frente de resina para as três distribuições de pontos de injeção estudadas em dois instantes de tempo	138
5.29	Evolução da pressão com o tempo em um dos pontos de injeção de resina distribuídos conforme o esquema 3	139
5.30	Posição da frente de resina para o esquema 3 de distribuição de pontos de injeção em $t = 1600$ s	139
5.31	Campos de pressão obtidos com o esquema 3 de distribuição de pontos para quatro instantes de tempo	140

5.32	Fluxo de informações entre as ferramentas desenvolvidas no presente trabalho	141
5.33	A caixa de diálogo “Sobre” com informações relevantes do aplicativo	143
5.34	Janela principal da ferramenta de pré-processamento	143
5.35	Aba de propriedades das fases fluidas	145
5.36	Aba de propriedades do meio poroso	145
5.37	Aba de parâmetros referentes às entradas de resina, saídas de ar e sensores	146
5.38	Atribuição de parâmetros dos pontos	147
5.39	Visualização da malha e da distribuição dos pontos (entradas de resina, saídas de ar e sensores)	148
5.40	Visualização dos resultados (arquivos vtk) baseada no MayaVi	149
5.41	Visualização avançada baseada no MayaVi	150
5.42	Pipeline de visualização para imagem da Figura 5.41	151
5.43	Figura gerada a partir de uma visualização personalizada via <i>pipeline</i> . . .	152
5.44	Avaliação de grandezas por meio de sensores individuais	152
5.45	Evolução de grandezas medidas por um sensor no decorrer do tempo	153
5.46	Interface para avaliação de grandezas por meio de sensores distribuídos em linhas	153
5.47	Visualização da malha, pontos e linha de sensores	154
5.48	Evolução de grandezas medidas por uma linha de sensores no decorrer do tempo	155
5.49	Evolução da frente da resina com o tempo de processamento	155

LISTA DE TABELAS

2.1	Vantagens e desvantagens de malhas estruturadas e não-estruturadas	39
3.1	Parâmetros utilizados nas simulações	94
4.1	Relação dos casos estudados no presente trabalho de acordo com o objetivo desejado	97
4.2	Parâmetros usados na comparação com a solução analítica para o caso de vazão de injeção constante	99
4.3	Parâmetros usados na comparação com a solução analítica para o caso de pressão de injeção constante	99
4.4	Parâmetros utilizados nas comparações com as soluções analíticas para o caso unidirecional	101
4.5	Parâmetros do caso E1 baseado em experimento com pressão de injeção prescrita	103
4.6	Parâmetros utilizados na simulação para o caso G1	106
4.7	Parâmetros do caso G2	107
5.1	Lista de operadores aritméticos da linguagem Python	146

NOMENCLATURA

Letras Latinas

A	Coefficiente de Equações Algébricas, [-]
A_t	Área transversal, [m^2]
D_i	Difusão da propriedade em coordenadas generalizadas, [$kg/(m^3.Pa.s)$]
g	Aceleração da gravidade, [m/s^2]
G_i	Termo geométrico proveniente de D_i , [-]
h	Altura (ou profundidade) do meio poroso, [m]
h_m	Altura manométrica, [m]
H	Altura d'água na coluna de areia, [m]
J	Jacobiano da transformação de coordenadas, [-]
\mathbf{J}	Matriz jacobiana, [-]
J_{ij}	Elemento da matriz jacobiana, [-]
k	Iteração no método de Newton, [-]
k_{ij}	Componente do tensor permeabilidade, [m^2]
K	Permeabilidade absoluta do meio, [m^2]
$k^{rel,p}$	Permeabilidade relativa da fase p , [-]
L	Comprimento da coluna, [m]
M	Massa total, [kg]
M^p	Massa da fase p , [kg]

m^p	fluxo mássico da fase p , [kg/s]
np	Número de fases do sistema multifásico, [-]
P^p	Pressão da fase p , [Pa]
P	Pressão, [Pa]
q^p	Vazão volumétrica da fase p por unidade de volume, [$m^3/s.\Delta v$]
Q	Vazão volumétrica, [m^3/s]
R	Função resíduo, [-]
\mathbf{R}	Vetor de funções residuais, [-]
R_i	Elementos do vetor de funções residuais, [-]
S^p	Saturação da fase p , [-]
t	Tempo, [s]
V	Volume, [m^3]
v^p	Velocidade da fase p , [m/s]
V^p	Volume da fase p , [m^3]
X	Variável/incógnita do problema na equação de Newton
z	Elevação de referência, [m]
Z^p	Fração mássica da fase p , [-]

Letras Gregas

Δx	Dimensão do volume de controle na direção x , [m]
Δy	Dimensão do volume de controle na direção y , [m]
Δz	Dimensão do volume de controle na direção z , [m]
$\Delta \eta$	Dimensão do volume de controle na direção η , [-]
$\Delta \xi$	Dimensão do volume de controle na direção ξ , [-]
$\Delta \gamma$	Dimensão do volume de controle na direção γ , [-]
Δt	Passo de tempo, [s]
Δv	Volume Discreto, [m^3]
κ	Condutividade hidráulica na equação de Darcy, [m/s]
λ^p	Mobilidade da fase p , [$1/Pa.s$]
$\tilde{\lambda}^p$	Mobilidade modificada fase p , [$kg/(m^3.Pa.s)$]

Γ	Grupo de termos transientes e fonte da equação a ser derivada, [-]
ϕ	Porosidade, [-]
Φ^p	Potencial da fase p , [Pa]
μ^p	Viscosidade da fase p , [Pa.s]
ρ^p	Densidade da fase p , [kg/m ³]
ρ^m	Densidade média da mistura, [kg/m ³]
ξ	Coordenada no plano transformado, [-]
η	Coordenada no plano transformado, [-]
γ	Coordenada no plano transformado, [-]

Subscritos

e, n, s, w	Interfaces do volume de controle P
E, N, S, W	Pontos centrais do volume vizinhos diretos do volume P
f	Referente à frente de avanço da resina
i	Referente às direções x, y, z
inj	Referente à injeção de resina
m	Matriz
NE, NW, SE, SW	Pontos centrais do volumes vizinhos cruzados do volume P

Sobrescritos

a	Ar
e	Valor experimental
k	Nível iterativo do ciclo de <i>Newton</i>
m	Mistura
n	Valor numérico
o	Instante de tempo anterior
p	Fase p
r	Resina

rel Relativa

Siglas

BEM	<i>Boundary Element Method</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
EGM	<i>Effective Gate Method</i>
FAN	<i>Flow Analysis Network</i>
FTM	<i>Front Tracking Method</i>
GUI	<i>Graphical User Interface</i>
LCM	<i>Liquid Composite Molding</i>
LRTM	<i>Light Resin Transfer Molding</i>
LSM	<i>Level Set Method</i>
MDF	<i>Método das Diferenças Finitas</i>
MEF	<i>Método dos Elementos Finitos</i>
MEFVC	<i>Método dos Elementos Finitos baseado em Volumes de Controle</i>
MVC	<i>Método dos Volumes Finitos</i>
NB	<i>Vizinhança do volume P</i>
OO	<i>Orientada ou Orientação a Objetos</i>
POO	<i>Programação Orientada a Objetos</i>
RTM	<i>Resin Transfer Molding</i>
UDS	<i>Upwind Difference Scheme</i>
UFL	<i>Unsaturated Flow Layer</i>
VOF	<i>Volume of fluid</i>
XML	<i>eXtensible Markup Language</i>
WAF	<i>Weighted Average Flux</i>

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Os materiais compósitos vêm servindo ao homem desde tempos remotos. São materiais desenvolvidos a partir de dois ou mais constituintes e apresenta características comuns aos mesmos. A possibilidade de se criar um material, a partir da combinação de outros, para atender uma determinada demanda da indústria é o grande atrativo para o interesse nos compósitos, principalmente em aplicações automobilísticas e aeronáuticas. A moldagem por transferência de resina ou RTM (*Resin Transfer Molding*) é um método de produção de compósitos caracterizado pelo preenchimento com resina da cavidade de um molde, previamente preenchido com o material de reforço. Para que o processo seja otimizado, é fundamental conhecer a influência de alguns parâmetros na etapa de preenchimento do molde.

Os avanços nos computadores têm tornado a simulação computacional uma importante alternativa para o estudo dos mais diversos problemas físicos, minimizando riscos e custos. Simulações computacionais envolvem a solução de modelos matemáticos capazes de prever o comportamento do fenômeno estudado. Para solução das equações são usados métodos numéricos que fornecem resultados aproximados mas úteis do ponto de vista da engenharia. Estes métodos são caracterizados pela discretização do domínio de solução em células ou pontos, delimitados por uma malha computacional. As malhas cartesianas, apesar de serem de mais simples aplicabilidade, apresentam maior dificuldade

para se modelar problemas envolvendo geometrias complexas. Nestes casos, é preferível o uso de malhas generalizadas, também conhecidas como malhas coincidentes com as fronteiras. Os valores das grandezas de interesse são calculados discretamente nas subdivisões do domínio. O método dos volumes finitos (MVF) é bastante usado em problemas de escoamento de fluidos, pois garante a conservação das grandezas físicas envolvidas. O uso dessa ferramenta como aliada na otimização de processos RTM é o objeto de estudo do presente trabalho.

Grande parte das publicações disponíveis na literatura utilizam abordagens unidimensionais (injeção radial ou linear) e modelos que consideram a presença de apenas uma fase, a resina, aplicados a injeção em moldes com forma retangular. Quando usam soluções numéricas, os pesquisadores têm utilizado métodos de discretização das equações diferenciais que fazem uso de técnicas específicas para localização da frente de resina. Ao utilizar o método dos elementos finitos (MEF) ou dos volumes finitos baseado em elementos (MEFVC) normalmente consideram o problema de preenchimento do molde transiente como uma série de problemas quase estacionários, com limitações relacionadas à magnitude do passo de tempo utilizado. Em problemas mais complexos, como, por exemplo, em situações tridimensionais envolvendo escoamentos bifásico (ar e resina no interior do molde), geralmente são usados softwares comerciais, de custo elevado, e que não permitem completo acesso ao código-fonte, impossibilitando a implementação de alterações menos superficiais à modelagem.

O presente trabalho busca utilizar um modelo bifásico (resina e ar), capaz de modelar a interação entre as duas fases presentes no sistema, aliado às potencialidades do MVF para obtenção da solução numérica, garantindo a conservação das grandezas envolvidas, sem a necessidade de nenhum mecanismo adicional de rastreamento da frente de avanço da resina no meio poroso. Além disso, a discretização espacial das equações governantes é realizada em coordenadas generalizadas que amplia a aplicabilidade da metodologia a estudos envolvendo geometrias arbitrárias, não ficando restrita a estudos de casos de injeção radial e linear em geometria retangular. Na discretização temporal, faz-se uso da metodologia totalmente implícita, via método de Newton, permitindo que a solução transiente seja obtida utilizando um esquema de passo de tempo variável, de convergência mais rápida, exigindo menos recursos de hardware. Adicionalmente, apresenta-se um sistema de

software, com ferramentas de pré e pós-processamento, capaz de auxiliar pesquisadores e engenheiros no estudo e otimização de processos RTM. O sistema de software proposto, totalmente desenvolvido no Brasil, é pioneiro em território nacional e seria o primeiro em língua portuguesa.

1.1 Objetivo Geral

Desenvolver uma modelagem matemática com sua solução numérica e um sistema de software para estudo de escoamentos de fluidos em meios porosos com particular referência ao processo de Moldagem por Transferência de Resina (RTM) para produção de materiais compósitos.

1.2 Objetivos Específicos

- Modelar matematicamente o fluxo de fluidos (resina e ar) em meios porosos fibrosos com geometria arbitrária;
- Apresentar a solução numérica das equações governantes usando o método dos volumes finitos em coordenadas generalizadas;
- Implementar um simulador bifásico bidimensional capaz de utilizar malhas coincidentes com as fronteiras do domínio para possibilitar o estudo de geometrias com fronteiras irregulares difíceis de serem estudadas com malhas cartesianas;
- Desenvolver um ambiente de pré-processamento para definição das propriedades dos fluidos e do meio poroso, condições de contorno, parâmetros da simulação, distribuição de portas de entrada de resina e saídas de ar, geração e visualização da malha;
- Criar um ambiente de pós-processamento para visualização das grandezas físicas calculadas, tais como: pressão e saturação das fases, e produção de saída de dados na forma de arquivos ou gráficos.
- Aplicar o estudo ao fluxo de resina e ar em meios porosos fibrosos durante a produção

de materiais compósitos via processo RTM nas configurações de injeção retilínea e radial;

- Comparar os resultados numéricos relativos à posição da frente de fluxo, tempo de preenchimento do molde e níveis de pressão medidos durante o processo, com dados obtidos analiticamente e experimentalmente visando a validação do modelo e do simulador desenvolvidos;
- Avaliar o efeito da vazão ou pressão de injeção e da permeabilidade do meio na posição da frente de fluxo de resina e no tempo de preenchimento do molde.

1.3 Organização do Trabalho

O Capítulo 2 define os materiais compósitos e o método de produção via RTM. Em seguida, descreve conceitos de dinâmica dos fluidos em meios porosos, bem como o uso de CFD e métodos numéricos para solução deste tipo de problema. Ainda são apresentados conceitos introdutórios de desenvolvimento de ambientes para simulação, com etapas de pré e pós-processamento.

O Capítulo 3 mostra a obtenção da equação de conservação da massa para escoamentos monofásicos e multifásicos. Além disso, é apresentada discretização, por meio do MVF, das equações que compõem o modelo matemático, assim como a solução via metodologia totalmente implícita e método de Newton. O capítulo traz ainda diversos detalhes importantes para a modelagem numérica, tais como: o sistema de coordenadas generalizadas, esquema UDS utilizado para cálculo das propriedades nas interfaces dos volumes, a derivação das funções residuais, como é feito o cálculo numérico das derivadas, o esquema de passo de tempo variável e as condições de contorno utilizadas.

Informações acerca de como é feita validação da modelagem apresentada no presente trabalho com soluções algébricas disponíveis na literatura para escoamentos radiais e retilíneos são descritas no Capítulo 4. Além disso, demonstra-se como são realizadas as simulações em casos experimentais com geometrias retangulares e em casos envolvendo geometrias com fronteiras irregulares. O capítulo também apresenta conceitos úteis ao desenvolvimento das ferramentas computacionais no presente trabalho.

Os resultados obtidos são mostrados e discutidos no Capítulo 5, como a validação da modelagem matemática e da solução numérica em problemas cuja solução analítica é conhecida. Também são mostrados resultados referentes ao estudo de viabilidade das simulações como ferramenta auxiliar em estudos experimentais e em casos envolvendo geometrias irregulares. O capítulo ainda descreve as características principais das ferramentas computacionais desenvolvidas.

Finalmente, o Capítulo 6 lista as conclusões finais e sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são abordados os fundamentos teóricos sobre os quais este trabalho foi desenvolvido. Inicialmente são introduzidas definições sobre os materiais compósitos e o método de produção via Moldagem por Transferência de Resina (RTM). Em seguida, são abordados conceitos gerais referentes à dinâmica dos fluidos em meios porosos, incluindo a lei de Darcy como equação de conservação de momento. Logo após, o assunto passa a ser o uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) e métodos numéricos para solução deste tipo de problema. São apresentados ainda alguns conceitos introdutórios relativos ao desenvolvimento de ambientes para simulação, incluindo as etapas de pré e pós-processamento.

2.1 Materiais compósitos

2.1.1 Características gerais

Um compósito é um material que consiste de dois ou mais materiais distintos combinados em nível macroscópico, sem que estejam dissolvidos um no outro Kaw (2010). São materiais que vem sendo utilizados há muito tempo pelo homem. “Não forneceréis mais, como dantes, a palha ao povo para fazer os tijolos: irão eles mesmos procurá-la”. O trecho,

retirado de Gênesis 5.7, evidencia uma referência bíblica sobre o uso de palha pelos egípcios para reforçar tijolos feitos à base de argila, conforme cita Daniel e Ishai (1994). Os guerreiros mongóis utilizavam uma mistura de chifre, madeira e nervos de animais para construção de seus arcos compósitos, arma reconhecida como tecnologicamente avançada para o combate a distância (Gay *et al.*, 2002).

Os compósitos podem ser encontrados na natureza, como é o caso da madeira. Para a engenharia, entretanto, são normalmente considerados compósitos apenas os materiais manufaturados pelo homem, que comungam propriedades de suas fases constituintes mas, acima de tudo, apresentam características únicas capazes de atender às exigências de uma aplicação específica que um material contínuo convencional não satisfaz isoladamente (Chawla, 1987; Kreith *et al.*, 2004). Essa situação é mais comum em algumas áreas da indústria. Estruturas de aeronaves, por exemplo, exigem o uso de materiais estruturais que devem apresentar baixa densidade, alta resistência mecânica, rigidez e serem ainda resistentes a abrasão, impacto e corrosão.

Quilter (2004) afirma que os materiais compósitos são particularmente atrativos para aplicações na indústria aeronáutica e aeroespacial devido às suas excepcionais razões de rigidez e resistência mecânica em relação à densidade, com boas propriedades físicas. Como exemplo, a Figura 2.1 ilustra o uso de compósitos no bombardeiro invisível B-2 Spirit ou Stealth B-2. Segundo Deo *et al.* (2001) a baixa densidade desses materiais comparada com a dos metais, já havia reduzido o peso da estrutura em cerca de 60%.

São diversas as possibilidades de combinações de propriedades para produção de um material compósito. Essa característica singular desses materiais é bastante interessante para os engenheiros projetistas e tem promovido o crescimento em sua utilização.

As fases constituintes de um material compósito recebem a designação de matriz (fase contínua) e reforço (fase dispersa). Algumas vezes, devido a interações químicas ou efeitos de processamento, uma fase adicional, chamada interfase, aparece entre o reforço e a matriz, como ilustra a Figura 2.2. Cada uma das fases desempenha papéis bem definidos na estrutura do material (Daniel e Ishai, 1994). As principais funções da matriz são: envolver e proteger o reforço de agentes externos (danos físicos e ambientais), além de

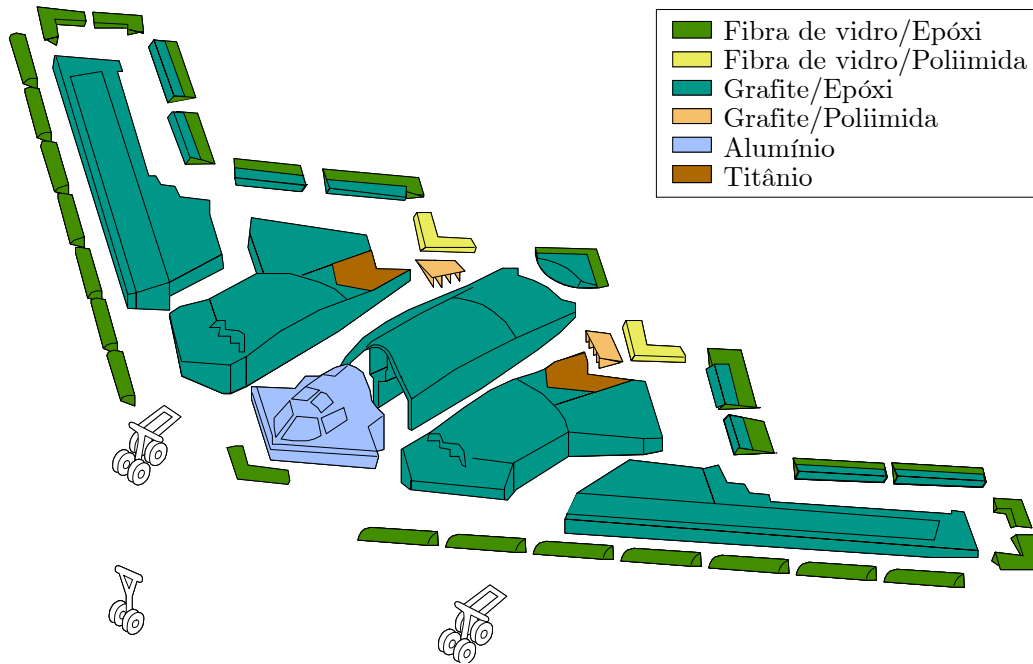


Figura 2.1: *Aplicação de compósitos no Stealth B-2. Fonte: Deo et al. (2001).*

transmitir-lhe as tensões externas distribuindo as cargas. É também responsável pela capacidade do material de resistir ou conduzir calor e eletricidade. Os reforços, constituídos por materiais sólidos, não solúveis e mais resistentes do que a matriz, tem geralmente o papel de aumentar a resistência mecânica do material. A interfase, mesmo com tamanho reduzido, pode desempenhar um papel importante nos mecanismos de falha, resistência à fadiga e no comportamento tensão-deformação do material (Daniel e Ishai, 1994).

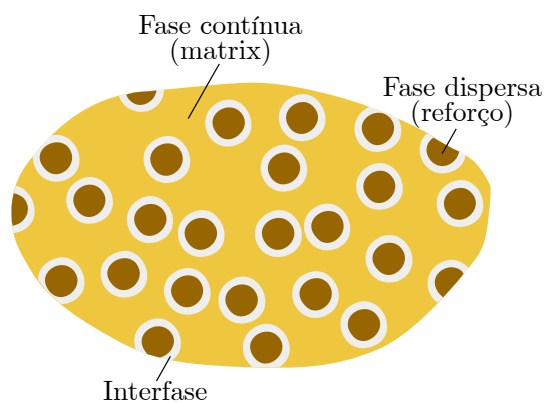


Figura 2.2: *Fases de um material compósito. Fonte: Daniel e Ishai (1994).*

Existem três tipos principais de materiais usados como matrizes: polímeros, metais e cerâmicos. Os polímeros em particular são bastante utilizados pois, além de outras ca-

racterísticas, apresentam baixa densidade, boa ductilidade e são fáceis de se fabricar. Há dois tipos principais de polímeros: termorrígidos (termofixos) e termoplásticos. Os termoplásticos encontram-se como sólidos à temperatura ambiente, tornando-se fluidos quando aquecidos a altas temperaturas e voltando a se solidificar quando resfriados. Os termorrígidos são normalmente líquidos à temperatura ambiente e se solidificam por um processo químico chamado cura, onde sofrem reações químicas irreversíveis, com a formação de ligações cruzadas, tornando-se materiais rígidos, infusíveis e insolúveis (Crawford, 1998).

O reforço influencia diversas características estruturais do material produzido: a distribuição das partículas ou fibras determina a homogeneidade ou uniformidade, enquanto que a geometria e a orientação afetam a anisotropia (Daniel e Ishai, 1994). Assim, os materiais compósitos podem ser classificados em três categorias de acordo com o tipo, a geometria e a orientação da fase de reforço, como mostra a Figura 2.3.

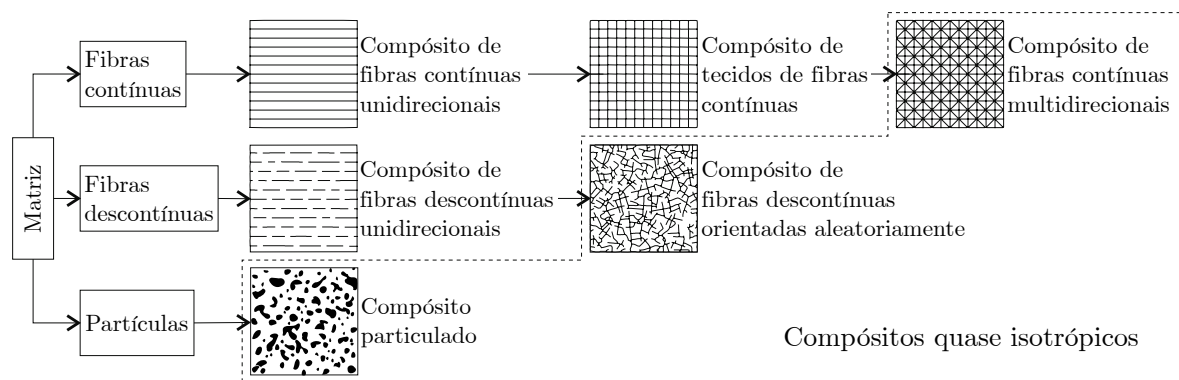


Figura 2.3: Tipos de sistemas de compósitos. Fonte: adaptado de Daniel e Ishai (1994).

2.1.2 Processamento de compósitos poliméricos e a moldagem por transferência de resina (RTM)

Existem diversos métodos de produção de compósitos poliméricos, e a escolha deve ser feita de acordo com parâmetros como geometria e acabamento desejado, quantidade de peças a serem produzidas e tipo de aplicação (Vafai, 2005). Alguns destes métodos se enquadram em um grupo conhecido como LCM (*Liquid Composite Molding*), caracterizado pela infusão de uma matriz (em fase fluida) no interior de um molde fechado contendo o reforço. Depois de impregnar totalmente o reforço, a matriz se solidifica tomando a forma

do molde.

Em processos do tipo LCM, resinas termoplásticas são raramente utilizadas uma vez que apresentam altas viscosidades. São preferíveis as resinas termorrígidas que, devido às baixas viscosidades, mantêm as pressões de injeção em níveis moderados e facilitam o molhamento do reforço fibroso (Goodman, 1998). As fibras mais usadas são de vidro, carbono e aramida.

A moldagem por transferência de resina ou RTM (*Resin Transfer Molding*), da família de processos LCM, é um dos mais promissores processos de produção de peças em material compósito reforçado por fibras, mostrando-se principalmente útil para as indústrias automobilística e aeronáutica. É uma versão moderna de um antigo método de moldagem conhecido como método “Marco” na década de 1950 (Goodman, 1998).

A técnica RTM permite bastante produtividade de peças com boa qualidade de acabamento e forma variada, a custos relativamente baixos. As etapas em que o processo pode ser dividido são vistas na Figura 2.4 e descritas a seguir:

- a) As fibras de reforço são cortadas nas dimensões desejadas e preparadas em preformas;
- b) A cavidade do molde, com a forma desejada para a peça, recebe uma camada de desmoldante e, em seguida, a preforma fibrosa. O molde é fechado de modo que as suas bordas permaneçam perfeitamente vedadas;
- c) A resina é injetada na cavidade do molde por meio de canais de entrada. Altas pressões podem ser aplicadas fazendo com que a resina avance pela preforma fibrosa deslocando o ar para fora do molde através de saídas localizadas estrategicamente. O bombeamento da resina cessa quando esta atinge as saídas de ar;
- d) Ao final da injeção, a resina é curada, solidificando-se e tomando a forma desejada;
- e) O molde é aberto e a peça finalizada é retirada.

A qualidade dos artigos produzidos via RTM, comprovada por características como

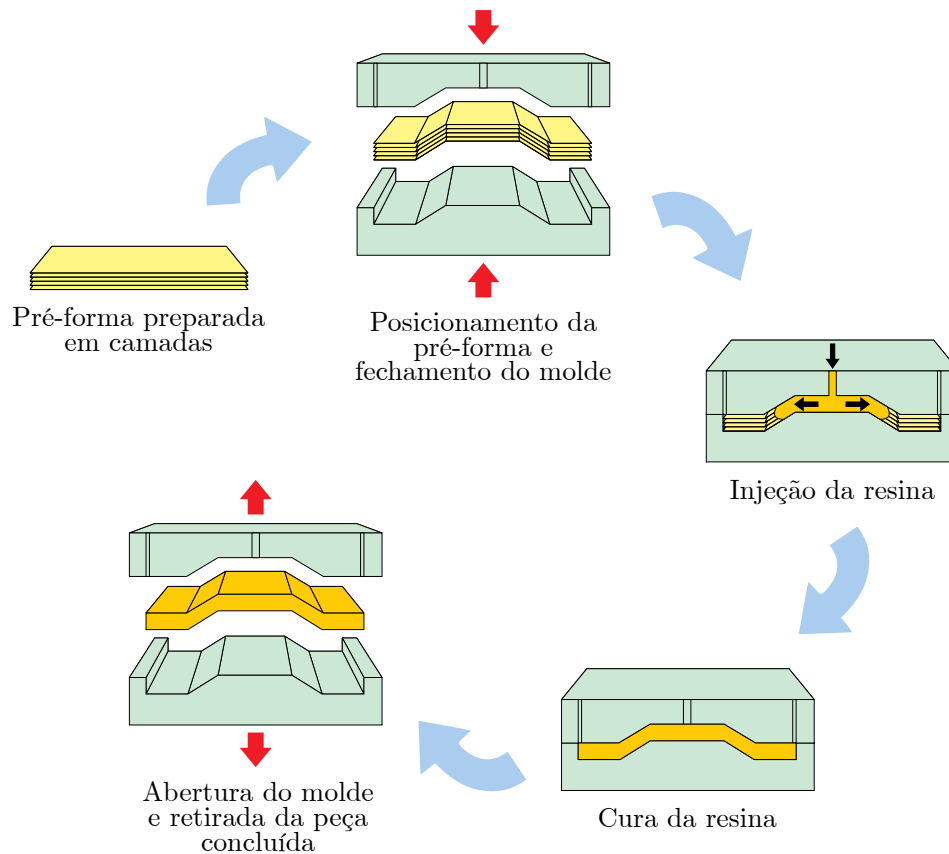


Figura 2.4: *Etapas de um processo RTM típico. Fonte: adaptado de Long (2006).*

resistência mecânica, durabilidade, acabamento superficial e ausência de tensões residuais na peça produzida, depende de características isoladas da pré-forma e da resina, mas também pode sofrer forte influência da etapa de injeção para preenchimento do molde. Experimentos em laboratório mostraram que fatores que influenciam a qualidade do produto podem ser controlados pelo cuidado nas etapas de injeção e cura (Chui *et al.*, 1995). Segundo Shojaei *et al.* (2003a), falhas no processo de injeção podem levar a situações indesejadas, tais como: vazios no interior do molde, necessidade de altos níveis de pressão, tempos de injeção demasiadamente longos, deformação do molde, deslocamento e deformação da pré-forma em locais próximos aos pontos de injeção. A ocorrência destas situações, bem como a sua intensidade, é fortemente influenciada pelo comportamento do fluxo da resina.

Durante o preenchimento do molde, a pré-forma deve ser completamente saturada com a resina (Long, 2006). A forma como se dá o escoamento depende de fatores como geometria do molde, propriedades dos materiais e parâmetros do processo, como taxa de

vazão ou pressão de injeção. Os parâmetros do processo merecem um cuidado especial e devem obrigatoriamente ser otimizados numa etapa anterior até mesmo à de projeto e construção dos moldes (Shojaei *et al.*, 2003a). Além disso, para que o processo RTM seja economicamente viável, o fator tempo é primordial. Segundo Saouab *et al.* (2001), as principais condições para uma produção eficiente são a perfeita impregnação do reforço e o preenchimento total do molde no menor intervalo de tempo entre o início da injeção e a conclusão da peça.

2.2 Escoamento em meios porosos

Segundo Muskat e Wyckoff (1946), um meio poroso é caracterizado pela presença de espaços vazios de tamanhos e formas variadas entre as partículas sólidas que o compõem. Ao material sólido dá-se o nome de matriz sólida enquanto que os espaços vazios são chamados de poros. Os poros podem ser preenchidos por um ou mais fluidos, conforme Figura 2.5. Em qualquer um dos casos, só existe escoamento nos espaços vazios da matriz porosa onde existem poros interconectados, quando, segundo Kaviany (1995), se formam canais por onde um fluido pode escoar. Daí surge o conceito de porosidade efetiva que será discutido posteriormente, na Seção 2.2.2.2.

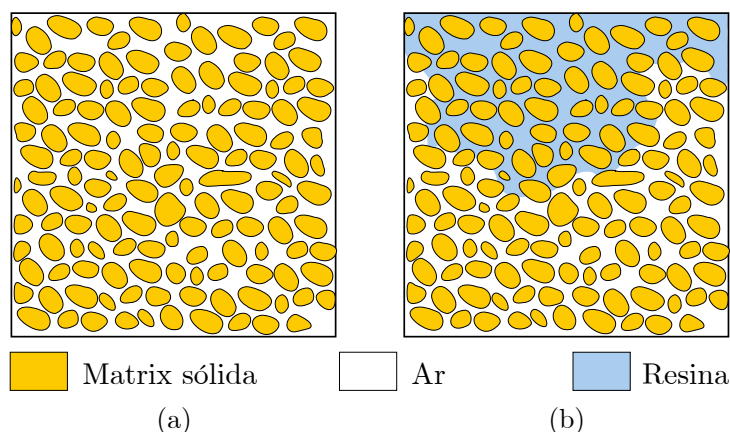


Figura 2.5: Meio poroso com (a) um ou (b) dois fluidos. Fonte: Adaptado de Bastian (1999).

As características do escoamento são dependentes da velocidade em que as partículas fluidas se movimentam. Sob baixas velocidades, a inércia do fluido pode ser desprezada.

Este tipo de regime, denominado laminar, é verificado em casos de escoamentos em meios porosos (Ferziger e Perić, 2002).

2.2.1 Meios porosos e o processo RTM

Em um processo RTM típico, a resina escoava através de rede de canais e caminhos formados pelos espaços vazios situados entre os fios das fibras. As dimensões desses canais são ínfimas quando comparadas à espessura do molde (Long, 2006).

Devido à arquitetura da preforma, o escoamento no seu interior pode ser caracterizado em duas escalas distintas (Figura 2.6):

Macroscópica: caracterizada pelo avanço da resina através dos canais de ar formados entre os fios que compõem a preforma.

Microscópica: quando a resina penetra no interior dos fios, entre os filamentos de fibras.

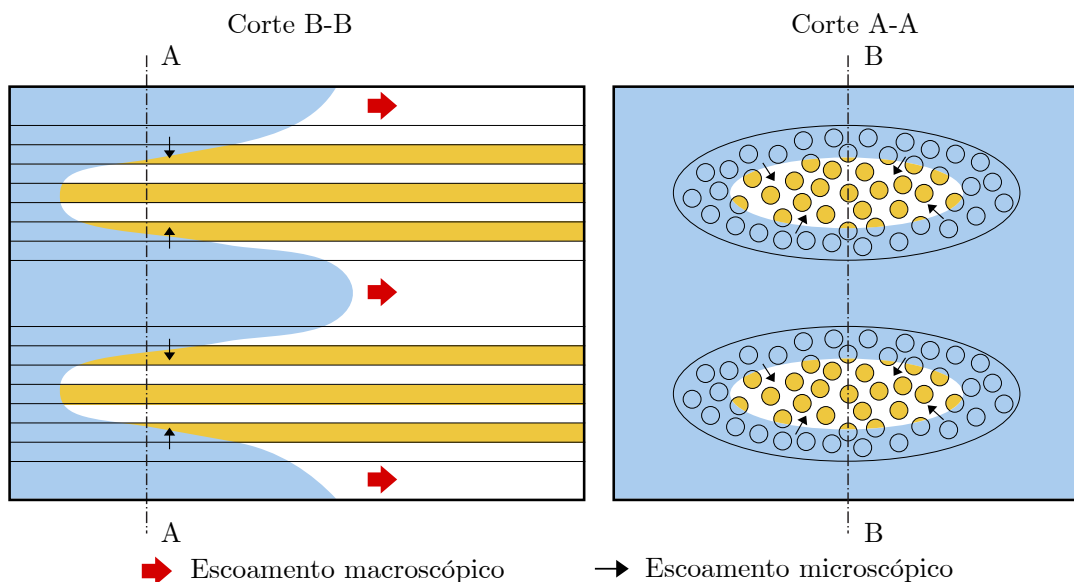


Figura 2.6: Escoamentos em escala micro e macroscópica. Fonte: Long (2006).

É importante salientar que o comportamento dos fluidos é influenciado por fatores nas diferentes escalas (Bastian, 1999). O escoamento macroscópico é governado pelo gradiente

de pressões no interior do molde e leva ao preenchimento do mesmo. O escoamento microscópico é dominado pela pressão capilar, dependendo fortemente da tensão superficial, estando relacionado à saturação completa da preforma (Shojaei *et al.*, 2003b).

Em simulações de processos RTM, é comum estudar o problema considerando o preenchimento do molde pela resina como o escoamento de um fluido através do meio poroso (Shojaei *et al.*, 2003a). Segundo Chui *et al.* (1995), a maioria dos modelos usados para o processo de preenchimento de resina é direcionado ao comportamento do fluxo em escala macroscópica, ou seja, na escala do molde e da preforma. Devido à presença da preforma, o sistema pode ser tratado como um escoamento não isotérmico. Entretanto, em muitos casos, o processo de preenchimento da resina na fibra é isotérmico (Vafai, 2005).

Recentemente, alguns autores passaram a utilizar a escala mesoscópica em estudos envolvendo escoamentos na produção de compósitos (Rouhi *et al.*, 2013; Schell *et al.*, 2007; Verleye *et al.*, 2010).

2.2.2 Parâmetros do processo e propriedades dos materiais

2.2.2.1 Conceitos gerais

As propriedades dos fluidos dependem de como as moléculas interagem individualmente, em uma escala muito menor que a microscópica (escala molecular) (Bastian, 1999; Faigle, 2009). Assim, teoricamente, a forma mais correta de estudar qualquer problema físico seria analisando o comportamento das moléculas que compõem os fluidos presentes no sistema. Entretanto, mesmo para uma pequena quantidade de matéria, o número de moléculas por unidade de volume é, em geral, bastante grande. Para se ter idéia, 1g de água pura contém mais de 10^{22} moléculas (Faigle, 2009). Seria quase impossível estudar um fenômeno físico levando em consideração a presença de cada molécula isoladamente. Assim, é comum uma análise macroscópica do problema, considerando uma distribuição espacial contínua.

Para Bear e Braester (1972), a única forma viável de tratar escoamentos fluidos em meios porosos é a abordagem do contínuo, na qual as grandezas relacionadas às fases e

ao meio são consideradas funções contínuas no espaço e no tempo, calculadas a partir de médias das propriedades microscópicas locais. O conceito de Volume Representativo Elementar ou REV (Representative Elementary Volume) é primordial para a compreensão de como são realizados estes cálculos de médias e pode ser ilustrado pelo cálculo de alguma propriedade do meio, como por exemplo, a porosidade (Bastian, 1999).

Conforme descrito por Bear e Braester (1972), suponha um ponto P escolhido aleatoriamente no meio poroso, e que este ponto seja o centro de uma região esférica (ou circular para uma geometria bidimensional), vide Figura 2.7. Quando o valor do raio r é muito baixo, perto de zero, o valor da porosidade é zero ou um, dependendo se o ponto P está em um espaço vazio ou sobre a matriz sólida. À medida que o raio cresce, o valor da porosidade sofre oscilações e, em certo ponto, se estabiliza.

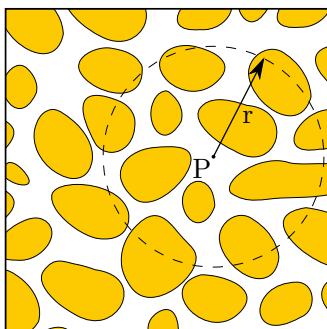


Figura 2.7: *Definição do volume elementar representativo em um plano. Fonte: Adaptado de Bastian (1999).*

Observando a Figura 2.8 nota-se que não ocorrem oscilações na faixa compreendida entre os valores de $r_{mín}$ e $r_{máx}$. Essas dimensões servem como limites para a escolha do tamanho de um REV satisfatório. Informações mais detalhadas podem ser encontradas em Bear (1972).

Quando se estuda o problema em escala macroscópica, alguns parâmetros e quantidades desaparecem, (como, por exemplo, a dimensão de uma partícula sólida do meio poroso), uma vez que o objeto de estudo passa a ser apenas as quantidades médias calculadas (Sinsbeck, 2011). A Figura 2.9 ilustra como a exata distribuição dos fluidos no interior dos poros na escala microscópica passa a não ser levada em consideração quando

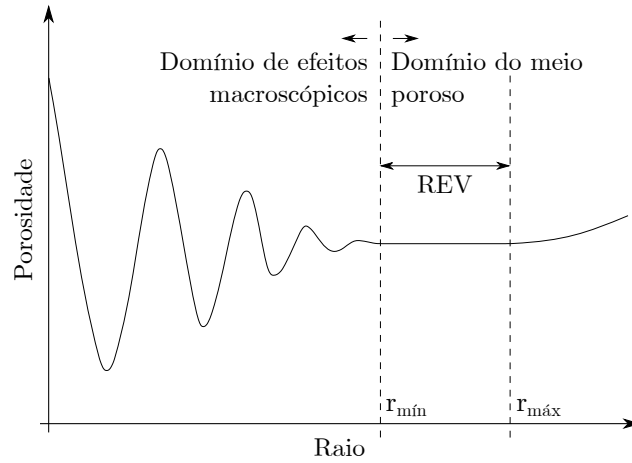


Figura 2.8: Variação da porosidade com a dimensão do REV. Fonte: Adaptado de Bear (1972).

ocorre a migração do problema para a escala macroscópica.

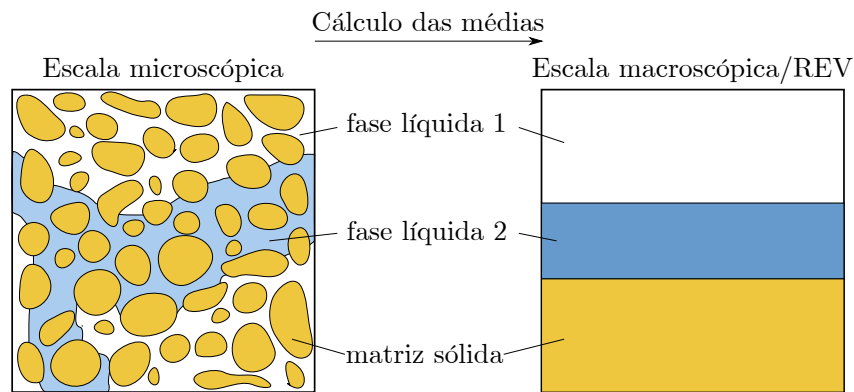


Figura 2.9: Mudança de quantidades da escala microscópica para a macroscópica. Fonte: Sinsbeck (2011).

2.2.2.2 Propriedades do meio

Conforme visto na Seção anterior, quando se considera o problema em escala macroscópica, a geometria dos poros não é mais visível, sendo necessário definir novas quantidades capazes de descrever a estrutura porosa do meio (Sinsbeck, 2011).

a) Porosidade:

Para Collins (1961), a porosidade de um meio é uma grandeza adimensional calculada

como a fração do volume total ocupada pelos espaços vazios:

$$\phi = \frac{V_v}{V_T} = \frac{\text{Volume de vazios}}{\text{Volume total}} \quad (2.1)$$

Em outras palavras, ϕ é a fração de volumes vazios do meio, variando entre $0 < \phi < 1$. A porosidade é também considerada como a fração de volume da resina do compósito (matriz) após o preenchimento, v_m , podendo ser relacionada à fração de volume da fibra, v_f (Sayre, 2000):

$$\phi = v_m = 1 - v_f \quad (2.2)$$

Em meios heterogêneos, a porosidade é função da posição, podendo depender da pressão (caso o meio seja compressível) ou do tempo (Faigle, 2009). Porosidade efetiva é a fração do volume constituída apenas por poros interconectados que possibilitam a ocorrência de escoamento.

b) Permeabilidade:

A presença da matriz sólida dificulta o escoamento do fluido. Em seus experimentos, Henry Darcy, cuja importante contribuição para as pesquisas sobre escoamentos em meios porosos será mostrada com detalhes na Seção 2.2.3, mostrou que a vazão com que um fluido escoar em um meio poroso é diretamente proporcional a um coeficiente que depende da permeabilidade desse meio. Collins (1961) define a permeabilidade como uma propriedade intrínseca do meio poroso que indica o quão fácil é para um fluido escoar no seu interior.

Em aplicações de engenharia, dependendo de como algumas de suas propriedades variam dentro de sua estrutura, os materiais podem ser separados em três subgrupos: isotrópicos, ortotrópicos ou anisotrópicos. Um material é dito isotrópico, quando suas propriedades materiais são as mesmas em todas as direções. Um material é chamado ortotrópico quando as propriedades são simétricas em três planos perpendiculares entre si. Um material anisotrópico é um material que apresenta propriedades materiais diferentes em todas as direções (Case *et al.*, 1999).

Segundo essa classificação, o tensor permeabilidade apresenta características distintas dependendo do tipo do material. Em um meio anisotópico, tem-se:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

Caso o meio seja ortotrópico, a permeabilidade é:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Em meios isotrópicos, o tensor assume o valor de um escalar:

$$\mathbf{K} = k = k_{xx} = k_{yy} = k_{zz} \quad (2.5)$$

onde k_{ij} são as permeabilidades nas respectivas direções.

Em homenagem a Henry Darcy, a unidade geralmente utilizada para a permeabilidade é o darcy (d), definido segundo Collins (1961) como:

$$1 \text{ darcy} = \frac{1 \text{ (cm}^3/\text{seg)} \cdot 1 \text{ (cp)}}{1 \text{ (cm}^2) \cdot 1 \text{ (atm/cm)}} \quad (2.6)$$

A interpretação física pode ser descrita como: para um material de 1 *darcy* de permeabilidade uma diferença de pressão de 1 *atm* vai produzir uma taxa de fluxo de 1 cm^3/s de um fluido com um 1 *cp* de viscosidade através de um cubo cujos lados medem 1 *cm* (Collins, 1961).

O darcy pode ser expresso de modo mais prático como uma unidade de área. Segundo

Hubbert (1957):

$$1 \text{ darcy} = 0,987 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 = 0,987 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \approx 10^{-12} \text{ m}^2 \quad (2.7)$$

O cálculo da permeabilidade do meio ou sua estimativa é muito importante para a predição de processos RTM e para se alcançar resultados realísticos (Chen *et al.*, 2010; Shojaei *et al.*, 2003b). A permeabilidade da preforma pode ser obtida numericamente, como pode ser visto em Jaganathan *et al.* (2008), ou por meio de estudos experimentais como descrito em Liu *et al.* (2007), Kim e Daniel (2007) e Luz (2011). Predições numéricas são bastante precisas (Chen *et al.*, 2010). Além do mais, a geometria estudada pode ser facilmente alterada e a simulação refeita com muito mais agilidade do que em estudos experimentais (Nabovati *et al.*, 2009). Entretanto, simulações computacionais para modelagem da permeabilidade exigem alto esforço computacional e são restritas a determinados arranjos de feixes de fibras (Chen *et al.*, 2010). Ainda existe a possibilidade de se calcular a permeabilidade pela abordagem mista numérica/experimental como mostrado em Morren *et al.* (2008). Para caracterizar por completo um reforço fibroso, é necessário medir as componentes do tensor permeabilidade (k_{xx} , k_{yy} , k_{zz}). Como a maioria das peças produzidas por RTM tem espessura constante (forma plana) avalia-se apenas duas delas (Ferland *et al.*, 1996). Nesses casos, os métodos de medição experimental de permeabilidade consistem em bombear um fluido de teste para dentro de um molde com uma cavidade plana contendo o reforço (Gauvin e Trochu, 1998). Os métodos podem ser agrupados basicamente em duas categorias: escoamentos retilíneos (paralelos) e radiais. Os escoamentos unidirecionais (retilíneos) ocorrem em moldes retangulares com entrada de resina em uma das extremidades e saída de ar na outra, como na Figura 2.10 (a). Escoamentos radiais são estudados, preferencialmente, em moldes quadrados com um ponto de injeção no centro e uma saída de ar em cada um dos vértices, Figura 2.10 (b). Em ambos os casos, o experimento pode ser realizado sob pressão de injeção ou vazão de injeção constantes (Gauvin e Trochu, 1998).

Os valores da permeabilidade são calculados a partir de dados colhidos no monitoramento do fluxo, tais como: históricos de vazão (ou pressão) de injeção, pressão no interior do molde e a progressão da frente de fluxo (George, 2011). Assim, é comum em esco-

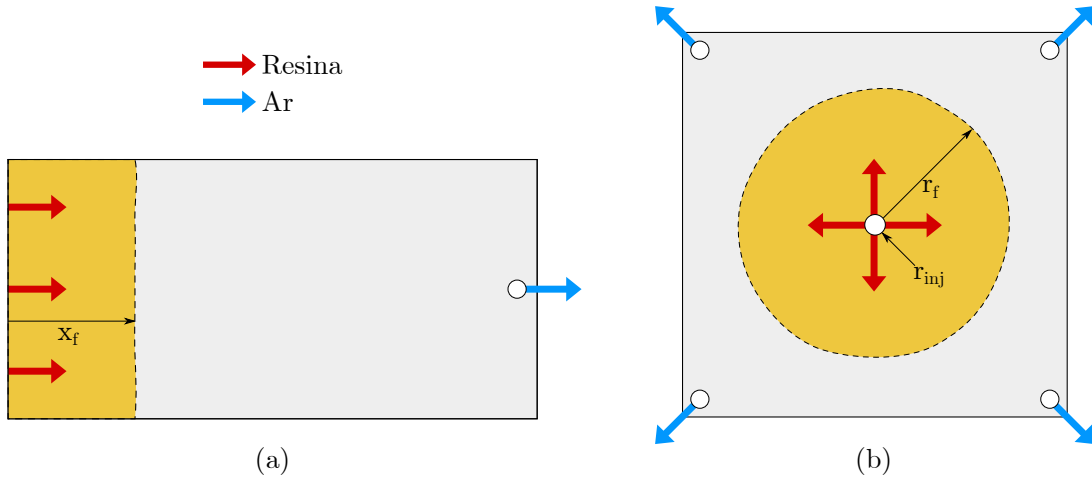


Figura 2.10: Tipos de experimentos para medição da permeabilidade (a) retilíneo e (b) radial. Fonte: Adaptado de George (2011).

mentos radiais a utilização de um material transparente para a cobertura da cavidade do molde, para permitir observar a progressão da frente de fluxo enquanto transdutores medem o campo de pressão em várias posições no interior do molde (Ferland *et al.*, 1996).

Quando se trabalha com escoamentos radiais, um meio isotrópico deve apresentar um avanço em formato circular, enquanto que um meio anisotrópico apresenta um avanço em formato elíptico. Para casos unidirecionais, um estudo deve ser realizado para cada uma das direções que se deseja calcular a propriedade (Shojaei *et al.*, 2003b).

Rudd *et al.* (1997) mostram detalhadamente o desenvolvimento de expressões analíticas capazes de prever escoamentos radiais e retilíneos em meios porosos isotrópicos a partir das equações de Darcy e da conservação da massa. Segundo os autores, para escoamentos radiais com vazão de injeção constante q_{inj} , o tempo de processo necessário para um fluido preencher uma região de raio r_f pode ser calculado por:

$$t_f = \frac{\phi h \pi (r_f^2 - r_{inj}^2)}{q_{inj}} \quad (2.8)$$

onde r_f é o raio da frente no instante de tempo t_f , ϕ é a porosidade do meio, h é a altura da cavidade do molde e r_{inj} é o raio do ponto de injeção. A Figura 2.10 (b) mostra esquematicamente r_f e r_{inj} .

O raio da frente indica a distância entre a frente do escoamento e o ponto central de injeção. A partir da Equação (2.8), pode-se chegar à expressão que fornece a localização da frente do escoamento:

$$r_f = \left(\frac{t_f q_{inj}}{\phi h \pi} + r_{inj}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

Se a condição de operação for de pressão de injeção constante, Rudd *et al.* (1997) demonstram que é possível calcular o tempo de preenchimento por meio da seguinte equação:

$$t_f = \frac{\phi \mu}{2K P_{inj}} \left[r_f^2 \ln \left(\frac{r_f}{r_{inj}} \right) - \frac{1}{2} (r_f^2 - r_{inj}^2) \right] \quad (2.10)$$

onde μ é a viscosidade do fluido injetado e P_{inj} é a pressão manométrica de injeção. A solução desta equação pode ser usada para se conhecer a posição da frente de fluxo em qualquer instante de tempo.

Rudd *et al.* (1997) ainda mostraram como chegar a uma expressão algébrica direta para relacionar a pressão de injeção com a vazão de injeção, dada por:

$$P_{inj} = \frac{q_{inj} \mu}{2\pi h K} \ln \left(\frac{r_f}{r_{inj}} \right) \quad (2.11)$$

Esta equação é válida para qualquer tipo de escoamento radial em meios isotrópicos. Na condição de vazão de injeção constante, permite acompanhar o histórico de pressão no ponto de injeção de resina, em todos os instantes do processo. Quando se mantém a pressão de injeção constante, a equação estima a vazão correspondente de injeção em cada instante de tempo.

2.2.2.3 Propriedades das fases

Na Seção 2.1.1 utilizou-se o termo fase para se referir a cada um dos componentes de um material compósito. A partir daqui, o termo será utilizado para referenciar os fluidos

(ar, resina) envolvidos no fenômeno de dinâmica dos fluidos que ocorre durante o preenchimento do molde pela resina. Fluidos são substâncias que oferecem baixa resistência a forças de cisalhamento externas. Apesar de possuírem características bem distintas, líquidos e gases são considerados fluidos e são regidos pelas mesmas leis de movimento (Ferziger e Perić, 2002).

Chen *et al.* (2006) definem fase como uma quantidade de matéria que possui composição química e estado físico homogêneos. Sempre quando dois ou mais fluidos imiscíveis estão presentes em um meio, seja ele poroso ou não, separados por uma interface nítida (uma fronteira física bem definida), cada fluido recebe a denominação de fase e o sistema é dito multifásico.

Algumas particularidades envolvem os escoamentos multifásicos tornando necessária a definição de algumas grandezas importantes e peculiares a estes tipos de escoamentos.

a) Viscosidade:

Quando um fluido é submetido a esforços de cisalhamento, ele passa a mover-se com uma velocidade de deformação inversamente proporcional a uma propriedade chamada de coeficiente de viscosidade (White, 1998). A viscosidade μ indica a capacidade de um fluido de resistir à deformação promovida por tais esforços. Em uma fase líquida, a viscosidade é inversamente proporcional à temperatura. Para uma fase gasosa, a viscosidade aumenta proporcionalmente com o acréscimo da temperatura. Pode-se usar as seguintes unidades: $[(N.s)/m^2] = [kg/(m.s)] = [Pa.s]$.

b) Densidade:

A densidade da fase ρ^p é a relação entre a massa de uma certa quantidade de matéria e o volume que ela ocupa.

$$\rho^p = \frac{\text{massa da fase } p}{\text{volume da fase } p} = \frac{M^p}{V^p} \quad (2.12)$$

A unidade é kg/m^3 . Para uma fase fluida p , a densidade é função da pressão e tem-

peratura.

$$\rho^p = \rho^p(P^p, T) \quad (2.13)$$

Principalmente para gases, a densidade tem forte influência tanto da pressão como da temperatura. Na fase líquida, a densidade do fluido varia pouco com a pressão, podendo ser apenas considerada como dependente da temperatura. Em processos RTM verifica-se que a fase líquida (resina) pode encontrar-se a altas pressões (máximo de 10 a 15 atm), enquanto que a fase gasosa (ar) encontra-se na maior parte das vezes à pressão atmosférica.

2.2.2.4 Parâmetros do processo

a) Saturação:

A Figura 2.9 ilustra que, assim como acontece com a porosidade, não é possível conhecer a distribuição espacial exata das fases fluidas ou da matriz porosa numa escala macroscópica (Faigle, 2009). Quando o sistema é multifásico, cada fase ocupa uma parte do espaço poroso, o que pode ser expresso pela saturação de cada fase p .

$$S^p = \frac{\text{volume da fase } p}{\text{volume dos espaços vazios}} = \frac{V^p}{V} \quad (2.14)$$

A saturação da fase é a fração do poro que a fase ocupa. Considerando que todos os espaços vazios são completamente preenchidos com as fases do sistema, tem-se que:

$$\sum_{np} S^p = 1 \quad (2.15)$$

onde np é o número de fases presentes no sistema.

b) Fração Mássica:

A fração mássica de uma fase Z^p corresponde à relação entre a massa da fase e a massa total de todas as fases que compõem o sistema (mistura) (Futter, 2012). Apesar do

termo “mistura” sugerir que as fases são miscíveis, neste trabalho, é utilizado para definir qualquer sistema multifásico.

$$Z^p = \frac{\text{massa da fase p}}{\text{massa total da mistura}} = \frac{M^p}{M} \quad (2.16)$$

Por essa definição, pode-se notar que é uma grandeza adimensional e que a soma das frações mássicas para todas as fases de um sistema multifásico resulta em 1.

$$\sum_{np} Z^p = 1 \quad (2.17)$$

É possível calcular a fração mássica da fase p^* , Z^{p^*} , a partir da saturação S^{p^*} (e vice-versa) por meio da seguinte equação:

$$S^{p^*} = \frac{V^{p^*}}{V} = \frac{\frac{Z^{p^*}}{\rho^{p^*}}}{\sum_{np} \frac{Z^p}{\rho^p}} \quad (2.18)$$

onde np é o número de fases presentes no sistema.

c) Permeabilidade Relativa:

Em um sistema multifásico, a presença de uma fase influencia diretamente no escoamento da outra. O espaço poroso para cada fase é reduzido, uma vez que tem que ser compartilhado por ambas. Além disso, conforme visto na Figura 2.9 (lado esquerdo), uma das fases pode bloquear os caminhos pelos quais a outra poderia escoar (Futter, 2012; Liu, 2005).

Conforme descreveu Collins (1961), os mesmos experimentos em meios porosos relativos à permeabilidade, quando realizados para escoamentos multifásicos, sugerem a existência de uma permeabilidade diferente para cada uma das fases. Segundo o autor, nota-se também nestes experimentos que tais permeabilidades são independentes das va-

zões e das propriedades dos fluidos, sendo apenas função da saturação.

$$k^{rel,p} = k^{rel,p}(S^p) \quad (2.19)$$

A permeabilidade relativa $k^{rel,p}$ é uma grandeza adimensional cujo valor varia no intervalo: $0 \leq k^{rel,p} \leq 1$. Segundo Sinsbeck (2011), caso sejam desconsiderados os efeitos capilares, tem-se que a soma das permeabilidades relativas das fases presentes em um sistema multifásico é igual a 1. Assim, pode-se escrever:

$$\sum_{np} k^{rel,p} = 1 \quad (2.20)$$

Em problemas de RTM, segundo Chui *et al.* (1995), as saturações da resina são geralmente altas (>90%) e variam em um espaço físico muito pequeno. Dessa forma, costuma-se considerar para essa faixa um valor de permeabilidade relativa próximo de 1. Pode-se obter a permeabilidade relativa da resina utilizando uma função linear ou quadrática (Chui *et al.*, 1995; Sinsbeck, 2011):

$$k^{rel,r}(S^r) = S^r \quad (2.21)$$

$$k^{rel,r}(S^r) = (S^r)^2 \quad (2.22)$$

As Figuras 2.11 e 2.12 ilustram curvas obtidas com as duas abordagens. Para obter as curvas da permeabilidade relativa do ar nas figuras citadas, utilizou-se a Equação (2.20), ou seja, $k^{rel,r}$ é dado por:

$$k^{rel,a} = 1 - k^{rel,r} \quad (2.23)$$

Trabalhos como os de Brooks e Corey (1964), Bastian (1999), Liu (2005), Futter (2012) e Kumar (2012) citam outras equações para calcular a permeabilidade relativa de escoamentos bifásicos em meios porosos, como os modelos de Van Genuchten, de Brooks-Corey, de Stone ou variações destes.

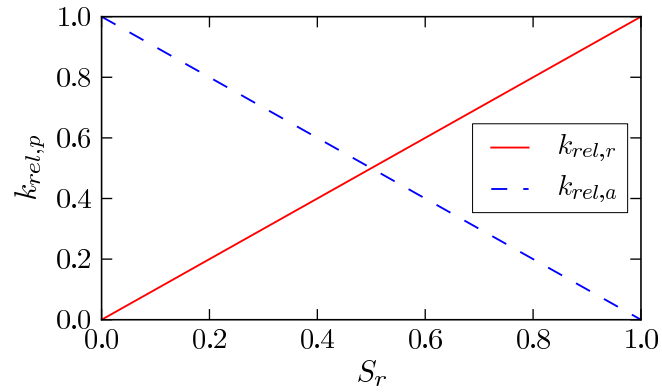


Figura 2.11: Permeabilidades relativas da resina e do ar como função linear da saturação.
 Fonte: próprio autor.

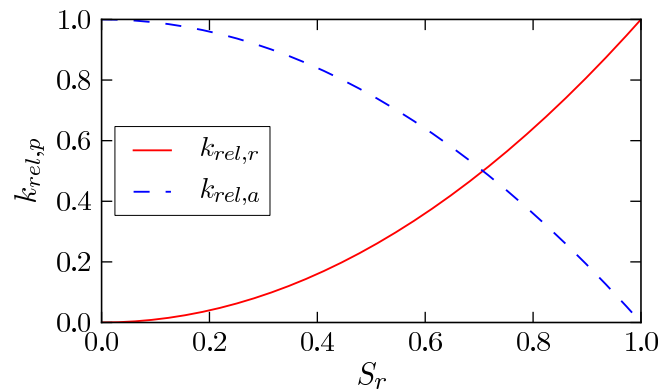


Figura 2.12: Permeabilidades relativas da resina e do ar como função quadrática da saturação.
 Fonte: próprio autor.

d) Pressão Capilar:

Quando dois fluidos imiscíveis estão em contato, existe uma descontinuidade na pressão entre eles que depende da curvatura da interface que separa os fluidos. Essa diferença de pressão é definida como pressão capilar, P_c (Collins, 1961), dada por:

$$P_c = P_n - P_w \geq 0 \quad (2.24)$$

onde P_w é a pressão da fase molhante e P_n é a pressão da fase não-molhante. O conceito de molhante e não molhante é explicado a seguir.

A curvatura na interface entre fluidos distintos pode ser visualizada na Figura 2.13

(a) para um tubo capilar parcialmente imerso e (b) em um meio poroso com duas fases. Na interface fluido-fluido, as forças adesivas (que atraem as moléculas dos fluidos para o sólido) e as forças coesivas (que atraem as moléculas de fluido para fluido) não estão balanceadas, por isso ocorre a curvatura na interface. O ângulo de contato θ entre a superfície sólida e a interface depende da interação entre estas forças e das propriedades dos fluidos (Bastian, 1999). O fluido para o qual $\theta < 90^\circ$ é chamado de fase molhante. O outro fluido é dito fase não-molhante. Uma maneira mais conveniente de realizar essa classificação das fases é citada por Brooks e Corey (1964) ao considerar os dois fluidos em um tubo capilar. Nesse caso, a curvatura na interface é sempre côncava na direção da fase molhante. Em um sistema ar-resina, a resina é considerada a fase molhante (Chui *et al.*, 1997).

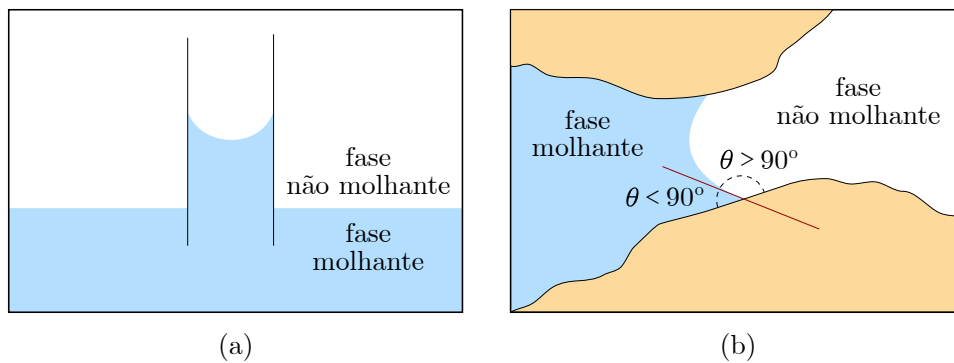


Figura 2.13: Interface fluido-fluido devido à capilaridade: (a) tubo capilar e (b) meio poroso. Fonte: adaptado de Bastian (1999).

Apesar da influência de outras variáveis, geralmente assume-se, segundo Peaceman (1977), que a pressão capilar é uma função apenas das saturações, $P_c = P_c(S_w)$. Alguns modelos que relacionam a pressão capilar com a saturação são citados por Liu (2005), Kumar (2012) e Futter (2012) ou, mais detalhadamente, em Brooks e Corey (1964).

2.2.3 Lei de Darcy

Em meados de 1800, o engenheiro hidráulico francês, Henry Darcy, realizou pesquisas com o intuito de modernizar o sistema de abastecimento de água da cidade de Dijon, França. O resultado de anos de trabalho foi publicado em 1856, em um relatório intitulado *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, acompanhado por um Atlas de

ilustrações. Em uma etapa da pesquisa, ele se deparou com um problema durante o projeto de um filtro de areia. Darcy precisava saber o quão grande o equipamento deveria ser para filtrar uma determinada vazão diária de água. Como não encontrou a informação na literatura disponível na época, decidiu obtê-la empiricamente (Hubbert, 1957). Darcy acabou propondo uma equação capaz de descrever escoamentos laminares em meios porosos (Muskat e Wyckoff, 1946).

O aparato utilizado pode ser visto na Figura 2.14. De acordo Hubbert (1957), Darcy mostrou que quando a água flui verticalmente através da areia, o volume de água que passa pelo sistema em uma unidade de tempo, Q , é dado por:

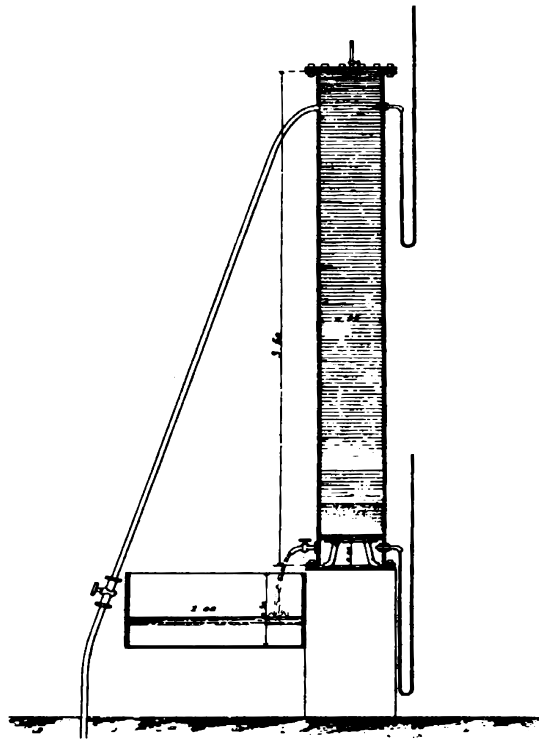


Figura 2.14: Reprodução da ilustração original do dispositivo usado por Darcy. Fonte: Darcy (1856).

$$Q = \kappa A_t \frac{H_2 - H_1}{L} \quad (2.25)$$

onde κ é a condutividade hidráulica, A_t e L são, respectivamente, a área da seção transversal e o comprimento da coluna de areia, H_2 e H_1 são as medições de altura d'água

coletadas nas extremidades superior e inferior da coluna de areia, respectivamente. Estas grandezas podem ser visualizadas na Figura 2.15 que mostra um dispositivo proposto por Hubbert (1957) para generalizar o experimento de Darcy em qualquer inclinação.

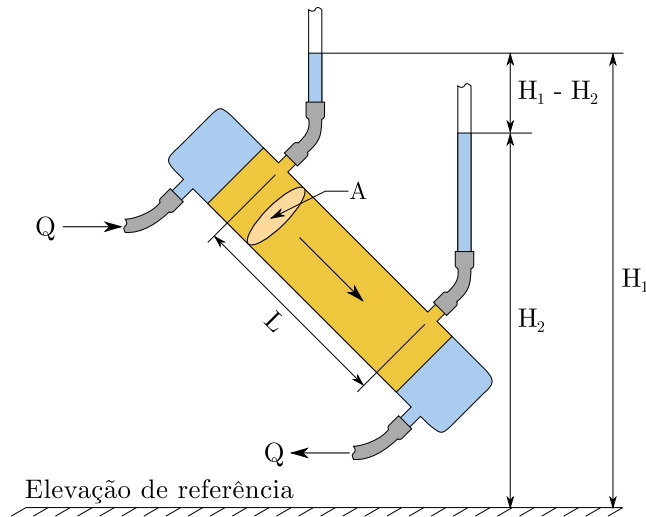


Figura 2.15: Dispositivo proposto para generalizar a lei de Darcy para diversas inclinações. Fonte: Hubbert (1957).

A condutividade hidráulica é definida por:

$$\kappa = \frac{K \rho g}{\mu} \quad (2.26)$$

onde K é a permeabilidade do meio, g é a gravidade, ρ e μ são, respectivamente a densidade e viscosidade da água.

Pode-se definir a velocidade de filtração dividindo a vazão volumétrica Q na Equação (2.25) pela área:

$$v = \kappa \frac{H_2 - H_1}{L} \quad (2.27)$$

Em um ponto qualquer com elevação z e altura manométrica h_m , dentro do sistema

com um fluido de densidade ρ , a pressão P pode ser calculada pela equação:

$$P = \rho g(h_m - z) \quad (2.28)$$

ou

$$h_m = \frac{P}{\rho g} + z \quad (2.29)$$

Substituindo-se as Equações (2.26) e (2.29) na Equação (2.27) e realizando algumas manipulações algébricas obtém-se:

$$v = \frac{K}{\mu} \left(\frac{P_2 - P_1}{L} + \rho g \frac{z_2 - z_1}{L} \right) \quad (2.30)$$

Escrevendo na forma diferencial vetorial tem-se:

$$\vec{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla P + \rho \vec{g} \nabla z) \quad (2.31)$$

onde o sinal negativo indica que o fluxo ocorre na direção contrária à dos gradientes, ou seja, da posição de maior para de menor pressão/coordenada vertical.

Em escoamentos horizontais, como por exemplo aqueles utilizados para medição de permeabilidade citados na Seção 2.2.2.2, os efeitos gravitacionais têm pouquíssima influência e o termo $\rho \vec{g} \nabla z$ pode ser desprezado (Collins, 1961).

Apesar de avaliar o escoamento de forma macroscópica, experimentos realizados apontaram resultados satisfatórios para baixos números de Reynolds. Como os processos RTM apresentam essa condição ($Re < 1$), a lei de Darcy se tornou a equação de momento mais frequentemente usada para descrever o escoamento da resina no molde (Shojaei *et al.*, 2003a). Segundo Tucker e Dessenberger (1994), a lei de Darcy pode ser aplicada a escoamentos transientes multidimensionais de fluidos Newtonianos em meios porosos anisotrópicos e homogêneos, a partir de certas considerações, podendo ser aplicada a praticamente todos os processos RTM.

A base para os modelos de escoamentos incompressíveis em escala macroscópica é geralmente o uso da lei de Darcy para apenas uma fase, considerando que apenas a resina está presente. Tais modelos são úteis para compreender o comportamento macroscópico do escoamento, bem como prever algumas de suas características mais importantes. Entretanto, existem limitações quando, por exemplo, se leva em conta a presença do ar, que pode ser tratado como uma segunda fase. Essa limitação em particular se torna crítica quando se estuda a formação de vazios, que, conforme mencionado anteriormente, pode influir negativamente na qualidade do material (Chui *et al.*, 1995). Ainda segundo Chui *et al.* (1995), modelos que consideram a presença de duas fases, como mostrado na Figura 2.5 (b), levando em conta a interação entre resina, ar e a fibra, podem ser utilizados para evitar esse problema.

A lei de Darcy, Equação (2.31), pode ser reescrita para incluir múltiplas fases e ser utilizada em modelos de escoamentos multifásicos (Kumar, 2012). Incorporando a permeabilidade relativa pode-se escrever a equação de Darcy para uma determinada fase p como:

$$\vec{v}^p = -\lambda^p \mathbf{K} (\nabla P^p + \rho^p \vec{g} \nabla z) \quad (2.32)$$

onde λ^p pode ser definida como a mobilidade da fase p , dada por:

$$\lambda^p = \frac{k^{rel,p}}{\mu^p} \quad (2.33)$$

Pode-se reescrever a Equação (2.32) como:

$$\vec{v}^p = -\lambda^p \mathbf{K} \nabla \Phi^p \quad (2.34)$$

onde Φ^p é definido como o potencial da fase p , dado por:

$$\Phi^p = P^p + \rho^p \vec{g} z \quad (2.35)$$

Nas Equações (2.31), (2.32) ou (2.34), a velocidade \vec{v} (ou \vec{v}^p) é a chamada velocidade de Darcy (velocidade superficial), medida em escala macroscópica (Faigle, 2009). Supondo que o escoamento ocorresse em todo o volume elementar, em vez de estar restrito aos poros, as partículas se moveriam a uma velocidade \vec{v} . A velocidade real das partículas no interior dos poros, pode ser calculada, segundo Sinsbeck (2011), como:

$$\vec{v}_{real} = \vec{v}/\phi \quad (2.36)$$

onde ϕ é a porosidade do meio.

Apesar de originalmente ter sido deduzida de maneira empírica, a lei de Darcy pode ser derivada diretamente da equação fundamental de Navier-Stokes para escoamentos de fluidos. Segundo Klitz (2006) existem duas abordagens principais para esta finalidade: cálculo pela média e homogenização. Além de Hubbert (1957), que foi escrito em comemoração aos 100 anos da publicação original de Henry Darcy, alguns trabalhos como Neuman (1977) e Klitz (2006) servem como boas fontes de referências sobre este assunto.

2.3 *Computational Fluid Dynamics (CFD)*

Conforme descrito anteriormente, para que o processo RTM seja o mais vantajoso possível, é necessário que se conheça bem a influência de todos os parâmetros envolvidos, principalmente no processo de preenchimento do molde pela resina. Realizar este estudo de forma experimental, na base de tentativa e erro, mostra-se uma tarefa ineficiente e onerosa uma vez que os materiais envolvidos (resina, fibra e, principalmente, o molde) podem envolver altos custos. Estes problemas se tornam ainda mais críticos quando o processo envolve o uso de moldes maiores, mais complexos e a produção de peças com maiores exigências de precisão.

Uma alternativa bastante atraente à pesquisa experimental é a utilização de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) – uma combinação multidisciplinar de física, matemática numérica e de ciências computacionais, empregadas para simular escoamentos fluidos (Blazek, 2005). Antes do século XX, toda pesquisa na área de dinâmica dos fluidos era

baseada unicamente em duas estratégias: a teórica e a experimental. O advento dos computadores e o desenvolvimento de algoritmos numéricos capazes de solucionar modelos de complexos problemas físicos com o auxílio de programas computacionais revolucionaram a forma como se estuda dinâmica dos fluidos atualmente (Anderson, 1995).

2.3.1 CFD e a otimização de processos RTM

A simulação computacional tem se mostrado uma ferramenta eficaz tanto em relação a tempo, quanto a custo para otimização de processos RTM (Shojaei *et al.*, 2003a). Isso pode ser observado inclusive durante o preenchimento do molde, considerado uma das etapas mais complexas e críticas, que tem forte impacto na eficiência do processo e na qualidade final da peça. De acordo com Gou *et al.* (2003) e Long (2006), a simulação permite, em um curto intervalo de tempo e envolvendo baixo custo, realizar um estudo virtual prévio para o projeto do ferramental, seleção de materiais e determinação das condições ideais de processamento, citadas a seguir:

a) Localização das entradas de resina e saídas de ar no molde: devem ser posicionadas visando o preenchimento completo do molde. Geralmente, são definidas as posições das entradas de modo a se obter o mínimo tempo de preenchimento com baixos níveis de pressão. Em seguida, baseando-se no padrão do escoamento, as saídas são posicionadas onde a resina chega por último;

b) Tempo de preenchimento: é o tempo total de duração da etapa de injeção. Se for muito baixo pode implicar na formação de bolhas, uma vez que a resina escoar em alta velocidade. Sendo elevado, pode resultar em alterações nas propriedades da resina, principalmente quando o processo é não-isotérmico. Um tempo de preenchimento longo ainda reduz a produtividade;

c) Hidrodinâmica do escoamento: define o comportamento das fases que escoam na cavidade do molde. É importante para o cálculo da posição da frente do escoamento no decorrer do processo e, conseqüentemente, para a definição dos pontos de injeção e saídas de ar;

d) Pressão e vazão de injeção: é particularmente importante pois afeta diretamente os custos do processo. A pressão de operação é diretamente proporcional às forças que agem na cavidade, que determinam fatores como o material de construção e as dimensões do molde, de modo que não ocorram deformações indesejadas. Além disso, quando se utiliza um molde partido, quanto mais elevadas forem estas forças, mais robusto deve ser o equipamento que mantém unidas as partes do molde.

e) Propriedades termofísicas da resina e da preforma: podem influir no tempo de preenchimento e mesmo no padrão de escoamento, o que pode invalidar todo o plano de posicionamento de pontos de injeção e saídas de ar.

O principal objetivo da simulação é refletir com bom nível de precisão a situação real (Dong, 2007). O êxito na previsão ou simulação do comportamento de um determinado problema físico está relacionado à capacidade de formular modelos matemáticos dos seus fenômenos mais importantes, contemplando leis fundamentais e equações constitutivas que representem as suas características.

2.3.2 Métodos numéricos

Alguns dos problemas físicos são modelados por sistemas de equações diferenciais parciais que não podem ser resolvidos analiticamente (Schäfer, 2006). Problemas envolvendo escoamentos em meios porosos, dependendo da abordagem matemática, recaem neste tipo de modelagem, conforme é exposto com detalhes no Capítulo 4. Segundo Blazek (2005), soluções analíticas são aplicáveis apenas a simplificações dos problemas reais. Entretanto, dependendo do problema físico ou da complexidade do modelo, a introdução de simplificações pode conduzir a resultados imprecisos ou ainda desviar o modelo do problema físico original (Maliska, 2004; Schäfer, 2006).

Os métodos numéricos são uma poderosa alternativa para soluções que exigem cálculos complexos. Antes do advento dos computadores eletrônicos, tudo era feito manualmente. Como o processo exigia a realização de uma grande quantidade de tarefas lentas e tediosas, não era incomum que um pequeno erro comprometesse toda a solução. Desde os anos 50, a crescente melhoria na capacidade de processamento e armazenamento dos computadores

promoveram uma explosão no uso e desenvolvimento de métodos numéricos, possibilitando a obtenção de soluções rápidas para modelos mais fiéis aos problemas físicos estudados, sem a necessidade de se introduzir tantas simplificações (Chapra e Canale, 2009).

Para a utilização do computador como ferramenta de solução, é necessário manipular o modelo matemático original de modo que seja possível resolvê-lo via cálculos computacionais (Mangani, 2008). Em modelos que envolvem equações diferenciais parciais, o conceito fundamental dos métodos numéricos é baseado na aproximação das derivadas parciais por expressões algébricas (Hoffmann e Chiang, 2000). A obtenção destas aproximações é realizada por meio de métodos de discretização das equações e transformação do domínio de estudo contínuo (no espaço e no tempo) em uma representação discreta de pontos, células ou volumes de controle, nos quais as incógnitas são calculadas (Schäfer, 2006). Os métodos de discretização são aplicados tanto no espaço físico como no temporal. Mais detalhes sobre discretização do domínio físico são mostrados adiante, na Seção 2.3.2.2. A discretização temporal é necessária apenas no estudo de problemas transientes, quando o sistema parte de um estado inicial e a solução avança em um número finito de intervalos no tempo.

O processo de discretização transforma as equações diferenciais governantes de variáveis contínuas em um sistema de equações algébricas. O próximo passo é a solução desses sistemas resultantes que envolvem a computação de milhares ou milhões de incógnitas por meio de algoritmos numéricos. Quanto mais precisão for exigida para a solução numérica, mais incógnitas estão envolvidas e mais cálculos são necessários. Esse processamento que deve ser realizado via computador produz uma grande quantidade de valores numéricos que não são fáceis de ser entendidos. Então, a etapa de visualização de resultados é fundamental para que sejam feitas validações, análises e interpretações dos resultados obtidos (Schäfer, 2006).

A Figura 2.16 mostra um esquema que explica a aplicação de técnicas numéricas para solução de problemas de engenharia.

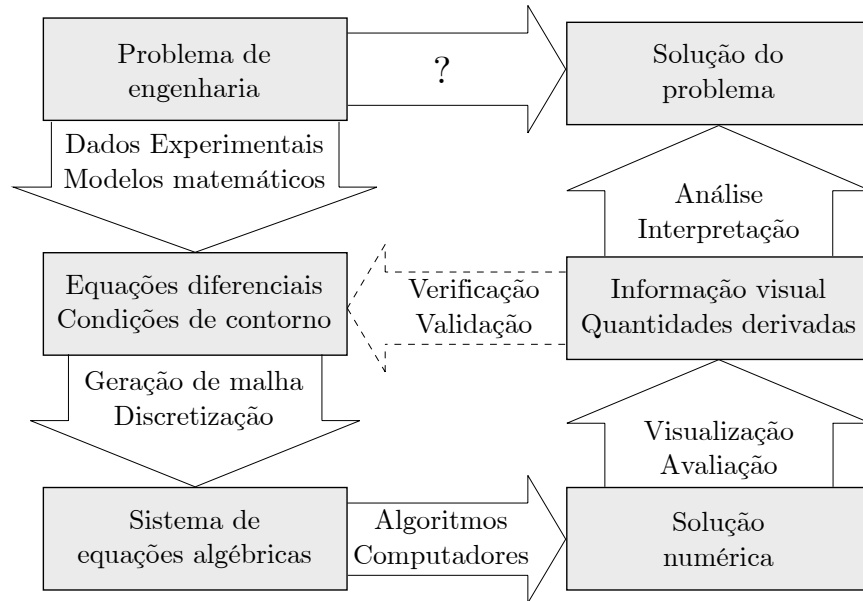


Figura 2.16: *Solução numérica de problemas de engenharia. Fonte: Schäfer (2006).*

2.3.2.1 Discretização das equações

A discretização das equações governantes é uma etapa particularmente importante. Os principais métodos de discretização são o Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Volumes finitos (MVF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF) (Hoffmann e Chiang, 2000). Historicamente, o MDF está entre as primeiras técnicas empregadas na solução de equações diferenciais parciais (Blazek, 2005). As derivadas das equações diferenciais parciais são representadas em pontos do domínio por expressões algébricas de diferenças, obtidas aplicando expansões em séries de Taylor ou polinômios das variáveis de solução em vários pontos vizinhos ao ponto de avaliação (Thompson *et al.*, 1999). Entre os métodos citados, o MDF apresenta maior simplicidade e facilidade na obtenção de aproximações. Entretanto, tem aplicação mais restrita pois requer o uso de malhas estruturadas (Mangani, 2008).

O método dos elementos finitos foi originalmente desenvolvido para análise estrutural, sendo posteriormente utilizado em problemas de escoamentos de fluidos. A sua maior vantagem é poder lidar com geometrias complexas. Entretanto, é necessário que as equações sejam reescritas na forma integral, o que exige uma fundamentação matemática rigorosa, principalmente para problemas elípticos e parabólicos (Blazek, 2005).

Para a obtenção das equações aproximadas usando o MVF é necessário realizar um balanço das propriedades para cada volume elementar (volume de controle) resultante da discretização do domínio físico. Essa abordagem e o fato do método se basear na forma integral das equações governantes para realização dos balanços garantem a conservação das grandezas em nível infinitesimal, o que é essencial para garantir a coerência física da solução numérica de problemas envolvendo escoamentos fluidos (Blazek, 2005; Maliska, 2004). Outras vantagens do MVF são a relativa simplicidade para transformação de coordenadas e a possibilidade de implementação para malhas estruturadas e não-estruturadas (Blazek, 2005).

Segundo Maliska (2004), os três métodos de discretização, quando analisados do ponto de vista matemático, são derivados do mesmo princípio: o método dos resíduos ponderados. Para Blazek (2005), um motivo que pode ter levado à maior popularização do MVF na área de escoamentos de fluidos em relação ao MEF é que podem ser matematicamente equivalentes mas o primeiro exige um esforço numérico notadamente menor. Mangani (2008), por sua vez, menciona a coerência física, a facilidade de compreensão e implementação, como motivos que levam o MVF a ser mais largamente utilizado em problemas de escoamentos quando comparado aos outros.

O método dos elementos finitos baseado em volumes de controle (MEFVC), também conhecido como método dos volumes finitos baseado em elementos, combina os pontos positivos do método dos volumes finitos e do método de elementos finitos. Conforme define Maliska (2004), o método utiliza a base conceitual do método de volumes finitos e emprega o conceito de elementos somente para a representação geométrica do domínio de solução. Segundo Voller (2008), é um método híbrido que combina a intuição física do MVF com a flexibilidade geométrica do MEF. Um trabalho pioneiro utilizando o MEFVC para problemas de convecção-difusão foi o de Baliga e Patankar (1980), também citado em Patankar (1980).

2.3.2.2 Discretização da geometria: a malha numérica

Conforme mencionado na seção anterior, a utilização de métodos numéricos na solução de equações diferenciais recai na discretização do domínio de solução, ou seja, na

sua representação por meio de um número finito de sub-domínios (pontos ou células, dependendo do método de discretização utilizado). Isto pode ser obtido pela definição de uma estrutura de malha apropriada cobrindo todo o domínio do problema, conforme mostrado na Figura 2.17, processo comumente definido na literatura como geração de malha (Blazek, 2005; Owen, 1998; Schäfer, 2006).

Geralmente uma malha é classificada de acordo com o arranjo lógico das células (Schäfer, 2006). Uma malha é dita estruturada quando é constituída por linhas agrupadas em famílias que nunca interceptam linhas da mesma família mas interceptam todas as linhas das outras famílias em uma determinada sequência, de modo que podem ser numeradas (Ferziger e Perić, 2002). Essa organização em famílias de linhas permite a discretização do domínio em células com uma disposição regular (Schäfer, 2006). Malhas não estruturadas, por sua vez, dividem o domínio em regiões com formas variadas, contíguas, que compartilham as fronteiras com as regiões vizinhas (Ferziger e Perić, 2002). A Tabela 2.1 lista sucintamente as vantagens e desvantagens de cada tipo de malha.

A Figura 2.18 mostra uma malha estruturada e uma não-estruturada discretizando o mesmo domínio. Segundo Schäfer (2006), a opção inicial deve ser sempre por malhas estruturadas e, caso não se consiga obter uma malha satisfatória para a geometria do problema em estudo, deve-se partir para uma discretização por malhas não-estruturadas.

As malhas estruturadas mais simples são as ortogonais (cartesiana, cilíndrica ou esférica). Uma malha cartesiana pode ser facilmente obtida a partir de linhas paralelas aos eixos de um sistema cartesiano ortogonal. Além da facilidade na realização dos balanços, o uso desse tipo de malha resulta em sistemas lineares de solução mais simples. No entanto,

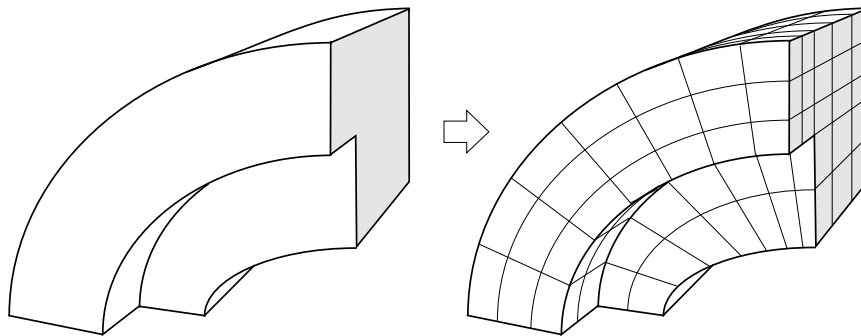


Figura 2.17: Exemplo de discretização. Fonte: Adaptado de Owen (1998).

Tabela 2.1: *Vantagens e desvantagens de malhas estruturadas e não-estruturadas. Fonte: Schäfer (2006).*

Propriedade	Estruturadas	Não-estruturadas
Modelagem de geometrias complexas	–	+
Refinamento de malha local (adaptativo)	–	+
Automatização de geração de malha	–	+
Esforço para geração de malha	+	–
Esforço de programação	+	–
Armazenamento e gerenciamento de dados	+	–
Solução do sistema de equações algébricas	+	–
Paralelização e vetorização de solvers	+	–

+ vantagem, – desvantagem

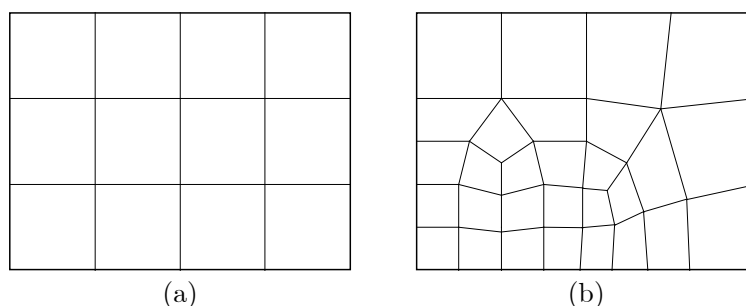


Figura 2.18: *Exemplos de malha (a) estruturada e (b) não-estruturada. Fonte: adaptado de Owen (1998).*

uma importante limitação é a dificuldade para aplicação em problemas com geometrias complexas ou de fronteiras curvas (Blazek, 2005; Maliska, 2004).

A Figura 2.19 (a) evidencia a dificuldade de discretizar uma geometria com fronteiras curvas utilizando uma malha cartesiana. Percebe-se que, neste caso, um tratamento especial deve ser dispensado às células com geometrias distintas. Além disso, caso seja necessário refinar a malha, todo esse tratamento deve ser repensado, uma vez que a quantidade e posição destas células sofrem alterações. Em outras palavras, o código computacional a ser desenvolvido sofre forte dependência do tamanho da malha utilizada e da forma das fronteiras do domínio (Schäfer, 2006).

Outra desvantagem do uso de malhas cartesianas pode ser percebida quando são usadas em posições distintas, paralela ou diagonalmente em relação à direção do fluxo. A Figura 2.20 mostra como duas malhas cartesianas podem ser empregadas para o mesmo problema, podendo gerar resultados divergentes. Este efeito, conhecido como orientação

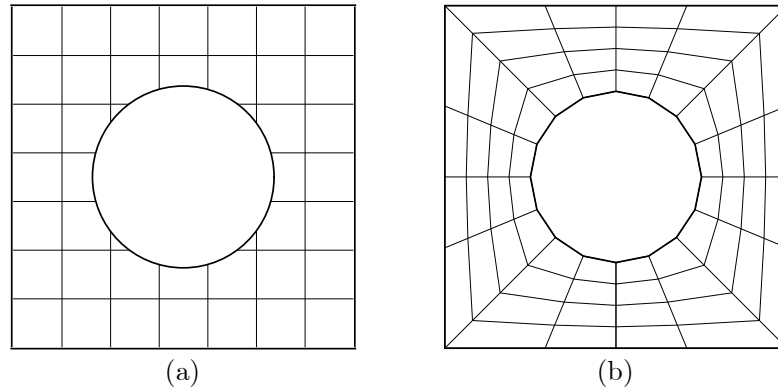


Figura 2.19: Discretização de geometria complexa com malhas estruturadas: (a) cartesiana (b) coincidente com as fronteiras. Fonte: adaptado de Schäfer (2006).

de malha, pode ser visto em outros casos estudados via CFD, incluindo simulação de reservatórios de petróleo, outro problema clássico de escoamento multifásico em meios porosos (Coutinho, 2002). O exemplo mostrado na Figura 2.20 refere-se a uma distribuição *five spot*, um tipo de configuração de poços bastante comum em reservatórios de petróleo, na qual os poços injetores e produtores são posicionados na proporção de quatro produtores para cada um injetor.

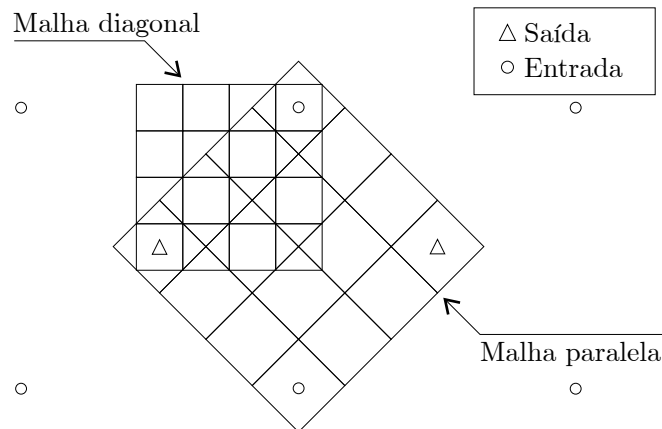


Figura 2.20: Malhas cartesianas em duas aplicações distintas para um problema “five-spot”. Fonte: adaptado de Coutinho (2002).

As malhas não-ortogonais coincidentes com as fronteiras, também denominadas de generalizadas ou curvilíneas generalizadas, são bastante utilizadas para calcular escoamentos em geometrias complexas. As linhas que delimitam as células seguem as fronteiras do domínio, conforme ilustrado pela Figura 2.19 (b).

Segundo Maliska (2004), dentre as razões para o uso de sistemas de coordenadas generalizadas, pode-se citar:

- a) Necessidade de solução de problemas cada vez mais complexos em geometrias com fronteiras irregulares;
- b) Dificuldade de solução destes problemas com sistemas convencionais, principalmente na aplicação das condições de contorno;
- c) Possibilidade de concentração mais intensa de malhas em determinadas regiões do domínio;
- d) Possibilidade de desenvolvimento de metodologias generalizadas para qualquer situação.

O uso de malhas generalizadas exige que as equações diferenciais parciais governantes sejam transformadas para um novo sistema de coordenadas. As equações transformadas tornam-se mais complexas, com mais termos que a sua forma para sistemas ortogonais, dificultando a implementação dos algoritmos computacionais e aumentando o esforço computacional de solução (Ferziger e Perić, 2002). Mais detalhes sobre a transformação das equações são apresentados no Capítulo 4.

Quanto à variação da malha com o tempo, duas abordagens distintas podem ser usadas para simulação da injeção da resina em processos RTM: uso de malhas móveis que acompanham a posição da frente do escoamento e uso de malhas fixas. Malhas móveis exigem mais processamento uma vez que a malha deve ser atualizada, a cada instante de tempo, de acordo com a posição da frente de escoamento. Ainda existe a desvantagem de difícil aplicação para casos com mais de um ponto de injeção, quando ocorre o encontro das frentes de fluxo. Em técnicas de malhas fixas, não há a necessidade de geração da malha no decorrer do tempo e a simulação para geometrias complexas pode ser realizada mais rapidamente (Lim e Lee, 2000). Devido aos fatores citados, as malhas fixas são mais usadas para simulação do processo de injeção da resina (Shojaei *et al.*, 2003b).

2.3.3 Ambiente de simulação

De acordo com Vaziri (1991), um ambiente completo de simulação em CFD e visualização de resultados, conforme ilustrado pela Figura 2.21, pode ser dividido em três fases distintas: pré-processamento, processamento (simulação) e pós-processamento (visualização).

O software a ser utilizado em cada uma dessas fases tem características bastante distintas. Conforme é detalhado a seguir, uma característica fundamental de programas de pré e pós-processamento é a interface com o usuário, enquanto que o simulador deve ter a capacidade de resolver rapidamente uma grande quantidade de cálculos matemáticos. Muitas vezes não se consegue essas características em uma só linguagem de programação. Dubois (1999) cita, como uma entre dez boas práticas na programação de aplicações científicas, a utilização de múltiplas linguagens, explorando o que existe de melhor entre elas. A Seção 2.3.4.2 apresenta as características das linguagens Python e C++.

• Pré-processamento

A fase de pré-processamento envolve todas as tarefas que devem ser realizadas antes da solução numérica. Softwares com esta finalidade devem permitir realizar atividades como: definição da geometria e geração da malha, aplicação das condições de contorno, especificação das condições iniciais, e definição das propriedades dos fluidos envolvidos e dos demais parâmetros da simulação (Xia e Sun, 2002).

Como o usuário deve participar intensivamente definindo todos os parâmetros necessários, é de fundamental importância que a ferramenta seja apresentada na forma de uma interface gráfica para o usuário (*GUI*). GUIs simplificam o uso de computadores apresentando a informação de modo que permita rápida assimilação e manipulação, provendo um método intuitivo de fornecer entrada para o computador. Isto é particularmente importante para aplicações científicas, onde o principal objetivo do usuário está na compreensão da teoria por trás do programa (Toby, 2001).

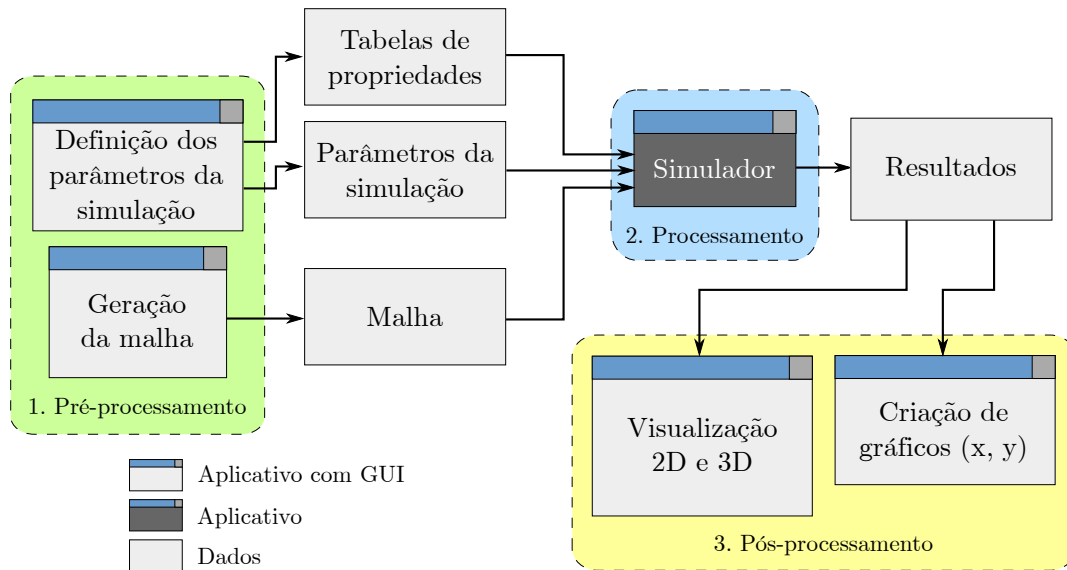


Figura 2.21: Exemplo de um ambiente completo de simulação CFD e visualização.

• Processamento / simulação

É a etapa que exige maior esforço computacional quando ocorre toda a computação numérica do problema (Xia e Sun, 2002). A presença de erros no código-fonte induz a geração de resultados insatisfatórios ou até mesmo a não convergência da solução. Algoritmos ineficientes podem aumentar mais ainda o tempo de processamento, tornando mais lenta a obtenção da solução e exigindo mais recursos de hardware.

• Pós-processamento / visualização

A visualização é a melhor e mais eficiente forma de interpretar a grande quantidade de dados calculados durante a simulação (Ferziger e Perić, 2002). Simulações computacionais baseadas na utilização de métodos discretos, como o método dos volumes finitos, podem gerar grandes quantidades de dados numéricos de difícil interpretação. Para problemas de escoamentos, estes dados representam as grandezas calculadas em pontos espaciais discretos, como: campos de saturação, pressão, velocidade, entre outros. Em casos transientes, cuja solução ocorre para cada instante de tempo do fenômeno físico, a quantidade de dados gerados é ainda maior pois deve contemplar a variação no tempo das grandezas em questão.

A visualização de dados numéricos tem como objetivo representar estes dados na

forma de imagens de fácil entendimento, geradas por técnicas de computação gráfica. Os tipos mais comuns de representação são pelo uso de contornos, iso-superfícies, vetores, mapeamento em cores, etc. (Broboana *et al.*, 2008; Hultquist, 1995; Nakayama e Boucher, 1998; Stegmaier, 2006).

2.3.4 Conceitos de programação de computadores

Esta seção não irá se aprofundar em fundamentos relacionados a desenvolvimento de software, uma vasta e complexa área de conhecimento, onde há uma extensa literatura disponível. Apenas são introduzidos alguns conceitos que foram úteis para a concepção dos programas do presente trabalho e podem contribuir para o desenvolvimento de outras aplicações científicas.

Os computadores podem executar tarefas complexas executando instruções simples. Cabe ao homem especificar essas instruções escrevendo programas por meio de uma determinada linguagem de programação (Barton e Nackman, 1994). Um programa de computador é constituído por um número finito de linhas com instruções. Estas instruções normalmente são escritas em uma linguagem legível ao programador. Entretanto, para que possa ser executado pelo computador, o programa deve ser “traduzido” em linguagem de máquina, seja por compilação ou interpretação do código fonte. A Figura 2.22 mostra a diferença na execução de programas compilados e/ou interpretados.

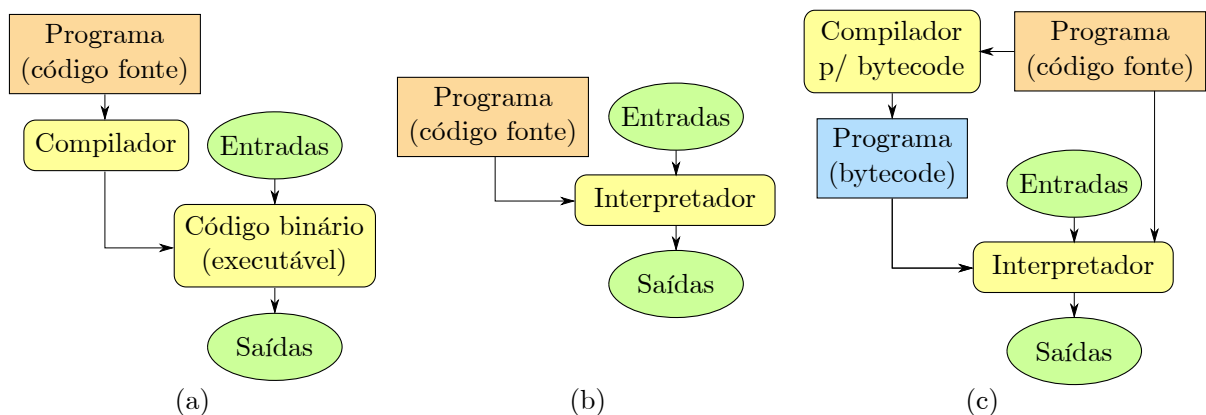


Figura 2.22: Diferenças na execução de programas em linguagem (a) compilada (Fortran, C e C++), (b) interpretada (Matlab e Mathematica) e (c) compilada e interpretada (Java e Python). Fonte: adaptado de Zelle (2004).

Durante a compilação, conforme ilustra a Figura 2.22 (a) um programa (compilador) converte um código-fonte escrito originalmente em uma determinada linguagem de programação em um arquivo binário, que o computador é capaz de “compreender” e executar diretamente. Quando se usa uma linguagem interpretada, um programa (interpretador) lê o código-fonte e o interpreta, instrução por instrução, durante a execução, como exibido na Figura 2.22 (b).

Programas compilados tendem a ser bem mais rápidos enquanto que as linguagens interpretadas oferecem mais flexibilidade e menos esforço para o programador (Zelle, 2004). Fortran, C++ e C são exemplos de linguagens compiladas. Linguagens como Matlab ou Mathematica são interpretadas. Linguagens como Python e Java podem ser consideradas compilada e interpretada, uma vez que o código-fonte pode ser transformado em uma linguagem intermediária (bytecode), que é interpretada pela máquina virtual da linguagem quando o programa está sendo executado, Figura 2.22 (c).

2.3.4.1 Orientação a objetos

Comparada com a forma de programação tradicional, a programação orientada a objetos (POO) oferece um novo e poderoso método de lidar com a complexidade do código. Em vez de ser organizado como uma sequência de passos a serem cumpridos, o programa passa a ser constituído por unidades que possuem propriedades e realizam ações. Essa mudança de paradigma resulta em programas mais claros, confiáveis, reutilizáveis e fáceis de receber modificações. Essas vantagens se tornam mais evidentes em códigos mais extensos (Lafore, 2002). Conforme escreve Barton e Nackman (1994), as seguintes ideias fundamentais caracterizam a programação “OO”:

Objetos: são entidades que possuem dados e funções. Os dados representam o estado e as funções (subrotinas) representam o comportamento do objeto, acessando e modificando seus dados;

Encapsulamento: como os dados e as funções são armazenados dentro dos objetos, diz-se que estão encapsulados. Esse mecanismo de segurança facilita a manutenção e a ampliação do código;

Classes: os objetos são criados a partir de classes, que funcionam como especificações, definindo os seus dados e funções. Objetos de uma mesma classe possuem o mesmo comportamento, mas podem apresentar estados diferentes. Os objetos são metáforas naturais para objetos físicos e entidades abstratas. São tipos criados pelo programador para modelar algo do mundo real. Assim, expressar os conceitos do programa em termos de objetos e classes reduz a distância entre o conceito e o programa;

Herança: hierarquias de classes organizam as classes para reutilização, de modo que algumas classes possam compartilhar características de outras. A esse mecanismo dá-se o nome de herança, que facilita a reusabilidade do código permitindo, por exemplo, adicionar novas propriedades a uma classe sem a necessidade de modificá-la;

Polimorfismo: permite que diferentes tipos de objetos com o mesmo comportamento possam ser usados quando apenas o comportamento comum é necessário. O polimorfismo é bastante útil quando usado com herança de classes.

Mais detalhes sobre estes conceitos podem ser encontrados em livros específicos, como Lafore (2002) ou Barton e Nackman (1994).

A seguir são descritas as linguagens de programação utilizadas no presente trabalho, bem como as principais características que levaram à sua escolha.

2.3.4.2 Linguagens

C++

Segundo Jasak *et al.* (2004), naquele tempo, C++ já era a principal linguagem de programação orientada a objetos. Tendo sido escrita para aprimorar a linguagem C e por ser baseada nela, possui eficiência necessária para computações científicas. Stroustrup (1997), criador da linguagem, afirma que o C++ mantém a habilidade do C em lidar eficientemente com os elementos fundamentais do hardware (bits, bytes, endereços, etc) e por isso apresenta eficiência a ela comparada. Segundo Maliska (2004), embora o Fortran ainda seja largamente utilizado para programação científica, a linguagem C++ vem ganhando bastante espaço e tende a ser cada vez mais empregada para esta finalidade.

Uma importante característica do C++ para desenvolvimento de aplicações científicas é a capacidade da linguagem de localizar diversos tipos de erros e inconsistências no código durante a compilação (Barton e Nackman, 1994). Essa vantagem se evidencia quando o código tende a ficar mais extenso, com uma grande quantidade de classes trocando informações entre si.

Weller *et al.* (1998) citam a possibilidade de se implementar sobrecarga de operadores em C++, que se mostra essencial para construir estruturas de dados com interfaces mais próximas à notação de expressões matemáticas. Os autores também se referem a trabalhos recentes que apontam não haver diferenças de performances significativas entre o Fortran e C ou C++.

Python

Os programas direcionados às fases de pré e pós-processamento não envolvem tantos cálculos matemáticos e possuem exigências mais diversas, como apresentação visual por meio de GUIs, gerenciamento de arquivos e diretórios, conversão de dados entre formatos distintos, administração de resultados numéricos, extração de dados numéricos de arquivos de texto, uso de bibliotecas gráficas e de visualização 2D e 3D, entre outras. Tais tarefas são mais fáceis de realizar em uma linguagem como Python do que em Fortran ou C++ (Langtangen, 2008).

A linguagem Python apresenta características que a tornam uma excelente escolha para aplicações com estes tipos de requisitos. Além de ser gratuita, de livre distribuição e disponível para vários sistemas operacionais, Python oferece uma sintaxe simples, clara e concisa, tornando-a bastante fácil de aprender ao mesmo tempo em que possui características que a tornam bastante poderosa como: orientação a objetos, tipagem dinâmica, possibilidade de uso de exceções e estruturas de dados de alto-nível.

A produtividade para o desenvolvedor que utiliza Python é uma das maiores vantagens da linguagem, principalmente quando comparada com C, C++ e Java. De acordo com Lutz (2008), um código escrito em Python é normalmente de um terço a um quinto do tamanho do seu equivalente em C++ ou Java. Sem a necessidade da etapa de compilação,

Python roda imediatamente, deixando mais rápidas as etapas de programação, testes e localização de erros.

Para aplicações científicas, é particularmente interessante por ser bastante modular e dispor de uma grande variedade de módulos úteis para diversas tarefas, incluindo computação numérica, GUIs, processamento de arquivos XML, aplicações gráficas avaliação de expressões numéricas, entre outras. Caso seja necessário, Python ainda permite fácil integração com códigos compilados a partir de outras linguagens como Fortran, C ou C++ (Langtangen, 2008). Devido as suas características, a linguagem Python é largamente utilizada para as mais diversas finalidades: o Google faz uso extensivo do Python no seu sistema de buscas, a Industrial Light & Magic e Pixar usam para produção de animações para o cinema e, por fim, para programação científica, é utilizada pela NASA, Laboratório de Los Alamos USA, entre outros (Lutz, 2008).

XML - eXtensible Markup Language

XML é uma linguagem de marcação que permite ao usuário definir as marcações de acordo com suas necessidades. Diferente das linguagens de programação citadas anteriormente (C++ e Python), uma linguagem de marcação consiste em organizar dados de modo textual para armazenamento e/ou processamento (Almeida, 2002).

Documentos escritos em XML possuem duas características importantes: são legíveis para seres humanos e podem ser facilmente processados por aplicações computacionais. Por este motivo tem sido cada vez mais usada para o intercâmbio de dados entre aplicações. Acredita-se que, no futuro, o XML se tornará a linguagem universal para representação de dados (Lima e Carvalho, 2005). Os dados de um arquivo XML são organizados na forma de elementos, definidos por meio de marcações (ou *tags*). As tags são sempre escritas entre os caracteres “<” e “>”. Uma barra “/” indica que a tag finaliza o elemento. É possível associar atributos aos elementos para especificar suas propriedades ou características (Almeida, 2002).

Os aplicativos responsáveis pelo processamento de arquivos XML são chamados de *parsers*. Estes programas funcionam como uma interface, transportando os dados entre o

arquivo XML e a aplicação que vai utilizá-los (Jacobs, 2006).

Para facilitar o entendimento, a Figura 2.23 mostra duas maneiras de se armazenar alguns dados referentes a um sistema bifásico em XML. Nesse exemplo, os elementos “fase1” e “fase2” são ditos subelementos do elemento “sistema”. Os trechos entre aspas são os atributos associados aos elementos. O exemplo da Figura 2.23 demonstra que um documento escrito em XML é de fácil compreensão. Além disso, nota-se que é possível definir livremente tanto elementos como atributos, além de criar elementos dentro de elementos em vários níveis (subelementos). Isso torna a formatação de arquivos XML bastante versátil, dando ao programador liberdade para escolher a melhor maneira de organizar os dados de suas aplicações.

```
<istema>
  <fase1>
    <nome> ar <\nome>
    <densidade> 1.0 </densidade>
    <viscosidade> 1.81e-5 </viscosidade>
  </fase1>
  <fase2>
    <nome> resina <\nome>
    <densidade> 913.9 </densidade>
    <viscosidade> 0.0345 </viscosidade>
  </fase2>
</istema>

...

<istema>
  <fase1 nome="Ar" densidade = "1.0" viscosidade="1.81e-5"/>
  <fase2 nome="resin" densidade = "913.9" viscosidade = "0.0345"/>
</istema>
```

Figura 2.23: Exemplos de representação de um sistema bifásico em XML.

2.4 Breve estado da arte sobre CFD em RTM

Como muitas peças feitas com materiais compósitos possuem espessura constante, normalmente menor que as demais dimensões, os estudos nessa área são comumente realizados considerando o escoamento em apenas duas dimensões. Simulações em 2D são favoráveis pois exigem menos esforço computacional, tanto durante o pré-processamento, como no processamento e pós-processamento, embora uma abordagem 3D seja mais realista fisicamente. Quando se fala de soluções numéricas, os métodos podem ser utilizados

de maneira isolada ou por meio de abordagens mistas. Cada fenômeno físico que ocorre durante um determinado processo pode ser resolvido separadamente, explorando o potencial da técnica numérica utilizada.

Mohan *et al.* (1999) usaram uma abordagem implícita, independente do passo de tempo, puramente baseada no Método dos Elementos Finitos (MEF), para realizar simulações em RTM em duas e três dimensões calculando a posição da frente de resina com o auxílio do fator de preenchimento da resina. A solução mostrou-se mais rápida do que técnicas explícitas tradicionais, inclusive permitindo uso de passos de tempo variando de acordo com os diferentes estágios da etapa de injeção. Phelan (1997) propôs uma técnica, a qual chamaram de *Flow Analysis Network* (FAN), para rastrear a posição da frente usando simulações via MEF, usando vários tipos de elementos (1D, 2D, 3D). Em seus resultados, o algoritmo FAN apresentou boa conservação de massa, mesmo quando utilizados elementos de tipos distintos. Todavia alguns resultados não se comportaram como esperado. Nas simulações bidimensionais com vazão de injeção constante, os níveis de pressão foram mais altos. Nos casos com pressão de injeção constante, o tempo de preenchimento simulado mostrou-se maior. Ainda usando o MEF, mas considerando o escoamento como bifásico (ar-resina), Deb e Reddy (1998) realizaram estudos em geometrias tridimensionais, considerando a presença da gravidade, e validaram seus resultados ora com modelos analíticos, ora com outro resultado da literatura.

Com o intuito de reduzir o esforço computacional em simulações não-isotérmicas tridimensionais de preenchimento de resina, Trochu *et al.* (2006) realizaram estudos usando duas abordagens: a primeira resolvendo o escoamento e o transporte de calor em três dimensões usando elementos finitos e outra simplificada, em que escoamento é resolvido via MEF como um problema bidimensional e o transporte de calor é calculado como fluxo unidimensional na direção da espessura da peça via método das diferenças finitas. Segundo o autor, as simulações realizadas geraram resultados bastante precisos. Em sua pesquisa, Lefevre *et al.* (2009) confrontaram estudos experimentais com simulações unidimensionais usando o método das diferenças finitas para resolver a equação de momento e o MEF na solução de um modelo de filtração. Os resultados demonstraram que o modelo permite otimização de problemas envolvendo resinas particuladas.

Joshi *et al.* (2000) investigaram inconsistências na conservação da massa do MEFVC, inclusive quando a formulação de Galerkin é usada com elementos finitos isoparamétricos para obter o campo de pressão, e propuseram um modelo, denominado “modelo de redefinição de escoamento”, baseado na incompressibilidade do material para contornar o problema. Os resultados com o modelo proposto foram validados com soluções analíticas.

Shojaei *et al.* (2003b) estudaram o preenchimento isotérmico em geometrias complexas tridimensionais usando o MEFVC confrontando dois tipos de algoritmos: os quase estacionários, mais comumente utilizados, e um outro baseado na formulação da saturação parcial nodal. A validação foi feita usando soluções analíticas em geometrias simples e observações experimentais, sendo obtida boa concordância entre os resultados. O algoritmo baseado na saturação parcial nodal exigiu menos tempo e foi mais preciso na avaliação da frente de avanço. Lee *et al.* (2009) simularam processos RTM em geometrias tridimensionais com pré-formas em várias camadas usando o MEFVC e um modelo isotérmico. As formas e as posições das frentes de escoamento calculadas numericamente mostraram-se bastante precisas em relação aos dados experimentais.

Dentro do MEFVC, diversas abordagens de utilização de malha são possíveis. Lim e Lee (2000) simularam o preenchimento de resina incluindo os efeitos da temperatura e da cura com malhas regulares e estruturadas. Soluções numéricas para geometrias simples foram validadas com modelos analíticos. Em geometrias tridimensionais complexas, os resultados foram comparados com posições da frente avaliadas experimentalmente via sensores de fibra ótica, mostrando-se bastante satisfatórios.

Kaipeng *et al.* (2005) testaram o uso de malhas tridimensionais com elementos em forma de quadriláteros isoparamétricos bilineares e o MEFVC visando obter menores tempos de processamento. Seus resultados foram comparados com dados experimentais da literatura e foi verificado um menor tempo computacional para a mesma precisão quando foram utilizados os elementos quadriláteros isoparamétricos bilineares em comparação com elementos triangulares. Shi e Dong (2011) usaram uma formulação numérica para o escoamento da resina baseada no conceito de regime quase-estacionário para a etapa de preenchimento e malhas não estruturadas tetraédricas tridimensionais. Segundo os autores, os casos estudados demonstraram que as malhas foram capazes de se adequar a

geometrias e escoamentos mais complexos.

O alto esforço computacional requerido pelo MEFVC, principalmente quando são consideradas geometrias tridimensionais, motivam pesquisas no sentido de encontrar alternativas que exijam menor esforço do hardware. Chen *et al.* (2003) apresentaram um modelo “2.5D” não isotérmico usando o MEFVC, onde escoamento é calculado no plano e a transferência de calor apenas na espessura da peça. Os autores concluíram que o uso do modelo 2.5D gera resultados distintos de um modelo 2D convencional. Shen *et al.* (2005) tentaram garantir a utilização de maiores passos de tempo utilizando o MEFVC aliado a um algoritmo baseado em integração implícita no tempo. Em sua modelagem as equações governantes envolvendo o campo de pressão e o fator de preenchimento, que rastreia a frente, são calculados iterativamente. Os resultados apontaram que o método é bastante eficiente.

Buscando entender razões que levam à introdução de erros na utilização do MEFVC Simacek e Advani (2004) propuseram um abordagem para calcular com maior precisão o campo de pressão nos elementos da malha localizados nas proximidades dos pontos injetores. De acordo com os resultados, os aprimoramentos apontados como consequência foram: aumento da precisão, mesmo com malhas grosseiras; melhor refinamento de malha; modelagem inteligente dos pontos injetores.

Nessa mesma linha, Dong (2007) realizou estudos visando investigar fontes de erros na malha em pontos próximos às entradas de resina e saídas de ar. Para isso, foi proposto um método que incorpora o efeito do tamanho da porta, o *effective gate method* (EGM) que, segundo o autor, se mostrou eficiente em alguns casos de estudo.

Dai *et al.* (2004) apontaram como um dos principais motivos para estes problemas, divergências no cálculo dos gradientes de pressão e propuseram uma técnica para prever e rastrear o movimento da frente de fluxo, denominada *Unsaturated Flow Layer* (UFL). Os resultados numéricos apresentaram problemas tanto com a nova técnica de rastreamento como no método tradicional. Visando minimizar esses erros, foi proposta uma nova abordagem, *Weighted Average Flux* (WAF), uma fórmula analítica baseada no uso de fatores ponderados. Apesar de ainda não fornecer resultados totalmente precisos com os modelos

analíticos, a WAF reduziu o tempo computacional.

Ainda utilizando o MEFVC, Gou *et al.* (2003) combinaram simulação numérica e planejamento experimental com o intuito de otimizar processos RTM em peças cilíndricas, analisando a pressão máxima de injeção e o tempo de preenchimento do molde como parâmetros de performance do processo. Os resultados numéricos mostraram-se bastante próximos aos experimentais.

Grande parte dos trabalhos de simulação de injeção em processos RTM que utilizam o MEFVC consideram o problema de preenchimento do molde transiente como uma série de problemas quase estacionários, como visto em Shi e Dong (2011). O MEF é usado para resolver o campo de pressões que é utilizado para computar as taxas de fluxo e, por sua vez, o avanço da frente do escoamento que vai preenchendo os volumes de controle vazios na borda frontal do escoamento (Dai *et al.*, 2004). Para garantir a estabilidade da solução em casos assim, os passos de tempo são bastante restritos pela condição de Courant, que relaciona a malha ao passo de tempo utilizado.

De acordo com o exposto na Seção 2.3.2, o MVF garante a conservação das grandezas, sendo bastante vantajoso para a solução de problemas de dinâmica dos fluidos. Chang e Yang (2001) usaram volumes finitos para discretizar as equações de Navier-Stokes e simular implicitamente o processo isotérmico de preenchimento em moldes com geometrias complexas com auxílio de um método algébrico para rastreamento da frente de avanço. As simulações produziram resultados precisos tanto em cavidades estreitas planas quanto naquelas com espessuras maiores, com a vantagem do menor exigência de memória e processador. Já Yang *et al.* (2006) combinaram o MVF com o método volume de fluido (VOF), para localizar a posição da frente de resina, modelando o comportamento dos fluidos dentro dos feixes de fibras via equação de Brinkman e fora delas via equação de Stokes.

Há trabalhos na literatura que relatam experiências com outras técnicas numéricas de modelagem para prever processos de preenchimento em RTM. Song *et al.* (1997), Chui *et al.* (1995) e Chui *et al.* (1997) usaram um método numérico conhecido como *Front Tracking Method* (FTM) e um modelo de duas fases e dois componentes, incluindo um

modelo de solubilidade do ar e permeabilidades relativas baseado no modelo *Black-oil*, bastante utilizado para modelagem de reservatórios de petróleo de óleos pesados. Este tipo de método se mostra útil na localização da posição exata da frente de fluxo, cujo comportamento muitas vezes não pode ser capturado por métodos discretos convencionais (Allen III, 1985). Além disso, permite o estudo da formação e migração de vazios que podem comprometer a qualidade do produto final. Apesar dos resultados preliminares terem apontado boa concordância com resultados experimentais, os autores sugerem futuros estudos para validar e melhorar o modelo.

No trabalho de Hattabi e Echaabi (2008) foram realizadas simulações de escoamentos isotérmicos em processos de LCM usando discretização em diferenças finitas e um sistema de malha curvilínea transiente, adaptada à forma da zona saturada. A metodologia numérica, conforme escrevem os autores, demonstrou eficácia na geração de resultados bem próximos a outros analíticos, numéricos e experimentais disponíveis na literatura. Yoo e Lee (1996) usaram o método de elementos de fronteira, ou *boundary element method* (BEM) aliado a um método de perturbação para simular o escoamento da resina. Segundo os autores, os resultados, apesar de bastante precisos, foram obtidos bem mais rapidamente do que seriam caso se utilizasse o MEF ou MDF. Ainda usando o BEM, Schmidt *et al.* (1999) realizaram estudos de escoamentos Newtonianos em meios anisotrópicos homogêneos usando um algoritmo simples para capturar a frente de avanço. O modelo foi validado com soluções analíticas de um caso com injeção central e soluções numéricas obtidas via MEF em um caso com injeção frontal. Já a comparação dos resultados com experimentos apresentou disparidades.

Outro trabalho que utilizou a mesma técnica (BEM) para estimar a velocidade da resina na frente de fluxo em conjunto com o *Level Set Method* (LSM) para rastrear a frente foi o de Soukane e Trochu (2006). O método foi testado em problemas 2D com e sem obstáculos ao escoamento, predizendo a ocorrência de locais com aprisionamento de ar. Gantois *et al.* (2010) também usaram o BEM aliado ou LSM para captura da posição da frente em moldes com formas complexas e aplicaram a casos de meios isotrópicos e anisotrópicos. Os resultados apresentaram boa concordância quando comparados com a solução analítica, com simulações numéricas obtidas via FEM / VOF e com dados experimentais.

Uma grande variedade de aplicações práticas recai em escoamentos simultâneos de fluidos imiscíveis em meios porosos. Allen III (1985) oferece uma visão geral dos tipos de modelos usados e destacando a aplicação de algumas técnicas. Mais especificamente, o trabalho de Shojaei *et al.* (2003a) apresenta uma revisão bastante completa sobre as abordagens para se trabalhar com modelagem e simulação de RTM, assim como Chui *et al.* (1997). Ataie-Ashtiani e Raeesi-Ardekani (2010) compararam formas de se obter aproximações numéricas para as equações diferenciais parciais governantes de escoamentos multifásicos.

No Brasil, alguns trabalhos relatam o uso de softwares comerciais em simulações de RTM. Oliveira *et al.* (2011a), compararam o uso dos métodos VOF e CVFEM, respectivamente utilizando os softwares FLUENT e PAM-RTM, para simular a infiltração de resina na fabricação de compósitos. Os resultados mostraram-se concordantes entre si e com dados experimentais. Também usando o FLUENT, Porto *et al.* (2012) e Isoldi *et al.* (2012) simularam casos de Light Resin Transfer Molding (LRTM), uma variação do processo RTM que difere deste na forma da injeção, que ocorre em canais vazios margeando toda a cavidade do molde. Em problemas de escoamentos retilíneos, Oliveira *et al.* (2011b) simularam a infiltração de reforços de fibra de polipropileno, sisal e híbridos, enquanto que Oliveira *et al.* (2013) simularam o escoamento com resina pura e carregada com 40% de $CaCO_3$ em moldes preenchidos com fibra de vidro. Em ambos os trabalhos foi utilizado o PAM-RTM e os resultados mostraram boa concordância com resultados experimentais e analíticos. Machado *et al.* (2009) usou o software *Composite RTM Process 2* para simular a infiltração via fluxos retilíneo e radial de resina poliéster (com e sem carga de $CaCO_3$) em reforços de fibra de vidro. Os resultados obtidos, segundo os autores, estavam de acordo com dados experimentais e modelos analíticos.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM

O presente capítulo inicia apresentando o balanço de massa em meio poroso e a obtenção da equação de conservação da massa para escoamentos monofásicos e multifásicos. Em seguida, o foco é a discretização, por meio do método dos volumes finitos, das equações escritas na formulação em frações mássicas que compõem o modelo matemático bifásico (ar-resina). Na mesma seção é descrita a solução via metodologia totalmente implícita das equações discretizadas e o método de Newton utilizado para solução do sistema de equações não-lineares resultante. Posteriormente, o capítulo traz diversos detalhes da solução numérica como o sistema de coordenadas generalizadas, esquema UDS, derivação das funções residuais, cálculo numérico das derivadas, esquema de passo de tempo variável e condições de contorno.

3.1 Equação de conservação da massa

3.1.1 Escoamento monofásico

Segundo procedimentos que podem ser encontrados em livros como Peaceman (1977) ou Chen *et al.* (2006), considere um volume infinitesimal com dimensões Δx , Δy e Δz representado pelo cubo mostrado na Figura 3.1.

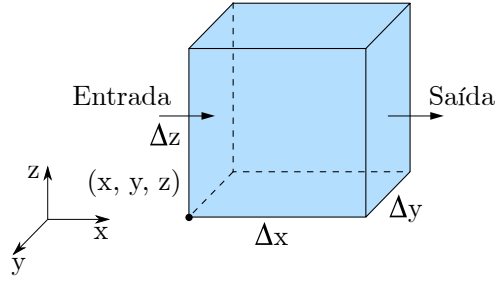


Figura 3.1: *Volume infinitesimal. Fonte: adaptado de Chen et al. (2006).*

O fluxo mássico que entra pela face x é:

$$(\rho v_x)_x \Delta y \Delta z \quad (3.1)$$

Na face $x + \Delta x$ o fluxo mássico que sai do volume é dado por:

$$(\rho v_x)_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \quad (3.2)$$

Os fluxos mássicos que entram e saem nas direções y e z podem ser calculados de modo análogo, respectivamente, por:

$$(\rho v_y)_y \Delta x \Delta z \quad (3.3)$$

$$(\rho v_z)_z \Delta x \Delta y \quad (3.4)$$

e

$$(\rho v_y)_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z \quad (3.5)$$

$$(\rho v_z)_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y \quad (3.6)$$

Sendo ϕ a porosidade do meio e o volume do cubo dado por $\Delta x \Delta y \Delta z$, a massa contida nele é $\phi \rho \Delta x \Delta y \Delta z$. A taxa de acumulação de massa dentro do volume elementar pode ser calculada como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (3.7)$$

Definindo-se um termo adicional, m , como sendo uma taxa de adição ou remoção de massa por unidade de volume do meio poroso (fluxo mássico), a taxa de fluido injetada (ou retirada) no volume será dada por:

$$-m\Delta x\Delta y\Delta z \quad (3.8)$$

O valor de m deve ser negativo caso a massa entre no volume e positivo, caso contrário. A conservação da massa no volume elementar da Figura 3.1, é observada quando se tem:

$$\left[\begin{array}{c} \text{fluxo que} \\ \text{entra} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{fluxo que} \\ \text{sai} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{fluxo injetado} \\ \text{ou retirado} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{taxa de} \\ \text{acumulação} \end{array} \right] \quad (3.9)$$

Representando este balanço com os valores correspondentes definidos, tem-se:

$$\begin{aligned} & [(\rho v_x)_x - (\rho v_x)_{x+\Delta x}] \Delta y \Delta z + \\ & [(\rho v_y)_y - (\rho v_y)_{y+\Delta y}] \Delta x \Delta z + \\ & [(\rho v_z)_z - (\rho v_z)_{z+\Delta z}] \Delta x \Delta y - \\ & m \Delta x \Delta y \Delta z = \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dividindo toda a equação por $\Delta x \Delta y \Delta z$ e reorganizando alguns termos, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) = & - \frac{[(\rho v_x)_{x+\Delta x} - (\rho v_x)_x]}{\Delta x} - \frac{[(\rho v_y)_{y+\Delta y} - (\rho v_y)_y]}{\Delta y} \\ & - \frac{[(\rho v_z)_{z+\Delta z} - (\rho v_z)_z]}{\Delta z} - m \end{aligned} \quad (3.11)$$

Lembrando que o cálculo da derivada de uma função pode ser realizado pelo conceito de limite

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (3.12)$$

e tomando os limites para $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$ na Equação (3.11), obtém-se:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y) - \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) - m = \frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) \quad (3.13)$$

Reorganizando alguns termos, pode-se reescrever esta equação de forma reduzida como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) = -\nabla \cdot (\rho\vec{v}) - m \quad (3.14)$$

onde ∇ , em coordenadas cartesianas é o operador nabla, de tal forma que:

$$\nabla \cdot (\rho\vec{v}) = \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) \quad (3.15)$$

3.1.2 Escoamento multifásico imiscível

3.1.2.1 Formulação em saturações

Utilizando os conceitos específicos de escoamentos multifásicos introduzidos na Seção 2.2.2.3 como permeabilidade relativa, saturação e fração mássica, é possível obter as equações de conservação para cada fase do sistema. Para isso, basta seguir o mesmo procedimento descrito na seção anterior (caso monofásico), com exceção do termo acumulativo que passa a incluir a saturação da fase.

Considerando que as fases presentes no sistema são imiscíveis e preenchem completamente o espaço poroso, em conformidade com a Equação (2.15), a massa de cada fase presente no volume elementar da Figura 3.1 passa a ser calculada por $\phi\rho^p S^p \Delta x \Delta y \Delta z$. O sobrescrito p indica que a grandeza refere-se a qualquer fase do sistema. O termo acumulativo é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho^p S^p) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (3.16)$$

onde ϕ é a porosidade do meio, ρ^p e S^p são, respectivamente, a densidade e a saturação da fase p .

Assim, pode-se reescrever a Equação (3.14) para cada fase p de um sistema multifásico como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho^p S^p) = -\nabla \cdot (\rho^p \vec{v}^p) - m^p \quad (3.17)$$

onde \vec{v}^p é a velocidade da fase p .

3.1.2.2 Formulação em frações mássicas

A Equação (3.17) representa na verdade uma equação para cada fase do sistema. Logo, para np fases, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho^{p_1} S^{p_1}) &= -\nabla \cdot (\rho^{p_1} \vec{v}^{p_1}) - m^{p_1} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho^{p_2} S^{p_2}) &= -\nabla \cdot (\rho^{p_2} \vec{v}^{p_2}) - m^{p_2} \\ &\vdots \\ \frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho^{p_{np}} S^{p_{np}}) &= -\nabla \cdot (\rho^{p_{np}} \vec{v}^{p_{np}}) - m^{p_{np}} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Somando-se estas equações obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho^m) = -\nabla \cdot \left(\sum_{np} \rho^p \vec{v}^p \right) - \sum_{np} m^p \quad (3.19)$$

onde ρ^m é a densidade média da mistura (ar-resina) que pode ser calculada por:

$$\rho^m = \frac{\text{massa total da mistura}}{\text{volume total da mistura}} = \sum_{np} \frac{M^p}{V} = \sum_{np} \rho^p S^p \quad (3.20)$$

onde np é o número total de fases presentes no sistema.

A Equação (3.19) é a equação global da continuidade, referente a todas as fases presentes no sistema. Partindo desta equação e tomando a equação de restrição das frações mássicas, Equação (2.17), pode-se chegar à equação da continuidade para cada uma das fases escrita na formulação das frações mássicas, na qual as incógnitas deixam de ser as saturações e passam a ser as frações mássicas. Assim sendo, pode-se escrever:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^p) = -\nabla \cdot (\rho^p \vec{v}^p) - m^p \quad (3.21)$$

onde Z^p é a fração mássica da fase p .

A Equação (3.21) pode ser derivada do modelo composicional que, além de fases, considera a presença de múltiplos componentes no sistema (Allen III, 1985). Este modelo é de solução complexa e exige alto esforço computacional mas pode ser simplificado a partir de algumas considerações originando o modelo *Black-oil* padrão para escoamentos imiscíveis.

3.1.3 Modelo utilizado no presente trabalho

Um dos objetivos do presente trabalho é descrever a modelagem matemática para simulação de escoamentos planos na etapa de infusão de resina em processos RTM. Considerando a presença de apenas duas fases imiscíveis (ar e resina) escoando na direção horizontal, ou seja, sem influência da gravidade, o conjunto de equações de conservação da massa pode ser escrito como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^p) = -\nabla \cdot (\rho^p \vec{v}^p) - m^p \quad p = a, r \quad (3.22)$$

onde a e r se referem às fases ar e resina, respectivamente. Por conveniência, daqui por diante, o sobrescrito p será utilizado sempre que uma grandeza estiver relacionada a ambas as fases e a informação “ $p = a, r$ ” será omitida.

Substituindo-se a Equação (2.34) de Darcy, pode-se reescrever a Equação (3.22) da

seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^p) = \nabla \cdot (\rho^p \lambda^p \mathbf{K} \nabla \Phi^p) - m^p \quad (3.23)$$

Agrupando alguns termos tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^p) = \nabla \cdot (\tilde{\lambda}^p \mathbf{K} \nabla \Phi^p) - m^p \quad (3.24)$$

onde Φ^p é o potencial e $\tilde{\lambda}^p$ é a mobilidade modificada da fase p , calculada por:

$$\tilde{\lambda}^p = \frac{\rho^p k^{rel,p}}{\mu^p} \quad (3.25)$$

e

$$m^p = \rho^p q^p \quad (3.26)$$

A Equação (3.26) exprime que a vazão mássica da fase p por unidade de volume, m^p , pode ser calculada a partir da vazão volumétrica q^p da fase p , mais prática do ponto de vista da engenharia.

O valor de ρ^p foi incluído no cálculo da mobilidade da fase p com o objetivo de tornar a equação mais compacta e facilitar a manipulação numérica.

Para melhor entendimento, pode-se reescrever a Equação (3.24) para cada uma das fases que ela representa, resultando no seguinte sistema:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^a) = \nabla \cdot (\tilde{\lambda}^a \mathbf{K} \nabla \Phi^a) - m^a \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^r) = \nabla \cdot (\tilde{\lambda}^r \mathbf{K} \nabla \Phi^r) - m^r \quad (3.28)$$

Em escoamentos horizontais, as variáveis primárias do sistema são as frações mássicas (Z^a , Z^r) e as pressões (P^a , P^r) das fases. Após considerar os efeitos capilares desprezíveis, tem-se que $P^a = P^r$, bastando calcular uma dessas pressões, como por exemplo, P^a .

Assim, somam-se no total três incógnitas para duas equações. A equação complementar para a resolução do problema vem da restrição mássica, Equação (2.17), que determina que todo o volume de vazios (volume poroso) é ocupado pelas duas fases. Para o sistema com apenas ar e resina, tem-se:

$$Z^a + Z^r = 1 \quad (3.29)$$

Tomando esta equação, as incógnitas que devem ser calculadas reduzem-se a, por exemplo, P^a e Z^a . Para calcular as mobilidades das fases, deve-se conhecer as permeabilidades relativas que, por sua vez, são função das saturações das fases. As saturações podem ser obtidas a partir das frações mássicas pela Equação (2.18).

3.2 Solução Numérica

Inicialmente, o tratamento numérico foi desenvolvido para o sistema de coordenadas cartesianas, devido à sua maior simplicidade de compreensão e implementação. Em seguida, todo o procedimento foi feito para coordenadas generalizadas. Isso foi útil por possibilitar a validação do solver generalizado por comparação com o cartesiano mediante utilização de uma malha com as características de uma malha cartesiana, e para reduzir a possibilidade de erros com a experiência em um sistema mais simples de coordenadas.

Neste trabalho, optou-se pela utilização do método dos volumes finitos para discretização das equações governantes. Conforme descrito por Schäfer (2006), o MVF envolve os seguintes passos:

- a) Decomposição do domínio do problema em volumes elementares;
- b) Integração das equações diferenciais parciais governantes para cada volume;
- c) Aproximação de funções e derivadas por interpolação a partir de pontos discretos;
- d) Montagem e solução do sistema algébrico resultante.

O uso de um sistema de coordenadas coincidentes com as fronteiras exige duas atividades adicionais em relação ao mesmo método utilizado com malhas cartesianas:

- e) Geração do sistema de coordenadas generalizadas;
- f) Transformação do sistema de equações governantes para um novo sistema $(\xi - \eta)$.

Todos estes passos são mostrados a seguir para as malhas cartesianas e as generalizadas.

3.2.1 Coordenadas cartesianas

Foram utilizadas malhas uniformemente espaçadas, onde as informações da malha (dimensões dos volumes infinitesimais, comprimentos, posições nodais, áreas e volumes) estão presentes dentro das próprias equações discretizadas. Assim, o passo de decomposição do domínio em volumes de controle não caracteriza uma atividade concreta. Desprezando os termos gravitacionais e capilares, considerando a porosidade do meio constante e uma geometria bidimensional retangular, pode-se escrever a Equação (3.24) como:

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho^m Z^p) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{\lambda}^p \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\tilde{\lambda}^p \frac{\partial P}{\partial y} \right) - m^p \quad (3.30)$$

Conforme mencionado, no método dos volumes finitos, a discretização é realizada integrando-se as Equações (3.30) no tempo e no espaço. Para realização da integração no espaço, considera-se o volume elementar com centro no ponto P, destacado na Figura 3.2, e seus vizinhos. Apesar da letra P indicar o ponto no centro do volume, por convenção costuma-se utilizar a mesma nomenclatura para referenciar o volume elementar completo. Assim, daqui para frente todos os volumes elementares serão referenciados com a nomenclatura de seus respectivos pontos centrais.

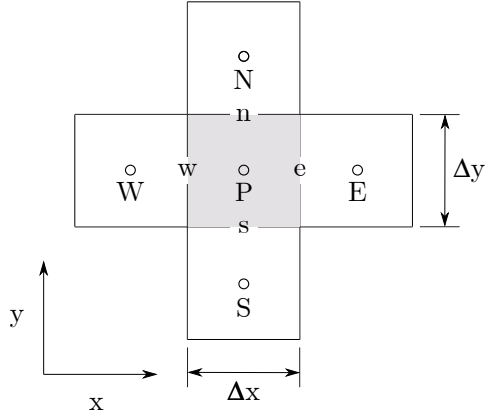


Figura 3.2: Volume para integração em coordenadas cartesianas.

Com a realização da integração, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 [(\rho^m Z^p) - (\rho^m Z^p)^o] \phi \Delta v = & \left[\left(\tilde{\lambda}^p \frac{\partial P}{\partial x} \right)_e - \left(\tilde{\lambda}^p \frac{\partial P}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y \Delta z \Delta t + \\
 & \left[\left(\tilde{\lambda}^p \frac{\partial P}{\partial y} \right)_n - \left(\tilde{\lambda}^p \frac{\partial P}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x \Delta z \Delta t - m^p \Delta v \Delta t
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

onde o sobrescrito o indica que a grandeza é calculada no instante de tempo anterior, os subscritos w , e , n e s apontam a face onde a grandeza está sendo avaliada e $\Delta v = \Delta x \Delta y \Delta z$ representa o volume da célula para a qual foi realizada a integração.

As derivadas parciais que aparecem na Equação (3.31) podem ser aproximadas pelas seguintes expressões:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)_e = \frac{P_E - P_P}{\Delta x} \tag{3.32}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)_w = \frac{P_P - P_W}{\Delta x} \tag{3.33}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)_n = \frac{P_N - P_P}{\Delta y} \tag{3.34}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)_s = \frac{P_P - P_S}{\Delta y} \tag{3.35}$$

Substituindo-se estas aproximações na Equação (3.31), e considerando que a malha é

uniformemente espaçada, obtém-se a forma discreta da equação governante:

$$\begin{aligned} [(\rho^m Z^p) - (\rho^m Z^p)^o] \phi \Delta v = & \left[\tilde{\lambda}_e^p \left(\frac{P_E - P_P}{\Delta x} \right) - \tilde{\lambda}_w^p \left(\frac{P_P - P_W}{\Delta x} \right) \right] \Delta y \Delta z \Delta t + \\ & \left[\tilde{\lambda}_n^p \left(\frac{P_N - P_P}{\Delta y} \right) - \tilde{\lambda}_s^p \left(\frac{P_P - P_S}{\Delta y} \right) \right] \Delta x \Delta z \Delta t - m^p \Delta v \Delta t \end{aligned} \quad (3.36)$$

As equações de conservação da resina e do ar, representadas pela Equação (3.36), devem ser resolvidas para cada volume elementar que constitui a malha. A Seção 3.2.3 descreve o método de Newton utilizado para solução do sistema não-linear resultante, com as equações escritas como uma função residual, isto é, deslocando todos os termos para um dos lados da igualdade, como segue:

$$\begin{aligned} R_P^p = & [(\rho^m Z^p) - (\rho^m Z^p)^o]_P \phi \Delta v - \\ & \left[\tilde{\lambda}_e^p \left(\frac{P_E - P_P}{\Delta x} \right) - \tilde{\lambda}_w^p \left(\frac{P_P - P_W}{\Delta x} \right) \right] \Delta y \Delta z \Delta t - \\ & \left[\tilde{\lambda}_n^p \left(\frac{P_N - P_P}{\Delta y} \right) - \tilde{\lambda}_s^p \left(\frac{P_P - P_S}{\Delta y} \right) \right] \Delta x \Delta z \Delta t + m^p \Delta v \Delta t \end{aligned} \quad (3.37)$$

Esta equação é função das incógnitas (P^a , Z^a) avaliadas no volume P e nos seus vizinhos diretos (N , S , E e W). Conforme descrito na Seção 3.2.3, o método de Newton exige que esta função seja derivada com relação às suas variáveis independentes, isto é, as incógnitas em todos os volumes onde são avaliadas.

3.2.2 Coordenadas generalizadas

Como mencionado anteriormente, as malhas cartesianas não se adequam facilmente a geometrias de bordas irregulares. A idéia principal do uso de coordenadas coincidentes com as fronteiras nestes casos é a transformação da malha não retangular do plano físico para um plano hipotético computacional. Conforme pode ser visto na Figura 3.3, os pontos da malha que originalmente são definidos no plano físico por coordenadas (x, y) passam ao plano transformado sendo descritos por coordenadas (ξ, η) , resultando em um domínio computacional com uma malha retangular uniformemente espaçada. Adicionalmente, as equações governantes precisam ser alteradas para que sejam resolvidas no plano computacional, devendo incluir as métricas do mapeamento.

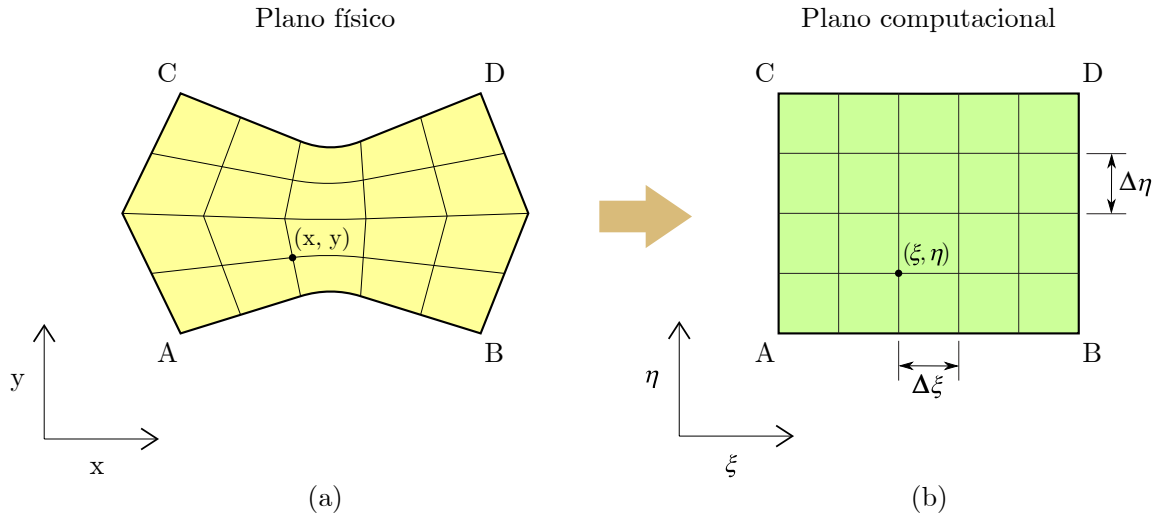


Figura 3.3: Planos (a) físico e (b) computacional transformado.

Este tipo de técnica é bastante vantajosa uma vez que a geometria irregular, definida no plano físico, pode tomar qualquer forma. Como o algoritmo de solução é escrito a partir das equações transformadas para o plano computacional, não precisa ser refeito caso a geometria do problema mude.

3.2.2.1 As métricas e o Jacobiano da transformação

Na Figura 3.3, as posições dos pontos no plano computacional relacionam-se com as posições no plano físico por meio de funções de transformação do tipo:

$$\xi = \xi(x, y) \quad (3.38)$$

$$\eta = \eta(x, y) \quad (3.39)$$

A regra da cadeia para derivadas parciais resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (3.40)$$

Escrevendo as derivadas com a notação de subscritos, onde por exemplo $\frac{\partial \xi}{\partial x} = \xi_x$,

tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \xi_x \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (3.41)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial y} = \xi_y \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (3.42)$$

Uma equação diferencial parcial qualquer escrita no sistema de coordenadas cartesiano (plano físico) pode ser transformada para o plano computacional mediante a substituição das suas derivadas parciais usando as Equações (3.41) e (3.42). Os termos ξ_x , ξ_y , η_x e η_y são denominados de métricas da transformação, ou simplesmente métricas. Uma métrica pode ser aproximada como:

$$\xi_x = \frac{\partial \xi}{\partial x} \approx \frac{\Delta \xi}{\Delta x} \quad (3.43)$$

Isto sugere que as métricas representam razões entre comprimentos no plano físico e no plano transformado. Seus valores podem ser calculados a partir das relações funcionais dadas pelas Equações (3.38) e (3.39), a partir das quais, pode-se obter as seguintes expressões diferenciais:

$$d\xi = \xi_x dx + \xi_y dy \quad (3.44)$$

$$d\eta = \eta_x dx + \eta_y dy \quad (3.45)$$

Escrevendo na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

As funções mostradas nas Equações (3.38) e (3.39) admitem inversas, quando variáveis dependentes passam a ser as independentes e vice-versa. A inversa da transformação é

dada por:

$$x = x(\xi, \eta) \quad (3.47)$$

$$y = y(\xi, \eta) \quad (3.48)$$

a partir das quais pode-se obter:

$$dx = x_\xi d\xi + x_\eta d\eta \quad (3.49)$$

$$dy = y_\xi d\xi + y_\eta d\eta \quad (3.50)$$

Na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

Tomando as Equações (3.46) e (3.51) e realizando algumas manipulações algébricas, pode-se concluir que:

$$\begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.52)$$

Resolvendo-se a equação matricial, obtém-se as seguintes fórmulas para cálculo das métricas:

$$\xi_x = Jy_\eta \quad (3.53)$$

$$\xi_y = -Jx_\eta \quad (3.54)$$

$$\eta_x = -Jy_\xi \quad (3.55)$$

$$\eta_y = Jx_\xi \quad (3.56)$$

onde

$$J = \frac{1}{x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta} \quad (3.57)$$

Na Equação (3.57), J é denominado como Jacobiano da transformação, que, para uma geometria tridimensional, pode ser interpretado como a razão entre um volume no plano computacional e um volume no plano físico. Em uma malha 2D seria a razão entre as áreas. As métricas e o Jacobiano são grandezas importantes uma vez que levam as informações referentes à geometria da malha do plano físico para o plano computacional e são usadas tanto na etapa de geração da malha quanto na transformação das equações governantes para o novo sistema de coordenadas.

3.2.2.2 Transformação das equações

A Equação (3.24) deve ser reescrita no sistema coordenado coincidente com as fronteiras segundo a transformação dada pelas Equações (3.38) e (3.39). Este procedimento pode ser visto com detalhes em Maliska (2004) e resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho^m Z^p) = & \frac{\partial}{\partial \xi} \left(D_1^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \xi} + D_2^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \eta} \right) + \\ & \frac{\partial}{\partial \eta} \left(D_2^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \xi} + D_3^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \eta} \right) - \frac{m^p}{J} \end{aligned} \quad (3.58)$$

Os valores dos termos D_i^p são dados por:

$$D_1^p = \frac{\tilde{\lambda}^p}{J} (\xi_x^2 + \xi_y^2) \quad (3.59)$$

$$D_2^p = \frac{\tilde{\lambda}^p}{J} (\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) \quad (3.60)$$

$$D_3^p = \frac{\tilde{\lambda}^p}{J} (\eta_x^2 + \eta_y^2) \quad (3.61)$$

Como descrito na Seção 3.2.2.1, as expressões que trazem as informações da geometria da malha para as equações transformadas são o jacobiano, J , e as métricas da transformação, ξ_x , ξ_y , η_x e η_y .

3.2.2.3 Integração das equações transformadas

Considere um volume de controle qualquer como aquele mostrado na Figura 3.4. Como a malha no plano físico pode ser não ortogonal, mais pontos vizinhos devem ser levados em consideração durante a integração das equações governantes. Além dos vizinhos diretos (N , S , E e W), entram no cálculo das funções e derivadas os vizinhos ditos cruzados (NW , NE , SW e SE), que podem causar forte influência na solução dependendo do grau de não ortogonalidade da malha.

Realizando a integração da Equação (3.58), obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{J} [(\phi \rho^m Z^p)_P - (\phi \rho^m Z^p)_P^o] = \\ \left[\left(D_1^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \xi} + D_2^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \eta} \right)_e - \left(D_1^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \xi} + D_2^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \eta} \right)_w \right] \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t + \\ \left[\left(D_2^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \xi} + D_3^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \eta} \right)_n - \left(D_2^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \xi} + D_3^p \frac{\partial \Phi^p}{\partial \eta} \right)_s \right] \Delta \xi \Delta \gamma \Delta t - \frac{m^p}{J} \Delta V \Delta t \end{aligned} \quad (3.62)$$

onde $\Delta V = \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma$ representa o volume infinitesimal no sistemas de coordenadas generalizadas.

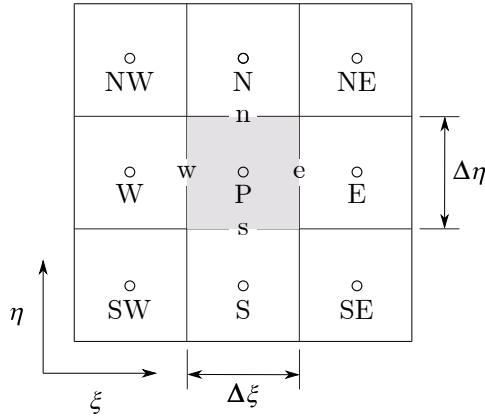


Figura 3.4: Volume para integração em coordenadas generalizadas.

As derivadas diretas das pressões pode ser aproximadas por:

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\xi}\right)_e = \frac{\Phi_E^p - \Phi_P^p}{\Delta\xi} \quad (3.63)$$

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\xi}\right)_w = \frac{\Phi_P^p - \Phi_W^p}{\Delta\xi} \quad (3.64)$$

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\eta}\right)_n = \frac{\Phi_N^p - \Phi_P^p}{\Delta\eta} \quad (3.65)$$

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\eta}\right)_s = \frac{\Phi_P^p - \Phi_S^p}{\Delta\eta} \quad (3.66)$$

As aproximações das derivadas cruzadas, determinadas usando as médias dos pontos vizinhos, são mostradas a seguir:

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\eta}\right)_w = \frac{\Phi_N^p + \Phi_{NW}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SW}^p}{4\Delta\eta} \quad (3.67)$$

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\eta}\right)_e = \frac{\Phi_N^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SE}^p}{4\Delta\eta} \quad (3.68)$$

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\xi}\right)_n = \frac{\Phi_E^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_W^p - \Phi_{NW}^p}{4\Delta\xi} \quad (3.69)$$

$$\left(\frac{\partial\Phi^p}{\partial\xi}\right)_s = \frac{\Phi_E^p + \Phi_{SE}^p - \Phi_W^p - \Phi_{SW}^p}{4\Delta\xi} \quad (3.70)$$

Substituindo-se as expressões das aproximações das derivadas das pressões nas equações integradas, obtém-se as equações algébricas discretizadas:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{J} [(\phi\rho^m Z^p)_P - (\phi\rho^m Z^p)_P^o] = & \\ & \left\{ \left[D_{1e}^p \left(\frac{\Phi_E^p - \Phi_P^p}{\Delta\xi} \right) + D_{2e}^p \left(\frac{\Phi_N^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SE}^p}{4\Delta\eta} \right) \right] - \right. \\ & \left. \left[D_{1w}^p \left(\frac{\Phi_P^p - \Phi_W^p}{\Delta\xi} \right) + D_{2w}^p \left(\frac{\Phi_N^p + \Phi_{NW}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SW}^p}{4\Delta\eta} \right) \right] \right\} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t - \\ & \left\{ \left[D_{2n}^p \left(\frac{\Phi_E^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_W^p - \Phi_{NW}^p}{4\Delta\xi} \right) + D_{3n}^p \left(\frac{\Phi_N^p - \Phi_P^p}{\Delta\eta} \right) \right] - \right. \\ & \left. \left[D_{2s}^p \left(\frac{\Phi_E^p + \Phi_{SE}^p - \Phi_W^p - \Phi_{SW}^p}{4\Delta\xi} \right) + D_{3s}^p \left(\frac{\Phi_P^p - \Phi_S^p}{\Delta\eta} \right) \right] \right\} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t - \frac{m^p}{J} \Delta V \Delta t \end{aligned} \quad (3.71)$$

3.2.3 Metodologia Totalmente Implícita e Método de Newton

Na metodologia totalmente implícita todas as incógnitas são avaliadas no instante de tempo mais atual. O conjunto resultante de equações não-lineares é resolvido via método de Newton que, segundo Schäfer (2006), é um dos mais utilizados para problemas envolvendo sistemas de equações desse tipo. O primeiro passo é reescrever as equações de conservação discretizadas na forma residual, ou seja, mover todos os termos para um dos membros da equação.

A equação discretizada para o sistema de coordenadas generalizadas, Equação (3.71), na forma de uma função residual é dada por:

$$\begin{aligned}
 R_P^p = & \frac{\Delta V}{J} [(\phi \rho^m Z^p)_P - (\phi \rho^m Z^p)_P^o] + \frac{m^p}{J} \Delta V \Delta t - \\
 & \left\{ \left[D_{1e}^p \left(\frac{\Phi_E^p - \Phi_P^p}{\Delta \xi} \right) + D_{2e}^p \left(\frac{\Phi_N^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SE}^p}{4\Delta \eta} \right) \right] - \right. \\
 & \left. \left[D_{1w}^p \left(\frac{\Phi_P^p - \Phi_W^p}{\Delta \xi} \right) + D_{2w}^p \left(\frac{\Phi_N^p + \Phi_{NW}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SW}^p}{4\Delta \eta} \right) \right] \right\} \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t - \\
 & \left\{ \left[D_{2n}^p \left(\frac{\Phi_E^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_W^p - \Phi_{NW}^p}{4\Delta \xi} \right) + D_{3n}^p \left(\frac{\Phi_N^p - \Phi_P^p}{\Delta \eta} \right) \right] - \right. \\
 & \left. \left[D_{2s}^p \left(\frac{\Phi_P^p + \Phi_{SE}^p - \Phi_W^p - \Phi_{SW}^p}{4\Delta \xi} \right) + D_{3s}^p \left(\frac{\Phi_P^p - \Phi_S^p}{\Delta \eta} \right) \right] \right\} \Delta \xi \Delta \gamma \Delta t
 \end{aligned} \quad (3.72)$$

R_P^p na Equação (3.72) é função das incógnitas (P^a , Z^a) avaliadas no volume P e em seus vizinhos diretos (N , S , E , W) e cruzados (SW , NW , SE , NE), ou:

$$R_P^p = R_P^p(P_j^a, Z_j^a) \quad (3.73)$$

onde $j = SW, W, NW, S, P, N, SE, E$ e NE .

Expandindo uma função residual em série de Taylor em torno da k -ésima iteração, tem-se:

$$(R_P^p)^{k+1} = (R_P^p)^k + \sum_{\forall X} \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial X} \right)^k \Delta X + O(\Delta X^2) \quad (3.74)$$

onde k denota o nível iterativo e X representa o conjunto de incógnitas (P_j^a e Z_j^a) da Equação (3.73).

Os termos de ordem ΔX^2 da Equação (3.74) podem ser desprezados. A solução em cada intervalo de tempo é obtida quando os resíduos tendem a zero. Assim, pode-se escrever:

$$-(R_P^p)^k = \sum_{\forall X} \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial X} \right)^k \Delta X \quad (3.75)$$

Expandindo a Equação (3.72) em série de Taylor e fazendo o resíduo na iteração mais atual se aproximar de zero, obtém-se:

$$\left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_P^a} \right) \Delta P_P^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_P^a} \right) \Delta Z_P^a + \sum_{NB} \left[\left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_{NB}^a} \right) \Delta P_{NB}^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_{NB}^a} \right) \Delta Z_{NB}^a \right] = -R_P^p \quad (3.76)$$

Como o somatório NB aplica-se a todos os volumes vizinhos ($W, E, S, N, NE, NW, SE, SW$), a Equação (3.76) pode ser escrita de forma completa como:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_P^a} \right) \Delta P_P^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_P^a} \right) \Delta Z_P^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_W^a} \right) \Delta P_W^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_W^a} \right) \Delta Z_W^a + \\ & \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_E^a} \right) \Delta P_E^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_E^a} \right) \Delta Z_E^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_S^a} \right) \Delta P_S^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_S^a} \right) \Delta Z_S^a + \\ & \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_N^a} \right) \Delta P_N^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_N^a} \right) \Delta Z_N^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_{SW}^a} \right) \Delta P_{SW}^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_{SW}^a} \right) \Delta Z_{SW}^a + \\ & \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_{SE}^a} \right) \Delta P_{SE}^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_{SE}^a} \right) \Delta Z_{SE}^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_{NW}^a} \right) \Delta P_{NW}^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_{NW}^a} \right) \Delta Z_{NW}^a + \\ & \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial P_{NE}^a} \right) \Delta P_{NE}^a + \left(\frac{\partial R_P^p}{\partial Z_{NE}^a} \right) \Delta Z_{NE}^a = -R_P^p \end{aligned} \quad (3.77)$$

O sistema representado pela Equação (3.77) pode ser escrito na forma matricial, ou seja:

$$\mathbf{J} \Delta \mathbf{X} = -\mathbf{R} \quad (3.78)$$

As matrizes do sistema representado pela Equação (3.78):

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} J_{11} & \dots & J_{1N} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ J_{N1} & \dots & J_{NN} \end{bmatrix} \quad (3.79)$$

$$\Delta \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \Delta X_1 \\ \vdots \\ \Delta X_N \end{bmatrix} \quad (3.80)$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} R_1 \\ \vdots \\ R_N \end{bmatrix} \quad (3.81)$$

onde o subscripto N indica o número total de volumes da malha.

As matrizes da Equação (3.78) são matrizes de blocos, ou seja, cada elemento é uma matriz. Os elementos de \mathbf{J} são matrizes 2 x 2 (duas fases e duas incógnitas). Já os elementos das outras duas matrizes são matrizes coluna com duas linhas. Nos elementos de $\Delta \mathbf{X}$ cada linha refere-se a cada uma das incógnitas do problema. As duas linhas dos elementos da matriz \mathbf{R} estão relacionadas às duas fases do sistema multifásico.

$$J_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_v^r}{\partial P_j^a} & \frac{\partial R_v^r}{\partial Z_j^a} \\ \frac{\partial R_v^a}{\partial P_j^a} & \frac{\partial R_v^a}{\partial Z_j^a} \end{bmatrix} \quad (3.82)$$

$$\Delta X_v = \begin{bmatrix} \Delta P_v^a \\ \Delta Z_v^a \end{bmatrix} \quad (3.83)$$

$$R_v = \begin{bmatrix} R_v^r \\ R_v^a \end{bmatrix} \quad (3.84)$$

onde o índice v indica que a grandeza é avaliada no v -ésimo volume, j representa os termos avaliados nos volumes P e todos os seus vizinhos (ou apenas os vizinhos diretos para um caso com discretização no sistema cartesiano).

A estrutura da matriz jacobiana \mathbf{J} é esparsa uma vez que nem todos os volumes do domínio estão conectados. Para facilitar o entendimento, na Seção 3.3.5 são mostrados mais detalhes sobre a matriz jacobiana, sua estrutura e a forma de resolução.

Visando tornar mais rápida a simulação é possível optar por não incluir as derivadas referentes aos vizinhos cruzados na montagem da matriz jacobiana. Dessa maneira, a derivação da função residual seria apenas em relação às incógnitas avaliadas no volume P e nos vizinhos diretos, semelhante ao caso cartesiano. Entretanto, se a malha é bastante não ortogonal, a não inclusão destes termos pode originar erros nos balanços dos componentes. Vários detalhes importantes para o cálculo das derivadas presentes na Equação (3.77) são mostrados no decorrer da Seção 3.3.

3.3 Detalhes da Solução Numérica

Nesta seção serão mostrados detalhes complementares utilizados durante o tratamento numérico, tais como: geração de malha, esquema UDS, esquema de passo de tempo variável, critérios para convergência do método de Newton, estrutura da matriz jacobiana resultante, algoritmos de solução e condições de contorno. Serão apresentadas também as derivações das funções residuais e como são calculadas as derivadas numericamente.

3.3.1 Geração do sistema de coordenadas

As técnicas mais utilizadas para geração de malhas são a solução de sistemas de equações diferenciais parciais, o uso de métodos algébricos e por mapeamento conforme (Hoffmann e Chiang, 2000). Por ser bastante geral e largamente utilizado, utilizou-se no presente trabalho, a primeira das metodologias citadas, mais especificamente a solução de equações diferenciais parciais elípticas. Informações detalhadas acerca deste tema podem ser encontradas em referências específicas sobre o assunto, como Thompson *et al.* (1985), Thompson *et al.* (1999), Liseikin (2010) e Farrashkhalvat e Miles (2003).

Para gerar uma malha bidimensional coincidente com as fronteiras, deve-se tomar uma linha coordenada sobre cada borda da geometria. Sobre as linhas de duas bordas opostas devem ser definidos n pontos, incluindo as duas extremidades. Estes pontos dividem cada

linha oposta em $n - 1$ segmentos, que podem ou não ter comprimentos iguais. Se a borda estiver definida sobre uma linha ξ , por cada ponto sobre ela deve passar uma e somente uma linha η , e vice versa. A partir das linhas e pontos definidos nas bordas, a técnica de geração deve obter as demais linhas ξ e η varrendo todo o domínio de estudo, desde que todas as linhas coordenadas comecem e terminem nas linhas definidas sobre as bordas da geometria. A malha gerada deve apresentar algumas características específicas:

- A relação de todas linhas e pontos do plano físico para o transformado deve ser de um para um, ou seja, um par (x, y) pode dar origem a um e somente um par (ξ, η) ;
- Linhas de uma mesma família não podem se cruzar;
- Linhas de famílias diferentes somente devem se cruzar uma única vez;
- Os pontos da malha devem ser distribuídos de maneira suave;
- O ideal é que as linhas da malha possuam um grau mínimo de ortogonalidade, mas nem sempre isso é possível de se obter.

As equações diferenciais parciais elípticas (EDPs), como a equação de Laplace, são bastante usadas para geração de malhas, principalmente para mapear geometrias em 2D (Hoffmann e Chiang, 2000). A solução de um problema de condução de calor bidimensional, em regime permanente, com condições de contorno de Dirichlet, modelado pela equação de Laplace, é constituída por isotermas suaves e que não se interceptam. De acordo com Tannehill *et al.* (1997), a idéia de gerar uma malha coincidente com as fronteiras seria utilizar isotermas geradas dessa forma como as linhas da malha. Um sistema de equações de Laplace é mostrado a seguir:

$$\nabla^2 \xi = 0 \tag{3.85}$$

$$\nabla^2 \eta = 0 \tag{3.86}$$

Dependendo do tipo de geometria, a malha gerada pode não ser satisfatória devido a uma alta ou baixa concentração de linhas em determinada região do domínio. Esse

problema pode ser contornado através da introdução de termos fontes nas equações de geração da malha. Incluindo os termos fontes, o sistema passa a ser composto por equações de Poisson (Hoffmann e Chiang, 2000), ou seja o sistema se torna:

$$\nabla^2 \xi = P(\xi, \eta) \quad (3.87)$$

$$\nabla^2 \eta = Q(\xi, \eta) \quad (3.88)$$

A expressão usada no presente trabalho para os termos P e Q é a mesma proposta por Thompson *et al.* (1974):

$$P(\xi, \eta) = - \sum_{m=1}^M a_m \text{sign}(\xi - \xi_m) \exp(-c_m |\xi - \xi_m|) - \sum_{n=1}^N b_n \text{sign}(\xi - \xi_n) \exp \left\{ -d_n [(\xi - \xi_n)^2 + (\eta - \eta_n)^2]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (3.89)$$

$$Q(\xi, \eta) = - \sum_{m=1}^M a_m \text{sign}(\eta - \eta_m) \exp(-c_m |\eta - \eta_m|) - \sum_{n=1}^N b_n \text{sign}(\eta - \eta_n) \exp \left\{ -d_n [(\xi - \xi_n)^2 + (\eta - \eta_n)^2]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (3.90)$$

O primeiro termo das equações de P e Q é responsável pela atração entre linhas coordenadas e o segundo termo, por sua vez, atrai as linhas para os pontos escolhidos. Os coeficientes a_m , c_m , b_n e d_n podem ser ajustados de forma a se obter a melhor solução possível. Os termos M e N indicam o número de linhas ξ (ou η) e pontos atraentes, respectivamente. Na Equação (3.89), ξ_m e η_m são as linhas para as quais as outras linhas ξ são atraídas e (ξ_n, η_n) são os pontos para os quais as linhas ξ são atraídas. Já na Equação (3.90), ξ_m e η_m são as linhas para as quais as outras linhas η são atraídas e (ξ_n, η_n) são os pontos para os quais as linhas η são atraídas.

As Equações (3.87) e (3.88) podem ser desenvolvidas segundo procedimento descrito por Maliska (2004) ou Hoffmann e Chiang (2000), resultando no seguinte sistema de equa-

ções:

$$\alpha x_{\xi\xi} + \gamma x_{\eta\eta} - 2\beta x_{\xi\eta} + \frac{1}{J^2}(Px_{\xi} + Qx_{\eta}) = 0 \quad (3.91)$$

$$\alpha y_{\xi\xi} + \gamma y_{\eta\eta} - 2\beta y_{\xi\eta} + \frac{1}{J^2}(Py_{\xi} + Qy_{\eta}) = 0 \quad (3.92)$$

onde

$$\alpha = x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2 \quad (3.93)$$

$$\gamma = x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2 \quad (3.94)$$

$$\beta = x_{\xi}x_{\eta} + y_{\xi}y_{\eta} \quad (3.95)$$

O jacobiano J é calculado pela Equação (3.57). A solução desta equação fornecerá os pontos (x, y) de interseção das linhas da malha. As Equações (3.91) e (3.92) podem ser resolvidas numericamente partindo-se de condições de contorno pré estabelecidas. As variáveis dependentes são as coordenadas x e y dos pontos da malha no plano físico, cujas distribuições são especificadas como condição de contorno nas bordas da geometria e calculadas no interior do domínio pelas equações diferenciais parciais (Hoffmann e Chiang, 2000). Normalmente se atribui às variáveis independentes (ξ e η) valores inteiros de 1 a N , onde N é o número de linhas da malha.

Para demonstrar a solução numérica das Equações (3.91) e (3.92), pode-se reescrevê-las para uma variável genérica φ :

$$\alpha\varphi_{\xi\xi} + \gamma\varphi_{\eta\eta} - 2\beta\varphi_{\xi\eta} + \frac{1}{J^2}(P\varphi_{\xi} + Q\varphi_{\eta}) = 0 \quad (3.96)$$

Os termos que envolvem derivadas parciais podem ser aproximados por diferenças

finitas:

$$\varphi_{\xi\xi} = \frac{\varphi_E + \varphi_W - 2\varphi_P}{\Delta\xi^2} \quad (3.97)$$

$$\varphi_{\eta\eta} = \frac{\varphi_N + \varphi_S - 2\varphi_P}{\Delta\eta^2} \quad (3.98)$$

$$\varphi_{\xi\eta} = \frac{\varphi_{NE} + \varphi_{SW} - \varphi_{SE} - \varphi_{NW}}{4\Delta\xi\Delta\eta} \quad (3.99)$$

$$\varphi_\xi = \frac{\varphi_E - \varphi_W}{2\Delta\xi} \quad (3.100)$$

$$\varphi_\eta = \frac{\varphi_N - \varphi_S}{2\Delta\eta} \quad (3.101)$$

Substituindo estes termos na Equação (3.96) chega-se a equação geral na sua forma aproximada que, após o agrupamento de alguns termos, pode ser organizada como:

$$\begin{aligned} A_P\varphi_P = & A_E\varphi_E + A_W\varphi_W + A_N\varphi_N + A_S\varphi_S + \\ & A_{NE}\varphi_{NE} + A_{SE}\varphi_{SE} + A_{NW}\varphi_{NW} + A_{SW}\varphi_{SW} \end{aligned} \quad (3.102)$$

Os coeficientes da Equação (3.102) são dados por:

$$\begin{aligned} A_P &= 2(\alpha + \gamma) \\ A_E &= \alpha + \frac{P}{2J^2}, \quad A_W = \alpha - \frac{P}{2J^2}, \quad A_N = \gamma + \frac{Q}{2J^2}, \quad A_S = \gamma - \frac{Q}{2J^2} \\ A_{NE} &= A_{SW} = -\frac{\beta}{2}, \quad A_{SE} = A_{NW} = \frac{\beta}{2} \end{aligned} \quad (3.103)$$

A solução do sistema linear $[A][\varphi] = [B]$ fornece as posições dos pontos internos da malha baseados nas posições dos pontos das bordas da geometria e nos termos que compõem os termos fonte (P e Q). O sistema pode ser resolvido por um método numérico direto ou iterativo. No presente trabalho, foi utilizado o método iterativo de GAUSS-SEIDEL. Computados os valores de x e y para todas as interseções das linhas ξ e η , a malha está determinada.

3.3.2 O esquema UDS (*Upwind Difference Scheme*)

No presente trabalho, o valor das propriedades dos fluidos e do reservatório é armazenado nos centros dos volumes. Entretanto, nas equações discretizadas surgem alguns destes valores, tais como as mobilidades e suas derivadas, sendo avaliados nas faces dos volumes. Alguns esquemas de interpolação podem ser usados para calcular as propriedades nas faces dos volumes a partir de valores em pontos nodais próximos. O esquema UDS (*Upwind Difference Scheme*) que se baseia no sentido do fluxo é utilizado para esta finalidade. Segundo este esquema, a grandeza na interface do volume será igual ao valor do ponto que está localizado imediatamente atrás (em relação ao sentido do escoamento). A Figura 3.5 ilustra como os valores nas faces de dois volumes contíguos são calculados pelo UDS.

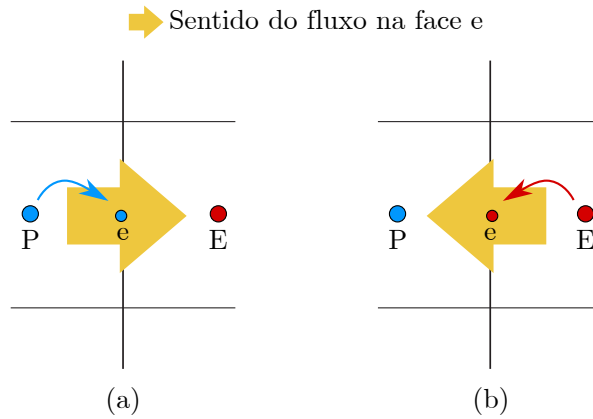


Figura 3.5: Avaliação de uma propriedade geral Φ na interface “e” a partir dos seus valores nos volumes vizinhos P e E pelo esquema UDS: (a) $\Phi_e = \Phi_P$ se o fluxo vai de P para E e (b) $\Phi_e = \Phi_E$ se o fluxo vai de E para P.

Para determinar a direção do escoamento na face leste e, avalia-se a velocidade da fase através da lei de Darcy que, para coordenadas generalizadas, é escrita como:

$$\vec{v}_e^p = -\tilde{\lambda}_e^p \left[G_{1e} \frac{(\Phi_E^p - \Phi_P^p)}{\Delta\xi} + G_{2e} \frac{(\Phi_N^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SE}^p)}{4\Delta\eta} \right] \quad (3.104)$$

Exemplificando, para $\vec{v}_e^p > 0$, basta verificar:

$$- \left[G_{1e} \frac{(\Phi_E^p - \Phi_P^p)}{\Delta\xi} + G_{2e} \frac{(\Phi_N^p + \Phi_{NE}^p - \Phi_S^p - \Phi_{SE}^p)}{4\Delta\eta} \right] > 0 \quad (3.105)$$

Se $\vec{v}_e^p > 0$, tem-se $\tilde{\lambda}_e^p = \tilde{\lambda}_P^p$ e $\tilde{\lambda}_e^p = \tilde{\lambda}_E^p$ caso $\vec{v}_e^p < 0$. Nas demais faces do volume usa-se o mesmo raciocínio.

O uso deste tipo de esquema de interpolação influencia no cálculo da derivada da mobilidade $\tilde{\lambda}_e^p$ uma vez que esta será ora função da pressão no ponto P , ora no ponto E , dependendo da direção do fluxo. O procedimento de cálculo das derivadas será mostrado na Seção 3.3.3. Como o sistema é multifásico, é necessário verificar o sentido do fluxo para cada fase, uma vez que estas podem ter movimentos diferentes dependendo das condições locais.

3.3.3 Derivação das funções residuais

Será mostrado a seguir o processo de derivação da equação de conservação da resina escrita na forma de função residual. A derivação da função residual referente a equação do ar pode ser feita de modo análogo. Substituindo as aproximações das derivadas diretas e cruzadas dadas pelas Equações (3.63) a (3.70) na Equação (3.72), pode-se escrever a função residual da resina como:

$$\begin{aligned} R_P^r = & \frac{\Delta V}{J} [(\phi\rho^m Z^r)_P - (\phi\rho^m Z^r)_P^o] + \frac{m^r}{J} \Delta V \Delta t - \\ & \left\{ \left[G_1 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_E^r - \Phi_P^r}{\Delta\xi} \right) + G_2 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_N^r + \Phi_{NE}^r - \Phi_S^r - \Phi_{SE}^r}{4\Delta\eta} \right) \right]_e - \right. \\ & \left. \left[G_1 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_P^r - \Phi_W^r}{\Delta\xi} \right) + G_2 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_N^r + \Phi_{NW}^r - \Phi_S^r - \Phi_{SW}^r}{4\Delta\eta} \right) \right]_w \right\} \Delta\eta \Delta\gamma \Delta t - \\ & \left\{ \left[G_2 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_E^r + \Phi_{NE}^r - \Phi_W^r - \Phi_{NW}^r}{4\Delta\xi} \right) + G_3 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_N^r - \Phi_P^r}{\Delta\eta} \right) \right]_n - \right. \\ & \left. \left[G_2 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_E^r + \Phi_{SE}^r - \Phi_W^r - \Phi_{SW}^r}{4\Delta\xi} \right) + G_3 \tilde{\lambda}^r \left(\frac{\Phi_P^r - \Phi_S^r}{\Delta\eta} \right) \right]_s \right\} \Delta\xi \Delta\gamma \Delta t \end{aligned} \quad (3.106)$$

A equação anterior deve ser derivada em relação as variáveis do reservatório (Z^a e P^a)

nos pontos P e seus vizinhos diretos ($N, S, E, W, SW, SE, NW, NE$). Isso pode ser feito mediante a derivação de cada termo que a compõe separadamente.

3.3.3.1 Derivação dos termos fonte e acumulativo

Como os valores de $\phi\rho^m Z^r$ e $m^r = \rho^r q^r$ na Equação (3.106) são avaliados apenas no ponto P , as suas derivadas devem ser calculadas somente neste ponto. Nos outros pontos elas são nulas. Agrupando os termos fonte e acumulativo e chamando de Γ^r , tem-se:

$$\Gamma^r = \frac{\Delta V}{J} [(\phi\rho^m Z^r)_P - (\phi\rho^m Z^r)_P^o] + \frac{m^r}{J} \Delta V \Delta t \quad (3.107)$$

As derivadas são calculadas por:

$$\frac{\partial \Gamma^r}{\partial P_P^a} = \frac{\Delta V Z^r}{J} \frac{\partial(\phi\rho^m)}{\partial P_P^a} + \frac{\Delta V \Delta t}{J} \frac{\partial(\rho^r q^r)}{\partial P_P^a} \quad (3.108)$$

$$\frac{\partial \Gamma^r}{\partial Z_P^a} = \frac{\Delta V \phi}{J} \frac{\partial(Z^r \rho^m)}{\partial Z_P^a} + \frac{\Delta V \Delta t}{J} \frac{\partial(\rho^r q^r)}{\partial Z_P^a} \quad (3.109)$$

$$\frac{\partial \Gamma^r}{\partial P_j^a} = 0 \quad (3.110)$$

$$\frac{\partial \Gamma^r}{\partial Z_j^a} = 0 \quad (3.111)$$

onde $j = SW, W, NW, S, P, N, SE, E$ e NE .

As derivadas dos termos convectivos da Equação (3.106) são adicionadas às Equações (3.108) a (3.111).

3.3.3.2 Derivação dos termos convectivos

Como mencionado na Seção 3.3.2, o esquema UDS é usado para calcular as mobilidades nas faces dos volumes. Por este motivo, nem sempre pode-se calcular a derivação das mobilidades das fases em relação ao volume P . A derivação dos termos convectivos depende da direção do escoamento. Tomando como referência o escoamento na face “e”, se a direção ocorre conforme a Figura 3.5 (a), ou seja, do volume P para o volume E ,

tem-se $\tilde{\lambda}_e^r = \tilde{\lambda}_P^r$, logo a derivada é calculada em relação ao volume P . As derivadas de R^r são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^r}{\partial P_P^a} = \frac{\partial \Gamma^r}{\partial P_P^a} - \left[G_{1e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial P_P^a} \left(\frac{\Phi_E^r - \Phi_P^r}{\Delta \xi} \right) - \frac{G_{1e} \tilde{\lambda}_e^r}{\Delta \xi} \frac{\partial(\Phi_P^r)}{\partial P_P^a} + \right. \\ \left. G_{2e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial P_P^a} \left(\frac{\Phi_N^r + \Phi_{NE}^r - \Phi_S^r - \Phi_{SE}^r}{4\Delta \eta} \right) \right] \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t \end{aligned} \quad (3.112)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^r}{\partial Z_P^a} = \frac{\partial \Gamma^r}{\partial Z_P^a} - \left[G_{1e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial Z_P^a} \left(\frac{\Phi_E^r - \Phi_P^r}{\Delta \xi} \right) - \frac{G_{1e} \tilde{\lambda}_e^r}{\Delta \xi} \frac{\partial(\Phi_P^r)}{\partial Z_P^a} + \right. \\ \left. G_{2e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial Z_P^a} \left(\frac{\Phi_N^r + \Phi_{NE}^r - \Phi_S^r - \Phi_{SE}^r}{4\Delta \eta} \right) \right] \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t \end{aligned} \quad (3.113)$$

$$\frac{\partial R^r}{\partial P_E^a} = \frac{\partial \Gamma^r}{\partial P_E^a} - \frac{G_{1e} \tilde{\lambda}_e^r}{\Delta \xi} \frac{\partial(\Phi_E^r)}{\partial P_E^a} \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t \quad (3.114)$$

Se a direção do fluxo na mesma face é na direção oposta, como na Figura 3.5 (b), ou seja, do volume E para o volume P , o esquema UDS determina que $\tilde{\lambda}_e^r = \tilde{\lambda}_E^r$, logo a sua derivada é calculada em relação ao volume P . As derivadas de R^r passam a ser:

$$\frac{\partial R^r}{\partial P_P^a} = \frac{\partial \Gamma^r}{\partial P_P^a} - \left[-\frac{G_{1e} \tilde{\lambda}_e^r}{\Delta \xi} \frac{\partial(\Phi_P^r)}{\partial P_P^a} \right] \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t \quad (3.115)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^r}{\partial P_E^a} = \frac{\partial \Gamma^r}{\partial P_E^a} - \left[G_{1e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial P_E^a} \left(\frac{\Phi_E^r - \Phi_P^r}{\Delta \xi} \right) + \frac{G_{1e} \tilde{\lambda}_e^r}{\Delta \xi} \frac{\partial(\Phi_E^r)}{\partial P_E^a} + \right. \\ \left. G_{2e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial P_E^a} \left(\frac{\Phi_N^r + \Phi_{NE}^r - \Phi_S^r - \Phi_{SE}^r}{4\Delta \eta} \right) \right] \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t \end{aligned} \quad (3.116)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^r}{\partial Z_E^a} = \frac{\partial \Gamma^r}{\partial Z_E^a} - \left[G_{1e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial Z_E^a} \left(\frac{\Phi_E^r - \Phi_P^r}{\Delta \xi} \right) + \frac{G_{1e} \tilde{\lambda}_e^r}{\Delta \xi} \frac{\partial(\Phi_E^r)}{\partial Z_E^a} + \right. \\ \left. G_{2e} \frac{\partial(\tilde{\lambda}_e^r)}{\partial Z_E^a} \left(\frac{\Phi_N^r + \Phi_{NE}^r - \Phi_S^r - \Phi_{SE}^r}{4\Delta \eta} \right) \right] \Delta \eta \Delta \gamma \Delta t \end{aligned} \quad (3.117)$$

Computa-se as derivadas referentes às outras faces do volume seguindo o mesmo raciocínio.

3.3.3.3 Derivação dos termos convectivos cruzados

O esquema de nove pontos exige a inclusão das derivadas referentes aos volumes cruzados da Equação (3.106) na montagem da matriz jacobiana. As derivadas dos volumes cruzados envolvem apenas os potenciais das fases, uma vez que a permeabilidade relativa da fase depende apenas vizinhos dos diretos, devido ao uso esquema UDS. Apresentam-se a seguir as derivadas da função residual avaliadas nos pontos SW , SE , NW e NE com relação à incógnita X (Z^a ou P^a).

$$\frac{\partial R^p}{\partial X_{SW}} = -\frac{G_{2w}\tilde{\lambda}_w^p}{4\Delta\eta} \frac{\partial(\Phi_{SW}^p)}{\partial X_{SW}} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t - \frac{G_{2s}\tilde{\lambda}_s^p}{4\Delta\xi} \frac{\partial(\Phi_{SW}^p)}{\partial X_{SW}} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t \quad (3.118)$$

$$\frac{\partial R^p}{\partial X_{SE}} = \frac{G_{2e}\tilde{\lambda}_e^p}{4\Delta\eta} \frac{\partial(\Phi_{SE}^p)}{\partial X_{SE}} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t + \frac{G_{2s}\tilde{\lambda}_s^p}{4\Delta\xi} \frac{\partial(\Phi_{SE}^p)}{\partial X_{SE}} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t \quad (3.119)$$

$$\frac{\partial R^p}{\partial X_{NW}} = \frac{G_{2w}\tilde{\lambda}_w^p}{4\Delta\eta} \frac{\partial(\Phi_{NW}^p)}{\partial X_{NW}} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t + \frac{G_{2n}\tilde{\lambda}_n^p}{4\Delta\xi} \frac{\partial(\Phi_{NW}^p)}{\partial X_{NW}} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t \quad (3.120)$$

$$\frac{\partial R^p}{\partial X_{NE}} = -\frac{G_{2e}\tilde{\lambda}_e^p}{4\Delta\eta} \frac{\partial(\Phi_{NE}^p)}{\partial X_{NE}} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t - \frac{G_{2n}\tilde{\lambda}_n^p}{4\Delta\xi} \frac{\partial(\Phi_{NE}^p)}{\partial X_{NE}} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t \quad (3.121)$$

Nota-se que as aproximações das derivadas cruzadas envolvem alguns vizinhos diretos do volume P , Equações (3.67) a (3.70). É importante que estes termos também sejam considerados para que a matriz jacobiana seja avaliada corretamente. Desta forma, adicionam-se às equações das derivadas para os pontos (N , S , E e W), Equações (3.110) e (3.111), os seguintes termos:

$$\frac{\partial R^p}{\partial P_W^a} = \frac{\partial \Gamma^p}{\partial P_W^a} + \left[\left(\frac{G_{2n}\tilde{\lambda}_n^p}{4\Delta\xi} \right) - \left(\frac{G_{2s}\tilde{\lambda}_s^p}{4\Delta\xi} \right) \right] \frac{\partial(\Phi_W^p)}{\partial P_W^a} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t \quad (3.122)$$

$$\frac{\partial R^p}{\partial P_E^a} = \frac{\partial \Gamma^p}{\partial P_E^a} + \left[- \left(\frac{G_{2n}\tilde{\lambda}_n^p}{4\Delta\xi} \right) + \left(\frac{G_{2s}\tilde{\lambda}_s^p}{4\Delta\xi} \right) \right] \frac{\partial(\Phi_E^p)}{\partial P_E^a} \Delta\xi\Delta\gamma\Delta t \quad (3.123)$$

$$\frac{\partial R^p}{\partial P_S^a} = \frac{\partial \Gamma^p}{\partial P_S^a} + \left[\left(\frac{G_{2e}\tilde{\lambda}_e^p}{4\Delta\eta} \right) - \left(\frac{G_{2w}\tilde{\lambda}_w^p}{4\Delta\eta} \right) \right] \frac{\partial(\Phi_S^p)}{\partial P_S^a} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t \quad (3.124)$$

$$\frac{\partial R^p}{\partial P_N^a} = \frac{\partial \Gamma^p}{\partial P_N^a} + \left[- \left(\frac{G_{2e}\tilde{\lambda}_e^p}{4\Delta\eta} \right) - \left(\frac{G_{2w}\tilde{\lambda}_w^p}{4\Delta\eta} \right) \right] \frac{\partial(\Phi_N^p)}{\partial P_N^a} \Delta\eta\Delta\gamma\Delta t \quad (3.125)$$

3.3.4 Considerações a respeito das derivadas numéricas

No cálculo das derivadas da função residual da resina, Equações (3.108) a (3.125), aparecem as derivadas de alguns termos como $\phi\rho^m$, $\tilde{\lambda}^r$, Φ^r , $\rho^r q^r$ em relação às variáveis do reservatório (P^a , Z^a). Estas derivadas não podem ser obtidas diretamente, pois há uma forte interdependência entre as variáveis. A mobilidade $\tilde{\lambda}^r$, por exemplo, é função da permeabilidade relativa, que é função da saturação, que depende da fração mássica da fase. Por causa dessa interdependência, calcular analiticamente o valor das derivadas usando a regra da cadeia, seria impossível do ponto de vista prático. As equações resultantes tornar-se-iam muito extensas e o trabalho bastante árduo. Por isso, neste trabalho todas as derivadas são calculadas numericamente.

Para o caso bifásico (ar-resina), cada parâmetro é avaliado em três pontos: (P^a , Z^a), ($P^a + \Delta P^a$, Z^a) e (P^a , $Z^a + \Delta Z^a$). Sendo mantidas constantes as outras variáveis do reservatório, a derivação de qualquer termo Ω em relação a uma variável de reservatório X , pode calculada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial X} \approx \frac{\Omega(X + \Delta X) - \Omega(X)}{\Delta X} \quad (3.126)$$

Por exemplo, para calcular apenas o valor da derivada de ϕ que é apenas função de P^a , têm-se

$$\frac{\partial \phi}{\partial Z^a} = 0 \quad (3.127)$$

e

$$\frac{\partial \phi}{\partial P^a} = \frac{\phi(P^a + \Delta P^a) - \phi(P^a)}{\Delta P^a} \quad (3.128)$$

Na Equação (3.126), ΔX pode ser ΔP^a ou ΔZ^a . Segundo Cunha (1996), valores da ordem de $\Delta P^a = 0,001P^a$ e $\Delta Z^a = 0,01Z^a$ podem ser usados com bons resultados. Entretanto, visando evitar imprecisões numéricas, deve-se fazer $\Delta Z^a = 10^{-5}$ caso o valor de Z^a seja pequeno (menor que 0,001). Neste trabalho estes mesmos valores são usados.

3.3.5 Estrutura da matriz jacobiana e procedimento iterativo de solução

De acordo com a Seção 3.2.3, o uso do método de Newton recai na solução de um sistema de equações que pode ser escrito na forma matricial, Equação (3.78).

A Figura 3.6 mostra uma malha com nove volumes, representando uma discretização bidimensional para uma geometria cartesiana. Considerando a inclusão apenas dos vizinhos diretos E , W , N e S (esquema de cinco pontos), a matriz jacobiana possui um formato pentadiagonal:

$$\begin{bmatrix}
 J_1 & J_2 & & J_4 & & & & & \\
 J_1 & J_2 & J_3 & & J_5 & & & & \\
 & J_2 & J_3 & & & J_6 & & & \\
 J_1 & & & J_4 & J_5 & & J_7 & & \\
 & J_2 & & J_4 & J_5 & J_6 & & J_8 & \\
 & & J_3 & & J_5 & J_6 & & & J_9 \\
 & & & J_4 & & & J_7 & J_8 & \\
 & & & & J_5 & & J_7 & J_8 & J_9 \\
 & & & & & J_6 & & J_8 & J_9
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \Delta X_1 \\
 \Delta X_2 \\
 \Delta X_3 \\
 \Delta X_4 \\
 \Delta X_5 \\
 \Delta X_6 \\
 \Delta X_7 \\
 \Delta X_8 \\
 \Delta X_9
 \end{bmatrix}
 = -
 \begin{bmatrix}
 R_1 \\
 R_2 \\
 R_3 \\
 R_4 \\
 R_5 \\
 R_6 \\
 R_7 \\
 R_8 \\
 R_9
 \end{bmatrix}
 \quad (3.129)$$

A Figura 3.6 serve também para ilustrar uma discretização no plano computacional de uma transformação de coordenadas coincidentes com as fronteiras. Neste caso, para um esquema de nove pontos, são considerados também os vizinhos cruzados SW , SE , NW e

7	8	9
4	5	6
1	2	3

Figura 3.6: Discretização cartesiana com nove volumes (3x3).

NE na montagem da matriz jacobiana. Sua estrutura passa a ter nove diagonais:

$$\begin{bmatrix} J_1 & J_2 & & J_4 & J_5 & & & & \\ J_1 & J_2 & J_3 & J_4 & J_5 & J_6 & & & \\ & J_2 & J_3 & & J_5 & J_6 & & & \\ J_1 & J_2 & & J_4 & J_5 & & J_7 & J_8 & \\ J_1 & J_2 & J_3 & J_4 & J_5 & J_6 & J_7 & J_8 & J_9 \\ & J_2 & J_3 & & J_5 & J_6 & & J_8 & J_9 \\ & & & J_4 & J_5 & & J_7 & J_8 & \\ & & & J_4 & J_5 & J_6 & J_7 & J_8 & J_9 \\ & & & & J_5 & J_6 & & J_8 & J_9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta X_1 \\ \Delta X_2 \\ \Delta X_3 \\ \Delta X_4 \\ \Delta X_5 \\ \Delta X_6 \\ \Delta X_7 \\ \Delta X_8 \\ \Delta X_9 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ R_5 \\ R_6 \\ R_7 \\ R_8 \\ R_9 \end{bmatrix} \quad (3.130)$$

Os espaços em branco da matriz jacobiana nas Equações (3.129) e (3.130) representam os termos nulos. Conforme pode-se observar, a estrutura da matriz é esparsa, exigindo que se utilize um método de solução eficiente. Os termos não nulos das matrizes são dados pelas Equações (3.82), (3.83) e (3.84).

Para cada volume da malha os valores de P^a e Z^a são calculados e atualizados em cada iteração a partir das seguintes expressões:

$$(P^a)^{k+1} = (P^a)^k + \Delta P^a \quad (3.131)$$

$$(Z^a)^{k+1} = (Z^a)^k + \Delta Z^a \quad (3.132)$$

Em seguida, mediante equação de restrição, Equação (3.29), obtém-se a fração mássica da resina. Como há termos não-lineares nas equações governantes, a solução é obtida a cada passo de tempo após um número suficiente de iterações. Em cada iteração, os valores de P^a e Z^a mudam, a matriz J e o vetor R são recalculados e o sistema linear resultante é novamente resolvido até que o resíduo caia suficientemente. A solução do sistema linear resultante, Equação (3.78), permite calcular os valores de P^a e Z^a até que se obtenha a conservação da massa em cada instante de tempo.

Na formulação em frações mássicas, o algoritmo para a metodologia totalmente implícita é descrito a seguir:

- 1) **Inicialização das variáveis:** inicialização de todas as variáveis da simulação, atribuição dos valores iniciais para os campos de pressão e saturação;
- 2) **Cálculo das propriedades:** cálculo das propriedades da resina, do ar e do meio poroso de acordo com os campos de pressão e saturação. O valor das frações mássicas é calculado a partir dos valores das saturações;
- 3) **Cálculo das derivadas e resíduos e montagem da matriz jacobiana:** para montar a matriz jacobiana é necessário derivar as equações de resíduo em relação as incógnitas do problema (pressões e frações mássicas). Devido ao uso do esquema UDS, é necessário verificar qual a direção do escoamento para cada fase na derivação das equações residuais;
- 4) **Resolução do sistema linear definido pela matriz jacobiana:** como cada elemento da matriz jacobiana é uma matriz 2×2 , deve-se utilizar um algoritmo capaz de resolver um sistema linear multiblocos;
- 5) **Avanço das variáveis no nível iterativo:** a solução do sistema linear é um vetor de variações e por isso as incógnitas são avançadas no nível iterativo fazendo ($X^{k+1} = X^k + \Delta X$).
- 6) **Verificação da convergência:** retorno ao passo 2 caso não ocorra a convergência;
- 7) **Avanço no tempo:** incremento no tempo e retorno ao passo 2 com os novos valores de pressão e saturação calculados.

3.3.5.1 Convergência do método de Newton

Quando se utiliza um método iterativo, é necessário escolher um critério de parada, ou seja, quando a solução está suficientemente próxima ao valor desejado. A convergência do método de Newton foi avaliada a partir das variações apresentadas pelas variáveis P^a e Z^a em cada iteração (Cunha, 1996).

a) Critério para a pressão:

$$\max \left(\frac{|(P_P^a)^{k+1} - (P_P^a)^k|}{(P_{max}^a)^{k+1} - (P_{min}^a)^{k+1}} \right) \leq tol_P \quad (3.133)$$

onde k é o nível iterativo do ciclo de *Newton*, os subscritos *max* e *min* representam, respectivamente, a máxima e mínima pressão na iteração atual ($k+1$), tol_P é a tolerância para a convergência de P^a , variando entre 10^{-2} a 10^{-3} .

b) Critério para as frações mássicas:

$$\max |(Z_P^a)^{k+1} - (Z_P^a)^k| \leq tol_Z \quad (3.134)$$

onde tol_Z é a tolerância para a convergência de Z^a , variando entre 10^{-4} e 10^{-5} .

3.3.6 Método de solução do sistema linear

O sistema linear resultante a ser resolvido para obtenção da solução em cada instante de tempo é do tipo:

$$\mathbf{J}X = R \quad (3.135)$$

onde, \mathbf{J} é a matriz jacobiana, X é o vetor de solução e R é o vetor resíduo.

Os métodos iterativos não-estacionários normalmente utilizados para solução deste tipo de sistema apresentam taxa de convergência lenta (Marcondes, 1996). Com o objetivo de melhorar a taxa de convergência destes métodos, resolve-se o sistema equivalente,

$$\mathbf{M}_1^{-1}JX = \mathbf{M}_1^{-1}R \quad (3.136)$$

onde \mathbf{M}_1 é denominada matriz de pré-condicionamento.

A matriz de pré-condicionamento deve ser ao mesmo tempo uma boa aproximação da matriz Jacobiana \mathbf{J} e sua fatoração fácil de ser obtida. Existem diversas possibilidades de se obter \mathbf{M}_1 . Caso \mathbf{J} tenha uma estrutura regular, \mathbf{M}_1 poderá ser obtida a partir de uma partição dela. No presente trabalho \mathbf{M}_1 é a diagonal principal de \mathbf{J} . Apesar desta opção considerar apenas uma diagonal de \mathbf{J} ela produz resultados satisfatórios e é relativamente fácil de ser implementada em código computacional.

Para a solução do sistema linear da Equação (3.136), adotou-se o *Bi-CGSTAB* (*Bi-Conjugate Gradient Stabilized method*) proposto por (Van der Vorst, 1992). Descreve-se, a seguir, o algoritmo *Bi-CGSTAB*:

```

 $r_o = R - Jx_o$ 

 $\hat{r} = r_o$ 

 $\rho_o = \alpha_o = \omega_o = 1$ 

 $v_o = p_o = 0$ 

for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_i = (\hat{r}, r_{i-1})$ 
    if ( $i = 1$ )
         $p_i = r_{i-1}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = (\rho_i / \rho_{i-1}) / (\alpha_{i-1} / \omega_{i-1})$ 
         $p_i = r_{i-1} + \beta_{i-1} (p_{i-1} - \omega_{i-1} v_{i-1})$ 
    end if
     $\hat{p} = M^{-1} p_i$ 
     $v_i = J\hat{p}$ 
     $\alpha_i = \rho_i / (\hat{r}, v_i)$ 
     $s_i = r_{i-1} - \alpha_{i-1} v_i$ 
    if ( $\|s\| \leq tol$ )

```

```

         $x_i = x_{i-1} + \alpha_i p$ 
        stop
    end if
     $\hat{s} = M^{-1} s_i$ 
     $t = J \hat{s}$ 
     $\omega_i = (t, s) / (t, t)$ 
     $x_i = x_{i-1} + \alpha_i \hat{p} + \omega_i \hat{s}$ 
     $r_i = s_i - \omega_i t$ 
    if( $\|r\| / \|r_o\| \leq tol$ )
        stop
    else
         $x_{i-1} = x_i$ 
         $\alpha_{i-1} = \alpha_i$ 
         $\omega_{i-1} = \omega_i = \rho_{i-1} = \rho_i$ 
    end if
end for

```

No algoritmo acima, a operação representada pelos parênteses, com dois vetores separados por vírgula, denota o produto escalar desses dois vetores. Pode-se observar do algoritmo anteriormente descrito que, para cada iteração do *Bi-CGSTAB*, são realizados quatro produtos internos, seis operações do tipo SAXPY ($x + \alpha y$), duas operações do tipo $y = M^{-1}x$ e dois produtos matriz-vetor. De todas estas operações, a que envolve maior esforço computacional é a última. Caso o número de iterações seja elevado, esta operação pode aumentar consideravelmente o tempo computacional.

3.3.7 Esquema de passo de tempo variável

O valor do intervalo de tempo deve ser escolhido de modo que produza soluções dentro da precisão desejada para o problema em questão. O uso de passos de tempo fixos acaba

deixando a simulação bastante lenta. Além disso, o grau de refino da malha também influencia na escolha do Δt .

Uma alternativa é utilizar esquemas de passos de tempo variáveis, que tornam mais rápida a simulação e ao mesmo tempo mantém os erros de truncamento aceitáveis. No presente trabalho foi utilizado o esquema descrito em Coutinho (2002). Em cada nova iteração no tempo, o intervalo de tempo Δt^{k+1} é calculado de acordo com a seguinte equação:

$$\Delta t^{k+1} = \min \left\{ \Delta t_{max}, \max \left\{ \Delta t_{min}, \frac{\Delta t^k}{2}, \min \left\{ \Delta t_Z, \Delta t_P, 2\Delta t^k \right\} \right\} \right\} \quad (3.137)$$

onde

$$\Delta t_Z = \frac{\Delta t^k \Delta Z_{lim}^p}{\Delta Z_{max}^p} \quad e \quad \Delta t_P = \frac{\Delta t^k \Delta P_{lim}}{\Delta P_{max}} \quad (3.138)$$

Nesta equação alguns parâmetros são atualizados a cada instante de tempo enquanto que outros são definidos no início da simulação com valores variando de acordo com o caso estudado:

a) Parâmetros definidos no início da simulação:

- Δt_{max} é o máximo intervalo de tempo permitido;
- Δt_{min} é o mínimo intervalo de tempo permitido;
- ΔZ_{lim}^p é o valor limite que a fração mássica da fase pode variar de uma iteração para outra;
- ΔP_{lim} é o valor limite que a pressão pode variar de uma iteração para outra.

b) Parâmetros atualizados a cada instante de tempo:

- Δt^k é o intervalo de tempo da iteração anterior;
- ΔZ_{max}^p é a máxima variação da fração mássica da fase permitida com relação ao tempo atual;

- ΔP_{max} é a máxima variação da pressão permitida com relação ao tempo atual;
- Δt_Z é o valor do passo de tempo calculado a partir da variação da fração mássica;
- Δt_P é o valor do passo de tempo calculado a partir da variação da pressão.

A ordem de grandeza destes parâmetros deve respeitar a seguinte expressão:

$$\Delta t_{min} \leq \frac{\Delta t^k}{2} \leq \min \{ \Delta t_Z, \Delta t_P \} \leq 2\Delta t^k \leq \Delta t_{max} \quad (3.139)$$

Os valores dos parâmetros definidos no início da simulação são listados na Tabela 3.1. Já aqueles calculados a cada instante de tempo variam no decorrer da solução transiente.

Tabela 3.1: *Parâmetros utilizados nas simulações.*

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Δt_{max}	0,1	s
Δt_{min}	1×10^{-9}	s
ΔZ_{lim}^p	0,1	–
ΔP_{lim}^p	10132,5	Pa

3.3.8 Condições de contorno

A condição de contorno para os volumes de controle da malha adjacentes às fronteiras é de fluxo nulo, ou seja, admite-se que as fronteiras são impermeáveis em todo o domínio. Assim, a interação com o ambiente externo ao meio poroso se dá por meio da especificação dos termos fonte/sorvedouro q^p usados no cálculo de m^p na equação de balanço, Equação (3.24). Esta condição se aplica somente aos volumes da malha localizados onde existem entradas de resina ou saídas de ar. Nestes pontos, admite-se que as vazões das fases são proporcionais às suas mobilidades:

$$\frac{q^r}{\lambda^r} = \frac{q^a}{\lambda^a} = \frac{q^T}{\lambda^T} \quad (3.140)$$

onde o sobrescrito T denota a mobilidade total das fases: resina e ar.

Nos pontos de injeção, considera-se o fluxo de apenas uma fase: a resina. A condição de operação pode ser de vazão de injeção ou pressão de injeção constantes. No primeiro caso, a vazão da resina injetada é prescrita e a vazão da fase ar é nula:

$$q^r = q_{prescrita} \quad (3.141)$$

$$q^a = 0 \quad (3.142)$$

No segundo caso, a vazão de injeção mantém a pressão em valores pré-determinados:

$$P^r = P_{prescrita} \quad (3.143)$$

Nas saídas de ar, pode-se definir a vazão total (resina + ar) como condição de contorno:

$$q^T = q_{prescrita} \quad (3.144)$$

$$q^p = \frac{\tilde{\lambda}^p}{\tilde{\lambda}^T} q^T \quad (3.145)$$

A mobilidade das fases foi obtida a partir da Equação (3.25), assumindo que as permeabilidades relativas das fases são dadas pelas Equações 2.21 e 2.23.

Geralmente, em processos RTM, a condição de operação na saída de ar é de pressão prescrita.

$$P^p = P_{prescrita} \quad (3.146)$$

CAPÍTULO 4

METODOLOGIA

O capítulo inicia descrevendo os casos de escoamentos radiais e retilíneos usados para a validação com soluções analíticas disponíveis na literatura. Em seguida, descreve-se um procedimento proposto para ajuste da permeabilidade em situações que geraram resultados indesejáveis. Logo após, são tratados os detalhes acerca da metodologia experimental e dos dados colhidos a partir dela que são empregados no presente trabalho para fins de comparação, assim como os casos envolvendo geometrias de formas irregulares. O capítulo termina descrevendo conceitos que se mostraram úteis ao desenvolvimento das ferramentas computacionais no presente trabalho.

Descreve-se sucintamente na Tabela 4.1 a relação de todos os casos estudados no presente trabalho, de acordo com o objeto desejado.

4.1 Validação do modelo proposto e metodologia numérica

A validação da metodologia e do modelo proposto é apresentada nesta seção para cada uma das condições de injeção de resina comumente utilizadas em processos RTM: injeção de resina com pressão ou vazão constante. Além da validação com resultados obtidos analiticamente, são realizadas comparações com soluções numéricas disponíveis

Tabela 4.1: *Relação dos casos estudados no presente trabalho de acordo com o objetivo desejado.*

Objetivo	Caso	Descrição
Validação analítica	A1	Escoamento radial com vazão constante
	A2	Escoamento radial com pressão constante
	A3	Escoamento radial com vazão constante e permeabilidade ajustada
	A4	Escoamento radial com pressão constante e permeabilidade ajustada
	A5	Escoamento linear com vazão constante
Aplicação experimental	E1	Escoamento radial com pressão prescrita
Geometrias irregulares	G1	Injeção pela borda
	G2	Injeção multiponto

na literatura.

4.1.1 Analítica

A validação com a solução analítica foi realizada para exemplos envolvendo escoamentos retilíneos e radiais. As equações utilizadas em cada caso (pressão de injeção constante ou vazão de injeção constante) foram descritas na Seção 2.2.2.2 e serão referenciadas conforme se fizerem necessárias. É importante destacar que as Equações (2.9), (2.10) e (2.11) são válidas enquanto a frente não alcança as bordas do molde.

4.1.1.1 Escoamento radial

Rudd *et al.* (1997), cujos modelos analíticos são descritos no final da Seção 2.2.2.3, ilustram a aplicação das equações analíticas para escoamentos radiais em um molde com cavidade circular com raio de 0,69 m, espessura de 4 mm e raio de injeção de 10 mm, como mostrado na Figura 4.1. A mesma geometria é utilizada no presente trabalho para investigar as condições de injeção com pressão e vazão constante.

Para as simulações, foi utilizada a malha cartesiana com 77 x 77 volumes que é mostrada na Figura 4.2. A mesma figura também apresenta a distribuição de pontos de injeção de resina e saídas de ar. Apesar de se tratar de uma malha cartesiana discretizando uma cavidade quadrada, este tipo de configuração é bastante utilizada para escoamentos radiais e fornece resultados bastante satisfatórios enquanto a frente de avanço não alcança as

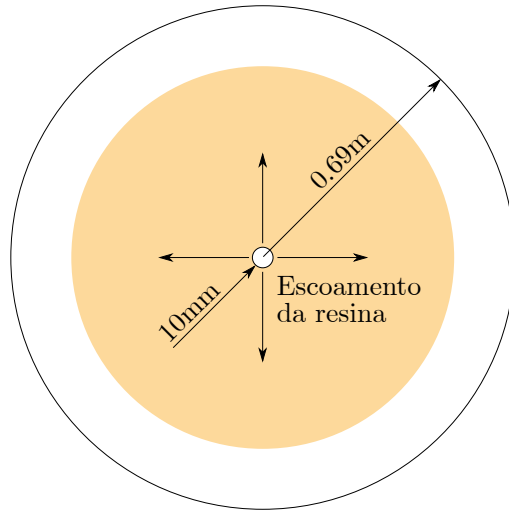


Figura 4.1: Geometria para escoamento radial. Fonte: adaptado de Rudd et al. (1997).

bordas, quando deve parar a simulação.

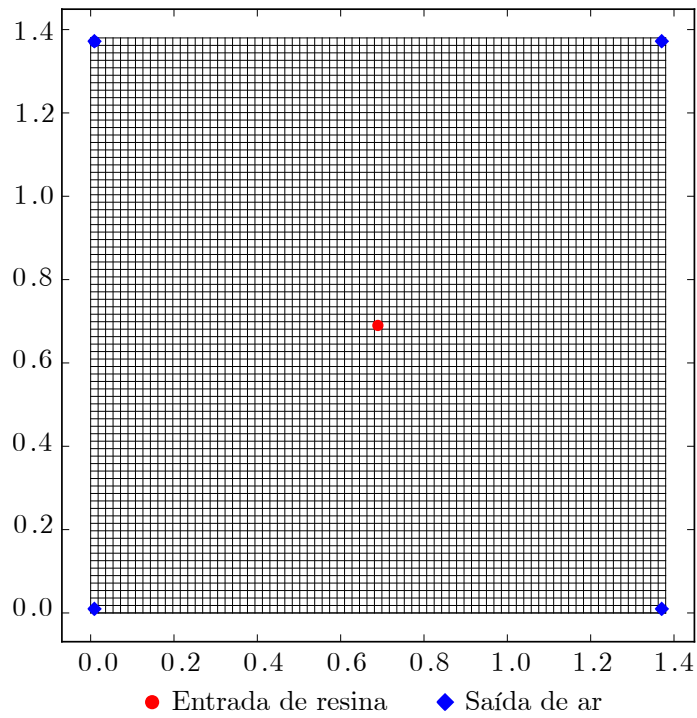


Figura 4.2: Malha numérica e distribuição de pontos de injeção de resina e saída de ar para os casos de escoamento radial.

a) Caso A1: Vazão de injeção constante

O primeiro caso envolve injeção de resina com vazão constante. As propriedades dos

materiais envolvidos e os parâmetros do processo para este caso são os mesmos do exemplo encontrado em Rudd *et al.* (1997) e podem ser vistos na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: *Parâmetros usados na comparação com a solução analítica para o caso de vazão de injeção constante. Fonte: Rudd et al. (1997).*

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Vazão de injeção, q_{inj}	$2,37 \times 10^{-5}$	(m^3/s)
Viscosidade, μ	0,425	$(Pa.s)$
Porosidade, ϕ	0,824	
Permeabilidade, K	$3,0 \times 10^{-9}$	(m^2)

b) Caso A2: Pressão de injeção constante

Os parâmetros para a condição de injeção de resina com pressão constante, são similares aqueles utilizados no caso anterior e estão listados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: *Parâmetros usados na comparação com a solução analítica para o caso de pressão de injeção constante. Fonte: Rudd et al. (1997).*

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Pressão manométrica de injeção, P_{inj}	$5,0 \times 10^5$	(N/m^2)
Viscosidade, μ	0,425	$(Pa.s)$
Porosidade, ϕ	0,824	
Permeabilidade, K	$3,0 \times 10^{-9}$	(m^2)

c) Casos A3 e A4

O caso A3 utiliza os mesmos parâmetros do caso A1 (vazão constante), o caso A4 é baseado no caso A2 (vazão de injeção constante). Os resultados são apresentados e discutidos no Capítulo 5. Detalhes acerca do processo de ajuste na permeabilidade são mostrados na Seção 4.1.2.

4.1.1.2 Escoamento retilíneo

Para escoamentos retilíneos (caso A5) com injeção de resina sob vazão constante, uma expressão analítica bastante simples pode ser obtida a partir da vazão de injeção, da

porosidade e do volume da cavidade do molde ocupada pelo reforço. Segundo Dai *et al.* (2004), esta expressão pode ser utilizada em casos uni, bi e tridimensionais. O tempo necessário para o total preenchimento dos espaços vazios pode ser calculado por:

$$t = \frac{V_{molde}\phi}{q} \quad (4.1)$$

onde q é a vazão volumétrica de injeção, ϕ é a porosidade do reforço e V_{molde} é o volume da cavidade do molde.

A solução analítica da posição da frente em um determinado instante de tempo pode ser facilmente derivada da Equação (4.1), resultando em:

$$x_f = \frac{qt}{\phi HL} \quad (4.2)$$

Para validar a solução numérica aplicada a escoamentos unidirecionais, foi utilizada uma adaptação do caso citado por Shojaei (2006), em um molde com cavidade retangular de dimensões mostradas na Figura 4.3. Os valores das grandezas usados na simulação são listados na Tabela 4.4.

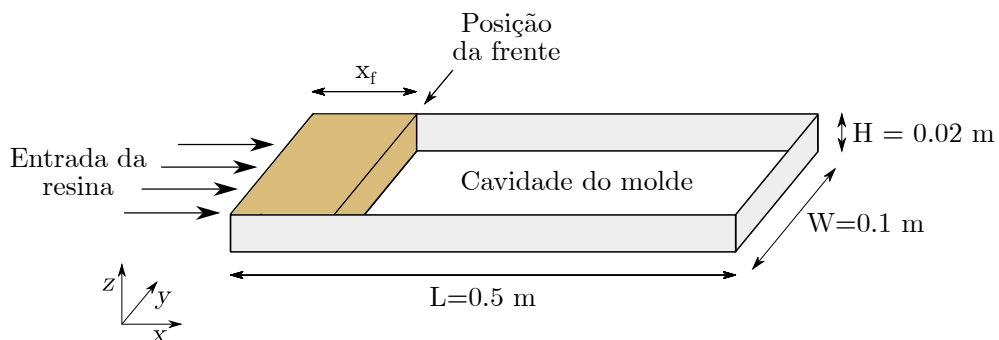


Figura 4.3: Geometria para o escoamento unidirecional. Fonte: adaptado de Shojaei (2006).

A malha com 50 x 10 volumes que discretiza a geometria e a distribuição de pontos de injeção de resina e saída de ar pode ser vista na Figura 4.4. Para simular a entrada de resina por toda a extremidade da cavidade, conforme descrito pela Figura 4.3, optou-se pela distribuição dos pontos em todos os volumes das duas extremidades. O valor pré-

Tabela 4.4: Parâmetros utilizados nas comparações com as soluções analíticas para o caso unidirecional. Fonte: Shojaei (2006).

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Vazão de injeção, q_{inj}	$4,5 \times 10^{-6}$	(m^3/s)
Viscosidade, μ	0,1	$(Pa.s)$
Porosidade, ϕ	0,7	–
Permeabilidade, K	$2,0 \times 10^{-10}$	(m^2)

fixado da vazão é dividido pela quantidade de volumes.

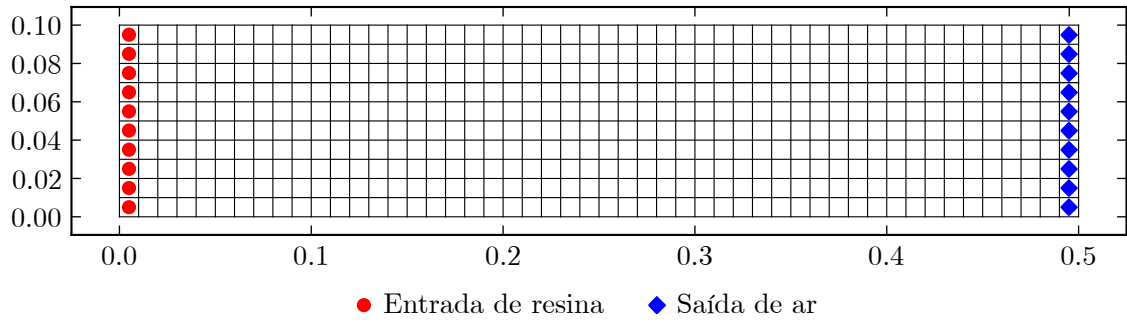


Figura 4.4: Malha numérica e distribuição de pontos de injeção de resina e saída de ar para o caso de escoamento retilíneo.

De acordo com Liu (2000), para escoamentos unidirecionais com vazão de injeção constante é possível calcular analiticamente a pressão de injeção de acordo com uma função linear da posição da frente:

$$P_{inj} = \frac{q_{inj} \mu x_f}{AK} \quad (4.3)$$

onde A é a área da seção transversal da cavidade.

4.1.2 Ajuste de permeabilidade

Alguns resultados dos casos simulados apresentaram divergências. A partir das análises dessas discordâncias, detalhadas no Capítulo 5, foi proposto um ajuste no valor da permeabilidade de acordo com o procedimento descrito a seguir:

- 1) Simulação do caso com a condição de injeção com vazão constante;

- 2) Avaliação do valor da pressão de injeção correspondente ao final do preenchimento;
- 3) Utilização do valor de P_{inj} calculado no item anterior para o cálculo do valor da permeabilidade ajustada, a partir da seguinte equação proposta:

$$K_{ajustada} = K_{inicial}^2 / \frac{q_{inj}\mu}{2\pi h P_{inj}} \ln \left(\frac{r_f}{r_{inj}} \right) \quad (4.4)$$

Para o caso experimental, descrito na Seção 4.2.1.1, foi realizado um estudo usando o método dos mínimos quadrados, isto é, buscando a minimização da soma dos quadrados dos resíduos que, para uma amostra com N valores, pode ser dada por:

$$S \equiv \sum_{i=1}^N (v_i^e - v_i^n)^2 \quad (4.5)$$

onde o sobrescrito *e* representa um valor experimental e *n* indica que o valor foi obtido numericamente. Neste caso o valor em consideração foi a posição da frente de resina.

4.2 Aplicação em casos experimentais

4.2.1 Experimentos com fluxo radial em cavidade retangular

O presente trabalho utilizou dados experimentais relatados por Luz (2011). Segundo o autor, os experimentos foram realizados visando o cálculo da permeabilidade dos reforços fibrosos a partir de escoamentos lineares e radiais, já discutidos na Seção 2.2.2.2. Os dispositivos utilizados são mostrados esquematicamente na Figura 4.5. A cavidade do molde, mostrada na Figura 4.6, tem 300 mm x 300 mm x 2 mm e entradas de resina e saídas de ar com raio de 2,29 mm.

Como fluido de injeção, Luz (2011) relata que utilizou um óleo de soja vegetal, refinado, de fabricação nacional (marca *Liza*), de baixo custo e facilmente encontrado no mercado, com massa específica de 0,914 g/cm³. O autor descreve que o reforço fibroso utilizado foi um tecido plano balanceado (0/90), de fibra de vidro-E (300 g/m²).

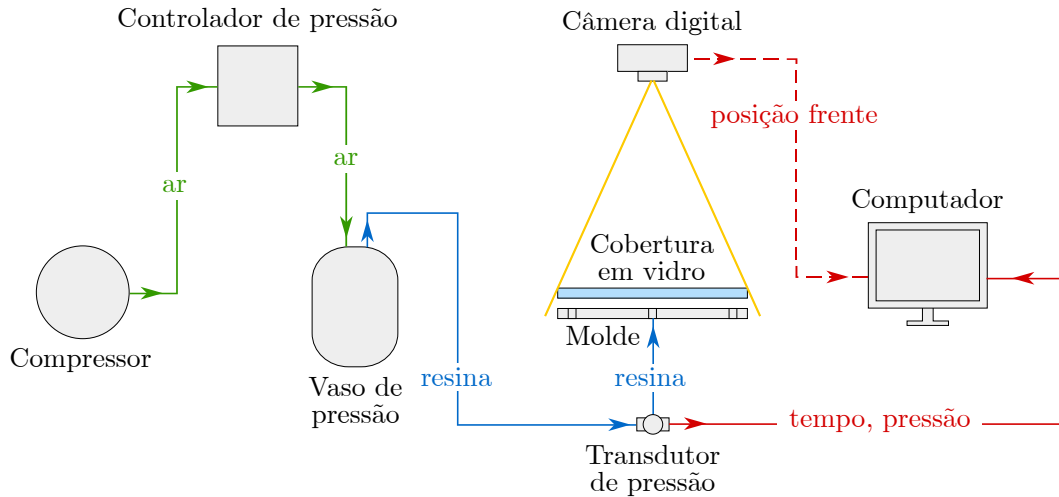


Figura 4.5: Equipamentos utilizados nos experimentos. Fonte: próprio autor.

4.2.1.1 Caso E1

Este caso é baseado em um dos experimentos descritos por Luz (2011). Os parâmetros da simulação são listados pela Tabela 4.5. O valor da permeabilidade foi ajustado em relação ao valor original, mencionado no trabalho de Luz (2011), pelo método dos mínimos quadrados, descrito na seção 4.1.2.

Tabela 4.5: Parâmetros do caso E1 baseado em experimento com pressão de injeção prescrita. Fonte: adaptado de Luz (2011).

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Pressão manométrica de injeção, P_{inj}	48300	(N/m^2)
Viscosidade, μ	0,0345	$(Pa.s)$
Porosidade, ϕ	0,58438	–
Permeabilidade, K	$2,0225 \times 10^{-11}$	(m^2)

Durante os experimentos, o cálculo da permeabilidade foi realizado sob a condição de operação com pressão constante. Vale salientar que, no decorrer do tempo, a pressão de injeção parte da pressão atmosférica local e evolui gradativamente para o valor prescrito, mantendo-se constante até o final do processo. Os estudos para cálculo da permeabilidade foram realizados na faixa em que os valores de pressão não variam. A Figura 4.7 apresenta como evolui a pressão de injeção com o tempo para o caso selecionado. Por este gráfico, nota-se que a pressão parte da atmosférica (101325 Pa) e atinge o valor prescrito

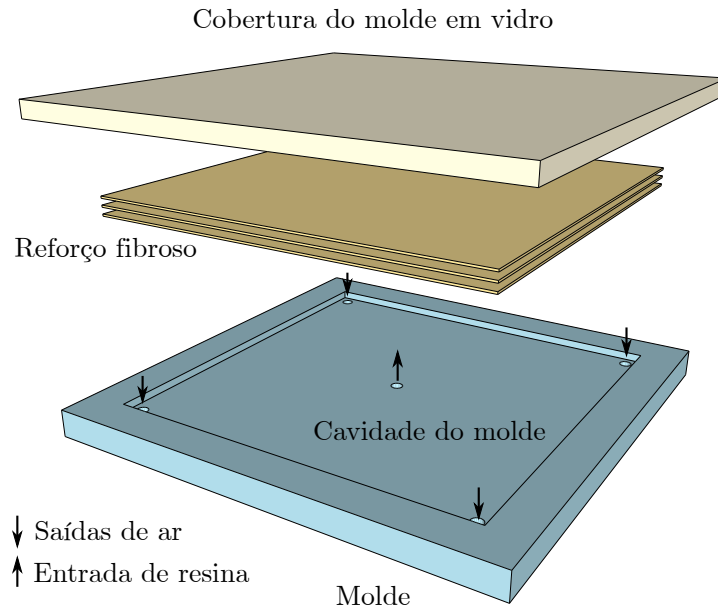


Figura 4.6: Estrutura do molde utilizado nos experimentos. Fonte: adaptado de Luz (2011).

(≈ 149 kPa) entre 150 e 200 s decorridos, permanecendo neste patamar até o final. Para as simulações foi utilizado o mesmo ajuste de permeabilidade do meio citado na Seção 4.1.2.

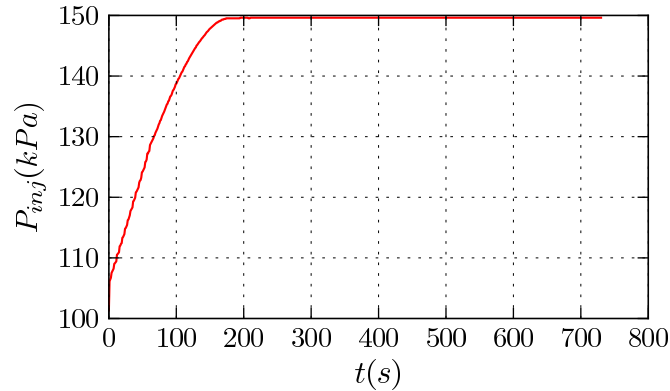


Figura 4.7: Pressão de injeção em função do tempo para o caso E1. Fonte: adaptado de Luz (2011).

Os valores de pressão para cada instante de tempo são fornecidos ao simulador por meio de um arquivo de texto puro (ascii), trazendo em cada linha o tempo e o valor da pressão correspondente. Nos experimentos em laboratório, a medição da pressão é feita por meio de um transdutor acoplado ao canal de injeção, bem próximo à entrada do molde.

4.3 Aplicação em casos com geometrias irregulares

Todas as malhas computacionais utilizadas para subdividir o domínio de estudo em volumes elementares nos casos estudados até o presente momento são do tipo cartesiana. Esta seção descreve a aplicação da metodologia utilizada em casos envolvendo geometrias com fronteiras irregulares, ou seja, envolvendo formas difíceis de serem discretizadas pela aplicação de geometrias retangulares.

4.3.1 Caso G1: injeção pela borda

Este caso envolve um problema físico semelhante àquele estudado no caso de escoamento retilíneo, mostrado na Seção 4.1.1.2, com vazão constante de resina e saída de ar localizadas nas fronteiras de extremidades opostas longitudinalmente. A geometria utilizada no caso atual tem profundidade de 2 mm e fronteiras irregulares, como mostra a Figura 4.8, referente ao esquema do problema físico. Como este se trata de um caso hipotético, os parâmetros também são similares aos utilizados no caso apresentado na Seção 4.1.1.2, com exceção da vazão de injeção, que aqui é de $3,5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$. Os parâmetros são listados na Tabela 4.6

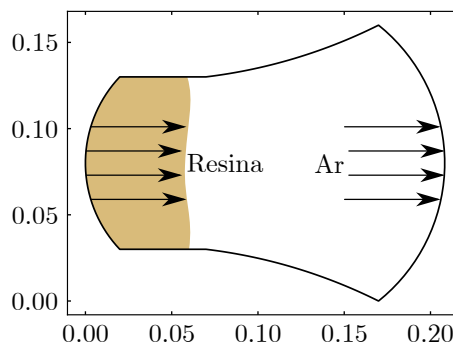


Figura 4.8: Geometria de fronteiras irregulares com entrada de resina e saída de ar em extremidades opostas (caso G1).

Para discretizar o domínio foi gerada uma malha coincidente com as fronteiras, contendo 44 x 35 volumes elementares, ilustrada na Figura 4.9. A figura também mostra esquematicamente a distribuição de entradas de resina e saídas de ar localizadas nas duas

Tabela 4.6: *Parâmetros utilizados na simulação para o caso G1, similares aos da tabela 4.4.*

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Vazão de injeção, q_{inj}	$3,5 \times 10^{-7}$	(m^3/s)
Viscosidade, μ	0,1	$(Pa.s)$
Porosidade, ϕ	0,7	–
Permeabilidade, K	$2,0 \times 10^{-10}$	(m^2)

extremidades opostas da cavidade. O valor da vazão de injeção em cada um dos volumes de controle que representam as entradas de resina é dividido pela quantidade de volumes, que neste caso é 35.

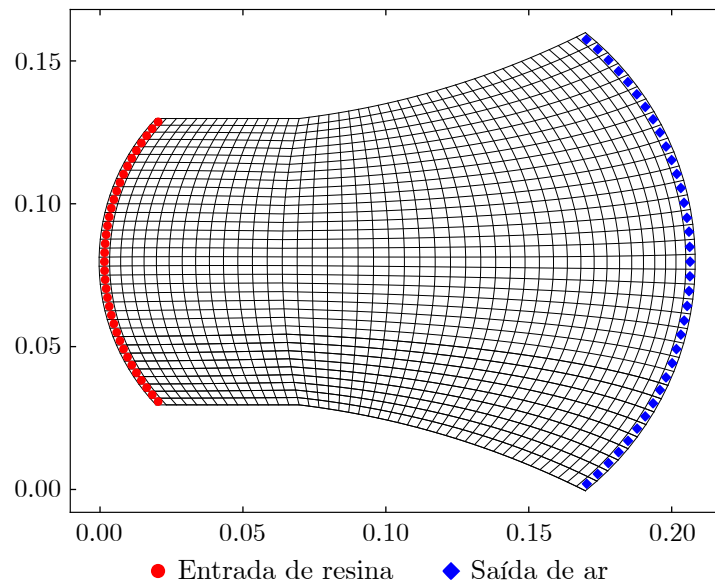


Figura 4.9: *Malha computacional referente ao caso G1.*

4.3.2 Caso G2: injeção multiponto

O segundo caso utilizando domínios com fronteiras irregulares estuda o preenchimento na geometria representada pela Figura 4.10. A profundidade da cavidade é de 2 mm. O preenchimento da resina deve ser realizado com pelo menos dois pontos de injeção de resina. Os demais parâmetros da simulação são baseados naqueles referentes ao caso E1 e podem ser vistos na Tabela 4.7.

A Figura 4.11 apresenta a malha generalizada com 49 x 31 volumes empregada nas

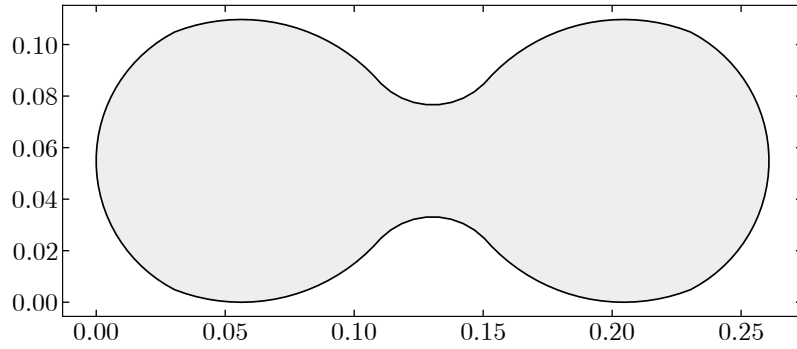


Figura 4.10: Geometria irregular a ser preenchida com no mínimo dois pontos de injeção de resina (caso G2).

Tabela 4.7: Parâmetros do caso G2, similares aos da tabela 4.5.

Parâmetro	Magnitude	Unidade
Vazão de injeção, q_{inj}	$1,2 \times 10^{-8}$	(m^3/s)
Viscosidade, μ	0,0345	$(Pa.s)$
Porosidade, ϕ	0,58438	–
Permeabilidade, K	$2,51 \times 10^{-11}$	(m^2)

simulações. Um dos objetivos deste caso foi verificar a utilidade do simulador na localização mais eficiente de pontos de injeção de resina. Para isso, foram testados três esquemas de distribuição de pontos, indicados por diferentes símbolos na Figura 4.11.

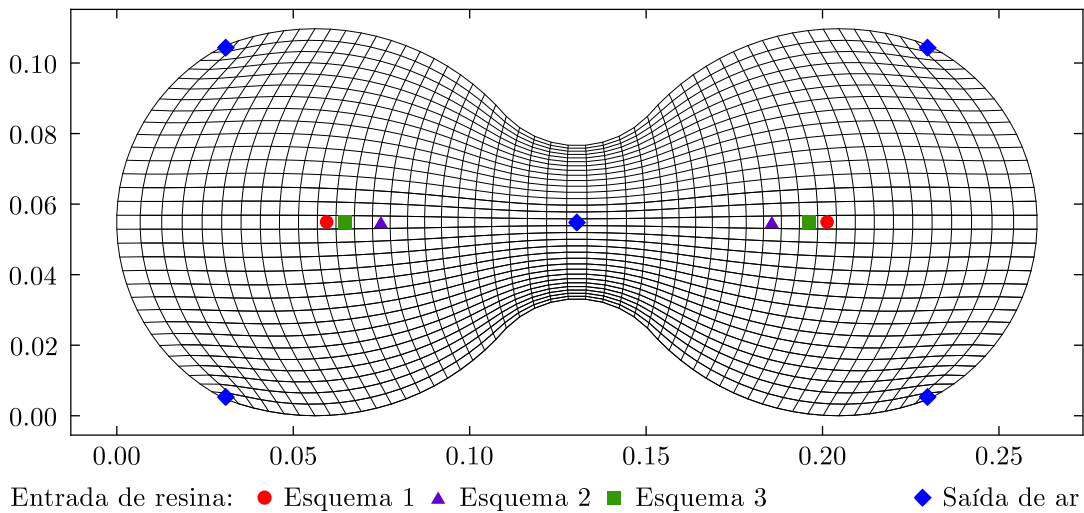


Figura 4.11: Malha com 49 x 31 volumes para o caso G2 e esquemas de distribuição de pontos testados.

4.4 Desenvolvimento do simulador

As áreas de conhecimento que constituem o foco de estudo do presente trabalho são:

- a) Modelagem de escoamentos multifásicos em meios porosos (mecânica dos fluidos e matemática aplicada);
- b) Métodos de discretização para solução das equações diferenciais parciais governantes (CFD);
- c) Métodos para solução de sistemas de equações algébricas (matemática numérica);
- d) Computação científica (desenvolvimento de software).

Os capítulos e seções anteriores foram dedicados às três primeiras áreas de conhecimento. O foco desta seção é descrever conceitos acerca das principais tecnologias utilizadas no desenvolvimento do aplicativo computacional do presente trabalho, dedicado à predição do fluxo de fluidos em meios porosos, com particular ênfase ao processo de manufatura de materiais compósitos por meio da técnica de Moldagem por Transferência de Resina (RTM).

4.4.1 Bibliotecas utilizadas

4.4.1.1 WxPython

As quatro principais bibliotecas (PyGtk, PyQt, Tkinter e wxPython) para desenvolvimento de interfaces gráficas com a linguagem Python são discutidas e comparadas no trabalho de Polo (2008), levando em consideração alguns aspectos relevantes como: aparência, licença de distribuição, documentação, controles disponíveis, ferramentas para desenvolvimento, entre outros. Segundo o autor, cada biblioteca possui vantagens e desvantagens, ficando a cargo do usuário decidir qual delas satisfaz mais suas necessidades, de acordo com os requisitos da aplicação a ser desenvolvida.

Segundo Rappin e Dunn (2006), o uso do wxPython é uma das maneiras mais fáceis e poderosas de se construir um programa com GUI. Hetland (2005) se refere ao wxPython como uma biblioteca completa e madura, que acabou se tornando a favorita até mesmo para o criador da linguagem Python, Guido van Rossum. No presente trabalho, os fatores que levaram à escolha do wxPython incluem o fácil aprendizado e a perfeita integração com a interface do MayaVi.

4.4.1.2 O Visualization Toolkit - VTK

A ferramenta para visualização 2D e 3D foi implementada usando o software de código aberto MayaVi, baseado no Visualization Toolkit (VTK). O VTK é um software para visualização de gráficos 3D e processamento de imagens, distribuído como sistema de código aberto e orientado a objetos. Oferece uma grande variedade de representação de dados incluindo conjuntos de dados poligonais, malhas estruturadas, retilíneas e não-estruturadas. Ainda dispõe de centenas de algoritmos para leitura, importação, exportação e processamento de dados (Schroeder *et al.*, 2000).

Conforme descrito em Schroeder *et al.* (2002), o VTK é dividido em dois subsistemas principais: o modelo gráfico e a *pipeline* de visualização. O modelo gráfico forma uma camada abstrata acima de uma biblioteca gráfica (como a OpenGL) para garantir a portabilidade. A *pipeline* é descrita logo a seguir.

a) A *pipeline* de visualização

A *pipeline* (ou rede) de visualização é uma sequência de passos em que ocorrem transformações sucessivas sobre os dados de entrada até a renderização final da imagem na tela. A Figura 4.12 ilustra a *pipeline* de visualização. Toda a rede é formada pela conexão de dois tipos de objetos: objetos de dados e de processo. Os objetos de dados fornecem acesso aos dados e os de processo realizam operações e transformações sobre eles.

Os objetos de dados podem representar vários tipos de informações. Um exemplo seria informações acerca de uma determinada geometria e respectiva topologia do modelo representado. A geometria seria definida por um conjunto de coordenadas que definem

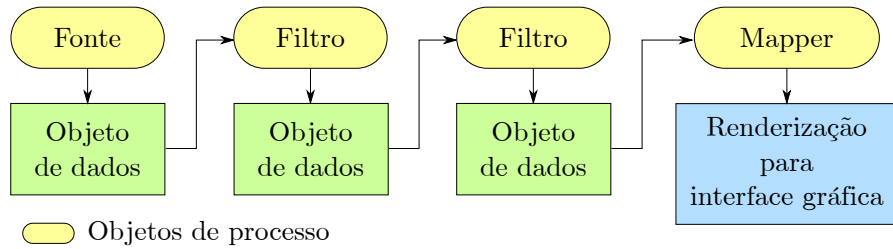


Figura 4.12: Pipeline de visualização. Fonte: adaptado de Schroeder et al. (2002).

pontos no espaço. A topologia indicaria a lógica pela qual estes pontos definem cada uma das células. Para cada ponto ou célula podem estar associados atributos escalares, vetoriais e/ou tensoriais.

Os objetos de processos podem ser classificados em: fontes, filtros e *mappers*. Os objetos do tipo fonte iniciam a *pipeline* fazendo a leitura de arquivos de dados externos e gerando objetos de dados. Os filtros, também chamados de objetos de processo, operam nos objetos de dados de entrada para produzir objetos de dados de saída. A *pipeline* termina nos *mappers* que recebem um ou mais objetos de entrada, e fazem o mapeamento para um determinado dispositivo ou biblioteca gráfica.

Os elementos de uma *pipeline* podem ser conectar de várias maneiras, inclusive com a presença de múltiplos objetos do mesmo tipo. A Seção 5.4.3.3, que trata da ferramenta de visualização desenvolvida no presente trabalho, mostra um exemplo da *pipeline* de visualização.

b) Arquivo *legacy* do VTK

Conforme consta em Schroeder e Kitware (2003), o *Visualization Toolkit* permite a leitura e a escrita em diversos formatos de arquivos de dados conhecidos. Além destes, há ainda dois estilos de formatos próprios do VTK: o *legacy* e o baseado em XML. O formato *legacy* é o mais simples. Nele os dados são organizados em uma sequência lógica. É simples de se ler e de escrever, tanto manualmente quanto via programa. O formato XML oferece mais flexibilidade e funcionalidades. No presente trabalho, tais vantagens do formato XML não se fizeram necessárias e o formato *legacy* foi a opção escolhida.

Ainda de acordo com Schroeder e Kitware (2003), o arquivo *legacy* do VTK pode ser

dividido em cinco partes, como pode ser visto no exemplo da Figura 4.13:

- 1) A linha de identificação que descreve a versão: “# vtk DataFile Version X.X”. A linha deve ser escrita exatamente como mostrado e o X.X indica a versão mais atual. No momento em que este texto está sendo escrito, a versão é 3.0;
- 2) O cabeçalho: consiste de uma linha com 256 caracteres. É utilizado para descrever os dados do arquivo e qualquer outra informação necessária;
- 3) O tipo do arquivo: *ASCII* ou *BINARY*. A linha deve conter uma dessas palavras para informar se o arquivo é ascii (texto puro) ou binário;
- 4) A estrutura do conjunto de dados: descreve a geometria e a topologia. Esta parte é mais extensa e pode incluir diversos campos. Inicia com uma linha contendo duas palavras-chave *DATASET* (conjunto de dados) e outra que descreve o seu tipo. Dependendo do tipo do conjunto de dados outras combinações de palavras-chave e dados definem os dados reais;
- 5) A descrição dos atributos: a seção começa com as palavras “POINT_DATA” ou “CELL_DATA”, seguidas por um número inteiro que especifica suas respectivas quantidades. Outras combinações de palavras-chave e dados definem o conjunto de atributos, que podem se tratar de escalares, vetores, tensores, normais, etc.

(1) # vtk DataFile Version 3.0
(2) Malha com nx por ny volumes
(3) ASCII
(4) DATASET STRUCTURED_GRID
DIMENSIONS nx+1 ny+1 1
POINTS (nx+1)*(ny+1) float
[(nx+1)*(ny+1) linhas de texto com as coordenadas (x,y,z) de cada ponto que define a malha]
(5) CELL_DATA nx*ny
SCALARS Campo float
LOOKUP_TABLE Default
[nx*ny linhas de texto com o valor escalar da propriedade de cada volume]

Figura 4.13: Modelo do arquivo vtk usado no presente trabalho.

Como o nosso objetivo é visualizar os campos de pressão e saturação da resina (avanço frente), em geometrias bidimensionais, mapeadas por malhas estruturadas coincidentes com as fronteiras, os arquivos gerados pelo simulador possuem o formato mostrado na Figura 4.13. Na referida figura, n_x e n_y são, respectivamente, as quantidades de volumes nas direções x e y ; “Campo” representa a grandeza cujos escalares estão armazenados no arquivo; os campos em vermelho que envolvem as grandezas n_x e n_y são calculados de acordo com as dimensões da malha.

Para compreender melhor como estes arquivos *legacy* armazenam a geometria, topologia e valores escalares, a Figura 4.14 (a) mostra um exemplo completo de um arquivo VTK com uma solução hipotética para uma malha com 3×3 volumes, como a mostrada na Figura 3.6. A Figura 4.14 (b) mostra a visualização da malha e do campo de escalares correspondente.

Optou-se pelo uso do padrão *vtk legacy* para armazenamento dos dados de saída para permitir ao usuário a alternativa de visualizar os seus resultados em quaisquer outros aplicativos compatíveis com o formato, como, por exemplo, o Paraview, Ahrens *et al.* (2005), um aplicativo de código-aberto e multiplataforma para análise de dados e visualização, também baseado no VTK.

O livro de Schroeder *et al.* (2002) é uma referência bastante completa sobre o VTK, inclusive introduzindo conceitos avançados sobre visualização que fogem ao escopo do presente texto.

4.4.1.3 MayaVi

Apesar de possuir algumas características que facilitam a sua utilização, o VTK não tem uma funcionalidade que permita o seu uso direto para visualização de dados. O usuário precisa aprender como usar a biblioteca e escrever seus programas em C++ ou alguma das linguagens suportadas para realizar a visualização (Ramachandran, 2001). O MayaVi oferece uma interface de uso muito mais simples, em um ambiente gráfico de alto-nível, para construção de visualizações a partir de dados científicos, permitindo aproveitar os recursos da biblioteca VTK.

```

# vtk DataFile Version 3.0
Malha com 3x3 volumes
ASCII
DATASET STRUCTURED_GRID
DIMENSIONS 4 4 1
POINTS 16 float

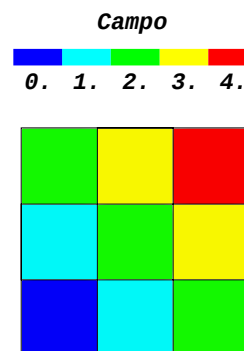
0.0 0.0 0.0
0.1 0.0 0.0
0.2 0.0 0.0
0.3 0.0 0.0
0.0 0.1 0.0
0.1 0.1 0.0
0.2 0.1 0.0
0.3 0.1 0.0
0.0 0.2 0.0
0.1 0.2 0.0
0.2 0.2 0.0
0.3 0.2 0.0
0.0 0.3 0.0
0.1 0.3 0.0
0.2 0.3 0.0
0.3 0.3 0.0

CELL_DATA 9
SCALARS Campo float
LOOKUP_TABLE Default

0.0
1.0
2.0
1.0
2.0
3.0
2.0
3.0
4.0

```

(a)



(b)

Figura 4.14: a) Exemplo de arquivo VTK legacy para malha de 3x3 volumes e b) sua respectiva visualização.

O MayaVi é puramente escrito na linguagem interpretada Python. Apesar do núcleo do VTK ser escrito em C++ e compilado, ele dispõe de interfaces escritas para outras linguagens, entre elas, Python. O MayaVi usa essa interface para construir uma “pipeline” de visualização do VTK. O VTK, por sua vez, utiliza algumas bibliotecas gráficas próprias para renderização em 3D, como a OpenGL (Beckmann *et al.*, 2004). A arquitetura do MayaVi em termos das linguagens de programação e bibliotecas utilizadas por ela é ilustrada na Figura 4.15.

Segundo seus criadores, Schroeder *et al.* (2000), o núcleo compilado do VTK, escrito em C++, concentra as estruturas de dados, algoritmos e as demais funções do sistema

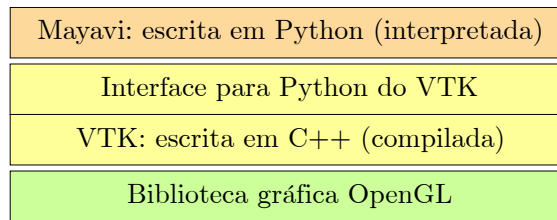


Figura 4.15: *Arquitetura de software do MayaVi em termos das linguagens de programação e bibliotecas utilizadas. Fonte: adaptado de Zelle (2004).*

que exigem rápido processamento. Assim, enquanto a camada compilada provê velocidade e eficiência, a interpretada permite flexibilidade e extensibilidade.

4.4.1.4 Outras bibliotecas

Outras bibliotecas utilizadas da linguagem Python foram a PIL (Python Image Library) para manipulação de imagens e DOM (Document Object Model) para acessar e modificar documentos XML. Também foi utilizado o Matplotlib, um pacote para geração de gráficos 2D em linguagem Python capaz de gerar imagens de alta qualidade. O Matplotlib permite saída em formatos vetoriais como PostScript, Scalable Vector Graphics (SVG) e PDF, além de suportar Tex e LaTeX para exibição de textos e expressões matemáticas (Hunter, 2007).

4.4.2 Detalhes do simulador numérico

Esta seção traz algumas informações sobre como foi implementado o código do solver numérico, que contempla toda a modelagem numérica e detalhes citados nas Seções 3.2 e 3.3. Para ilustrar como é organizada a estrutura das classes que compõem o solver numérico, a Figura 4.16 traz uma versão simplificada do seu diagrama de classes. O diagrama de classes representa graficamente os objetos que constituem um sistema e as relações entre eles. É um dos mais importantes diagramas da linguagem UML (Unified Modelling Language), usada para modelagem de sistemas orientados a objetos (Evans, 1998).

A Figura 4.16 mostra alguns dos tipos de relacionamentos possíveis entre objetos de um sistema “OO”, como generalização e composição. A generalização é fortemente

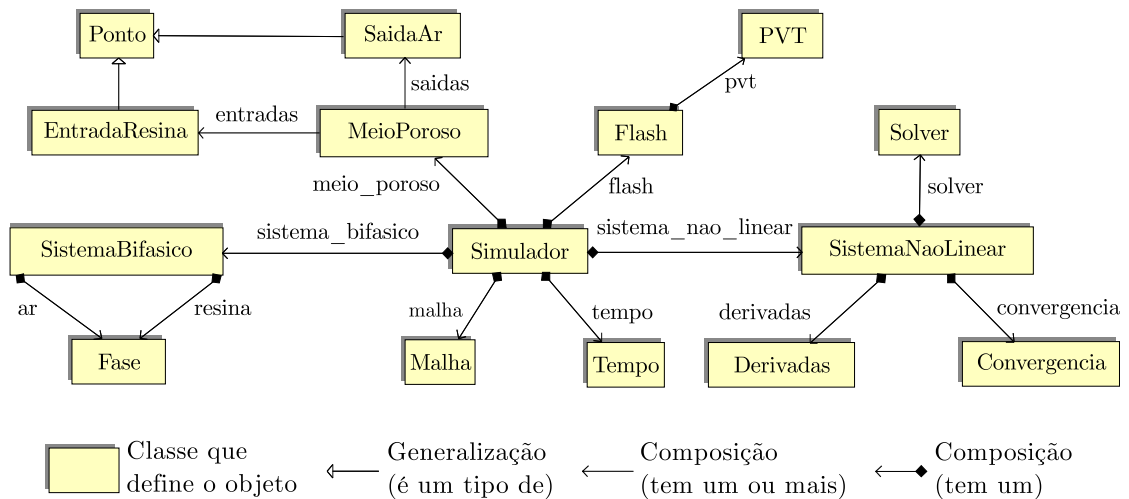


Figura 4.16: Diagrama de classes do solver numérico.

relacionada com o conceito de herança, Seção 2.3.4.1. No exemplo da mesma figura, os objetos *SaidaAr* e *EntradaResina* comungam propriedades e comportamentos do objeto *Ponto*. A relação de composição entre as classes *SistemaBifasico* e *Fase* indica que o sistema bifásico é composto por dois objetos do tipo fase (*ar* e *resina*). É importante fazer duas observações: podem existir outros tipos de relacionamentos entre objetos; o diagrama de classe é apenas um dos diversos utilizados para modelagem via UML de sistemas orientados a objetos.

A Figura 4.17 ilustra, em forma de fluxograma, os principais passos para a solução numérica via método de Newton com esquema de tempo variável.

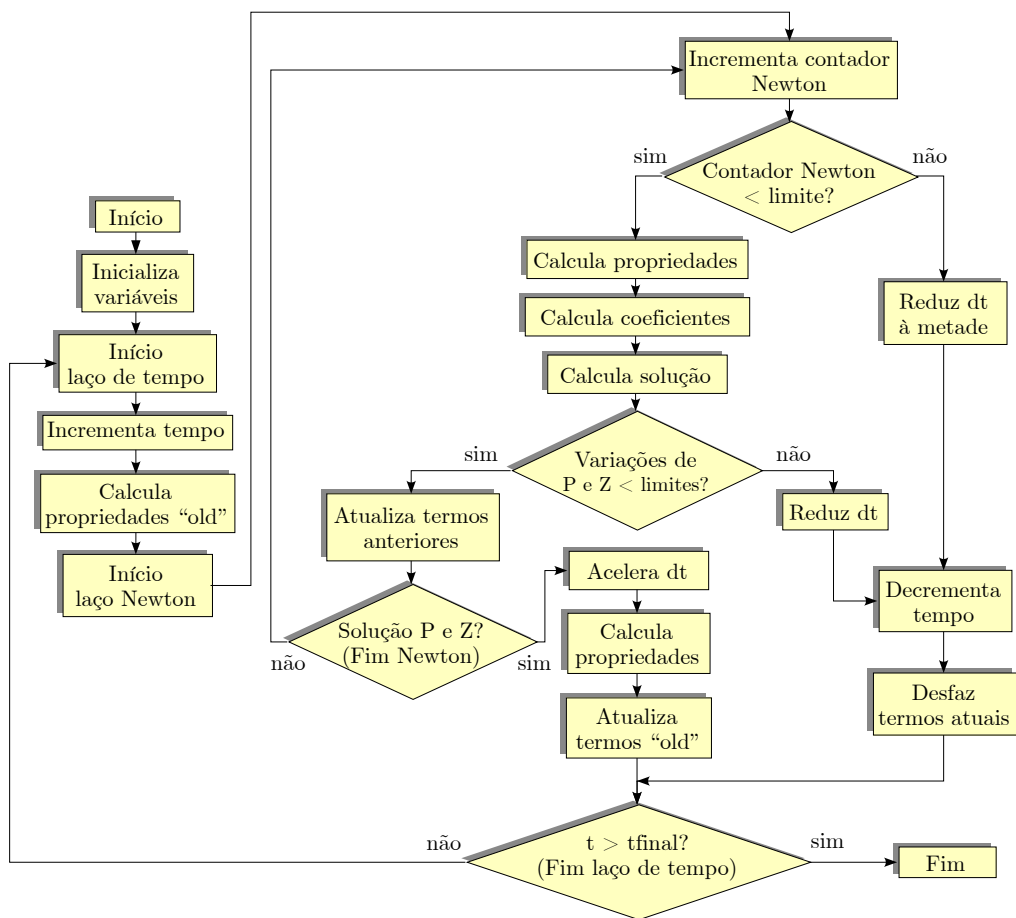


Figura 4.17: Fluxograma representando o algoritmo do solver numérico.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados alguns resultados obtidos no decorrer do presente trabalho. O capítulo começa com a validação da modelagem matemática e solução numérica discutidas no capítulo anterior em problemas cuja solução analítica é conhecida. Em seguida, são realizadas comparações com outras soluções numéricas encontradas na literatura. Também são realizadas investigações quanto à viabilidade do uso das simulações como ferramenta auxiliar em estudos experimentais. O capítulo termina descrevendo as características principais das ferramentas de pré e pós-processamento desenvolvidas.

5.1 Validação do modelo

5.1.1 Via solução analítica

5.1.1.1 Escoamento radial

a) Caso A1: Vazão de injeção constante

O primeiro resultado a ser utilizado como base de comparação é a posição da frente de escoamento. A frente de resina avança no tempo a uma determinada velocidade e

sua posição varia no decorrer do tempo de acordo com a Equação (2.9). A Figura 5.1 mostra a posição da frente de resina para três instantes de tempo do processo (25 s, 65 s e 135 s). Analisando a figura, pode-se perceber que os resultados obtidos com as soluções analítica e numérica são coincidentes. Além do mais, observa-se que os resultados plotados apresentam forma circular, o que é esperado quando o meio é isotrópico, como no caso estudado.

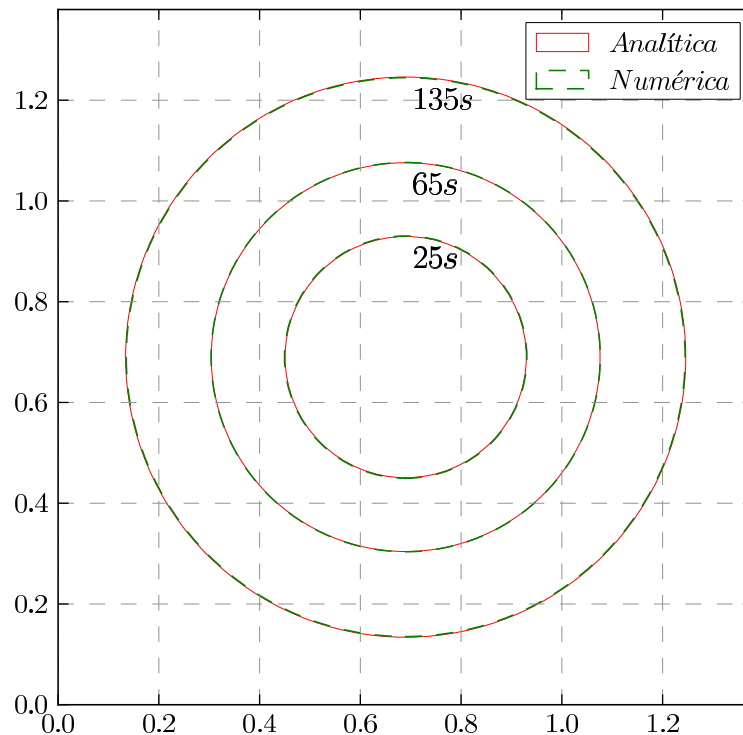


Figura 5.1: Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de vazão de injeção constante.

A evolução no decorrer do tempo da mesma grandeza (posição ou raio da frente de escoamento) para todo o processo de injeção do molde, pode ser visto na Figura 5.2. Percebe-se pela figura que a excelente concordância nos resultados mantém-se constante para todos os instantes de tempo. Para a construção deste gráfico foi considerado que o instante final da simulação coincide com o momento em que a resina toca a borda do molde.

O tempo total de preenchimento obtido com a solução analítica é de 207,54 s. Para a

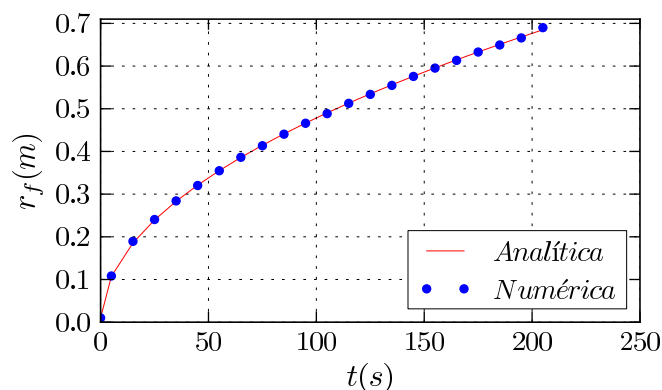


Figura 5.2: Evolução das soluções numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de vazão de injeção constante.

simulação com malha cartesiana, esse tempo é atingido quando a frente de resina toca as bordas da geometria, o que, segundo os resultados obtidos, ocorre em cerca de 205 s. O erro percentual é da ordem de 1,22%.

Outro parâmetro citado por Rudd *et al.* (1997) que pode ser calculado analiticamente é a pressão de injeção, Equação (2.11). Segundo o autor, que mostra os resultados obtidos analiticamente para este mesmo problema, no final do preenchimento do molde (quando a resina toca as margens da cavidade), o valor absoluto da pressão de injeção deve ser cerca de 668325 Pa. No presente trabalho, o valor obtido numericamente foi de 803495 Pa. Essa diferença é considerável e será discutida a seguir, quando são apresentados os resultados para escoamentos radiais com injeção sob pressão constante.

b) Caso A2: Pressão de injeção constante

A Figura 5.3 mostra, para 25, 65 e 135 s, a localização da frente do escoamento. A linha contínua mostra os resultados calculados pela aplicação direta da Equação (2.10), enquanto a linha tracejada mostra os resultados obtidos com a solução numérica. Percebe-se que, para esta condição de operação, os resultados apresentam discrepância que tende a aumentar à medida que o tempo passa. Este comportamento pode ser visto de maneira mais clara no gráfico da Figura 5.4, que abrange todo o tempo do processo.

Pela simulação, o preenchimento do molde se dá somente em 259 s, um tempo bem maior do que os 207,54 s do modelo algébrico. Neste momento, a vazão correspondente

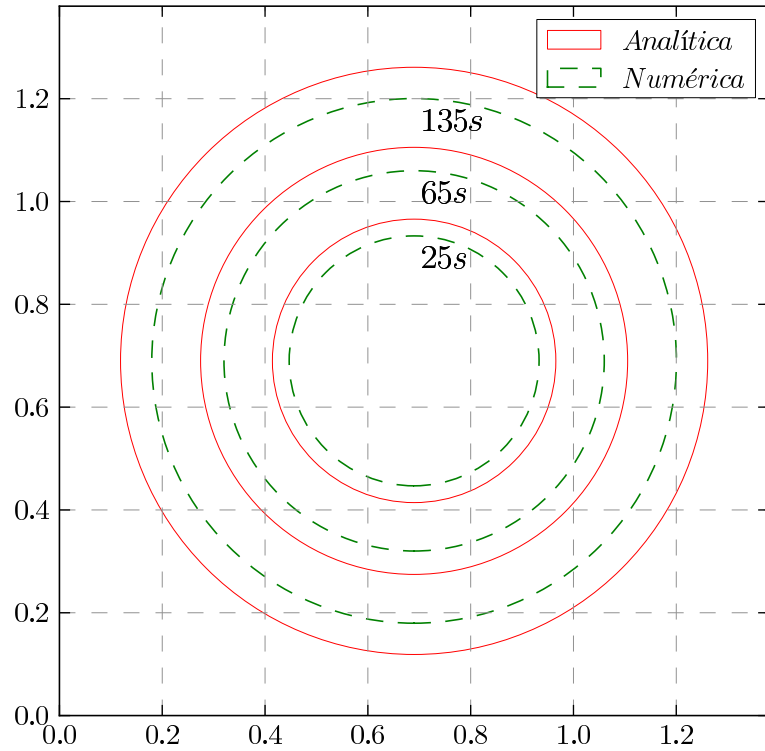


Figura 5.3: Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de injeção com pressão constante.

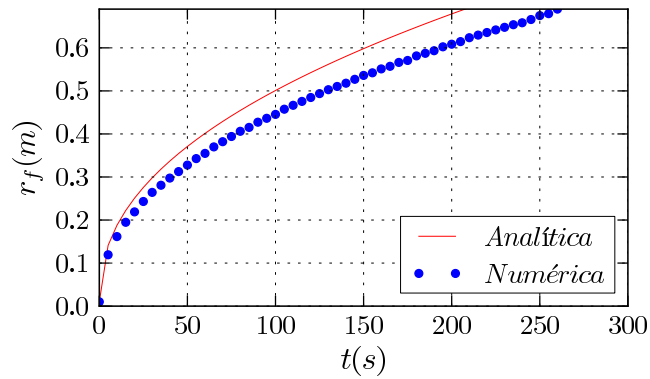


Figura 5.4: Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de injeção com pressão constante.

no ponto de injeção calculada numericamente ($1,69 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$) também mostra-se bastante diferente do valor analítico que, também de acordo com Rudd *et al.* (1997), sendo calculada pela Equação (2.11), deveria ser de $2,09 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$.

Observa-se que alguns resultados obtidos para este caso, assim como para o caso A1,

apresentaram divergências nos resultados. O trabalho de Phelan (1997) também relata a obtenção de resultados inesperados nas suas simulações em duas dimensões com vazão de injeção constante (pressões mais altas) e pressão de injeção constante (tempo de preenchimento maior). Abaixo são listadas as discordâncias dos resultados referentes aos casos A1 e A2:

- a) Para o caso de injeção com vazão constante, o valor da pressão de injeção correspondente calculado numericamente no ponto de entrada de resina é bem maior do que o modelo algébrico prevê;
- b) Quando a pressão de injeção é mantida constante, o avanço da frente de fluxo ocorre muito mais lentamente na solução numérica do que na solução exata. O que é evidenciado pela diferença no tempo de preenchimento do molde;
- c) No último caso, o valor da taxa volumétrica de injeção de resina necessária para manter o nível de pressão constante é menor no modelo numérico do que no modelo analítico.

Estas observações levam à hipótese de que, nas simulações, o escoamento ocorre de modo mais lento do que prevê o modelo analítico. Sob outro ponto de vista, as equações diretas que apresentaram resultados distintos aos numéricos, Equações (2.10) e (2.11), modelam o escoamento de maneira mais livre. As divergências sugerem que a causa pode estar relacionada com a permeabilidade do meio, uma vez que, como foi discutido na Seção 2.2.2.2, essa é a grandeza que indica a facilidade de um fluido para escoar no meio poroso. Um fato que corrobora essa idéia é a inexistência de disparidade entre os resultados numéricos e aqueles obtidos por meio da Equação (2.9), onde a grandeza K não aparece no equacionamento. As Equações (2.10) e (2.11), que dependem do valor de K do meio, produzem resultados distintos da solução numérica. Visando reduzir as divergências, foi proposto o ajuste para o valor da permeabilidade descrito na Seção 4.1.2.

Para justificar a necessidade de se corrigir a permeabilidade, pode-se verificar que, no modelo analítico proposto por Rudd *et al.* (1997), emprega-se a permeabilidade do meio poroso. No modelo matemático proposto nesta pesquisa, a permeabilidade dos fluidos é

proporcional à permeabilidade do meio, onde a variável de proporcionalidade é a permeabilidade relativa, já discutida na Seção 2.2.2.4. A permeabilidade relativa de uma fase, por sua vez, varia entre $0 \leq k \leq 1$, fazendo com que, ao longo do escoamento, a permeabilidade de um fluido possa ser menor ou igual à permeabilidade do meio, o que acarreta em uma diminuição na velocidade do fluido no interior do molde, com conseqüente aumento no tempo de preenchimento.

De fato, a proposta da existência da permeabilidade relativa é uma realidade física. A modelagem matemática utilizada nas simulações, envolve a presença de dois fluidos (ar e resina), e considera que a mobilidade da fase depende da sua permeabilidade relativa, que é função direta da saturação. Assim, nos volumes elementares que ainda não estão completamente saturados de resina ($S^r < 1$) a mobilidade da resina não é total. Essa situação é observada na região do domínio onde, em determinado momento, está passando a frente de resina. Como a mobilidade da fase multiplica a permeabilidade do meio no termo difusivo das equações de conservação, Equações (3.27) e (3.28), a permeabilidade do meio durante a simulação pode ser menor que o valor do modelo analítico, em cada volume que contém um mínimo volume de ar e que ainda não foi preenchido totalmente pela resina. A Figura 5.5 mostra um trecho de malha com volumes elementares em uma região do domínio por onde passa a frente de resina. As células com a cor vermelha são aquelas onde só existe resina. A cor azul escuro indica que só existe o ar. As outras cores apontam situações em que há frações de ar e resina. Pelo modelo utilizado, é nessas células em que a mobilidade da resina não seria a máxima.

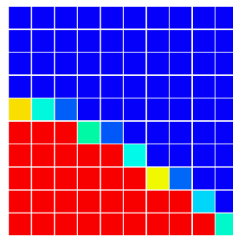


Figura 5.5: *Detalhe dos volumes na frente de avanço.*

Com o objetivo de investigar a influência do ajuste da permeabilidade na minimização das divergências entre os resultados analíticos e numéricos dos casos A1 e A2, foram propostos os casos A3 e A4 citados no final da Seção 4.1.1.1. O valor ajustado da perme-

abilidade foi estimado conforme descrito na Seção 4.1.2.

c) Caso A3: Vazão constante e ajuste de permeabilidade

Este caso utilizou os mesmos parâmetros listados na Tabela 4.2 do caso A1, mas com o valor de permeabilidade ajustado, segundo procedimento descrito na Seção 4.1.2, para $3,7241 \times 10^{-9} \text{ m}^2$. A simulação não produziu resultados distintos no tempo de preenchimento do molde, bem como na evolução da posição da frente de resina no tempo, conforme Figuras 5.6 e 5.7 que mostram valores praticamente idênticos aos mostrados nas Figuras 5.2 e 5.1, respectivamente. Contudo, o valor da pressão de injeção correspondente é de 666903 Pa, bem próximo ao valor analítico, de 668325 Pa, resultando em um erro percentual de apenas 0,2%.

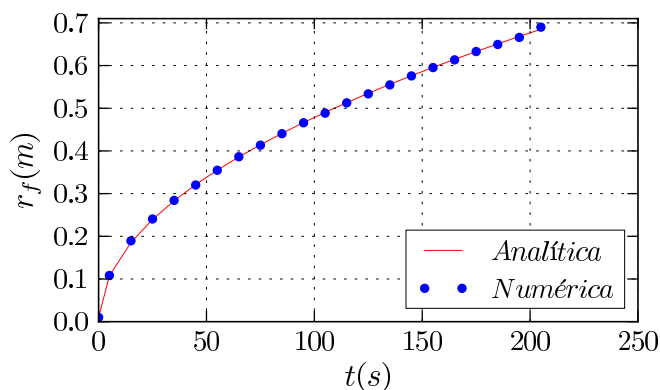


Figura 5.6: Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de vazão de injeção constante com a permeabilidade corrigida.

d) Caso A4: Pressão constante e ajuste de permeabilidade

Para a condição de P_{inj} constante, a utilização do valor corrigido da permeabilidade com os demais parâmetros de simulação do caso A2, Tabela 4.3, produz resultados bem mais próximos aos analíticos.

As Figuras 5.8 e 5.9 mostram as posições da frente de resina para o novo valor de K . Conforme observa-se nessas figuras, os resultados numéricos para esta permeabilidade são bem mais próximos às soluções exatas do que as plotadas originalmente, mostradas

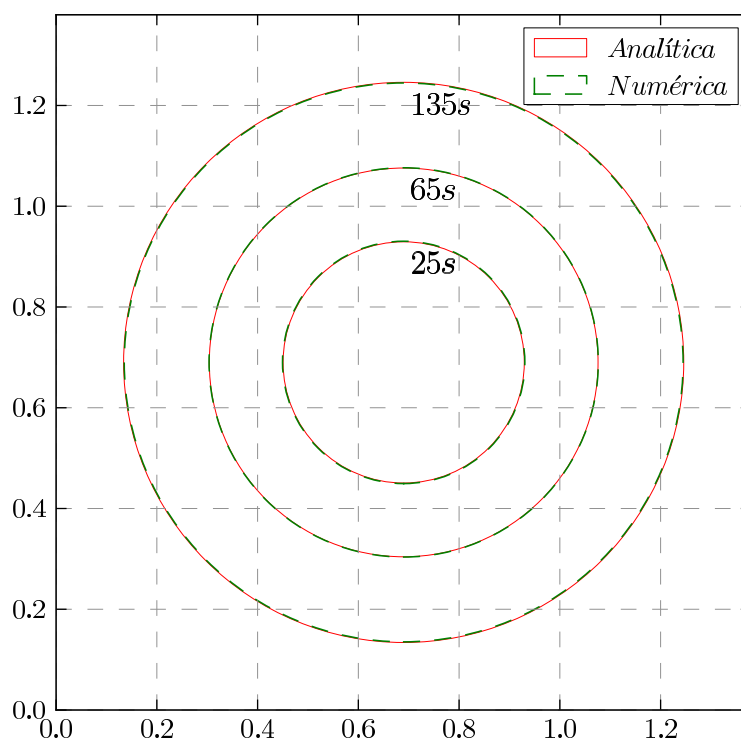


Figura 5.7: Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de vazão de injeção constante com a permeabilidade corrigida.

na Figuras 5.3 e 5.4. A média dos erros percentuais relativos entre os valores numéricos e analíticos obtidos com a permeabilidade corrigida é de 2,66%. O tempo de preenchimento foi de 209 s com uma vazão de injeção correspondente de $2,098 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$. Estes valores são bastante próximos aos citados por Rudd *et al.* (1997): 207,54 s e $2,09 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$. Os erros percentuais para estas grandezas são, respectivamente, 0,7 e 0,38%.

5.1.1.2 Escoamento retilíneo

A Figura 5.10 mostra a boa concordância entre os resultados da posição da frente do escoamento obtidos numérica e analiticamente. O gráfico aponta que o completo preenchimento da cavidade do molde se dá aproximadamente em $t = 155 \text{ s}$, como pode ser calculado pela aplicação direta da Equação (4.1). Na Figura 5.11 ilustra-se a comparação entre os valores de pressão de injeção calculados numericamente e os valores analíticos, calculados pela Equação (4.3). A média dos erros percentuais relativos entre os valores numéricos e analíticos para as Figuras 5.10 e 5.11 são, respectivamente, de 0,93 e 1,8%.

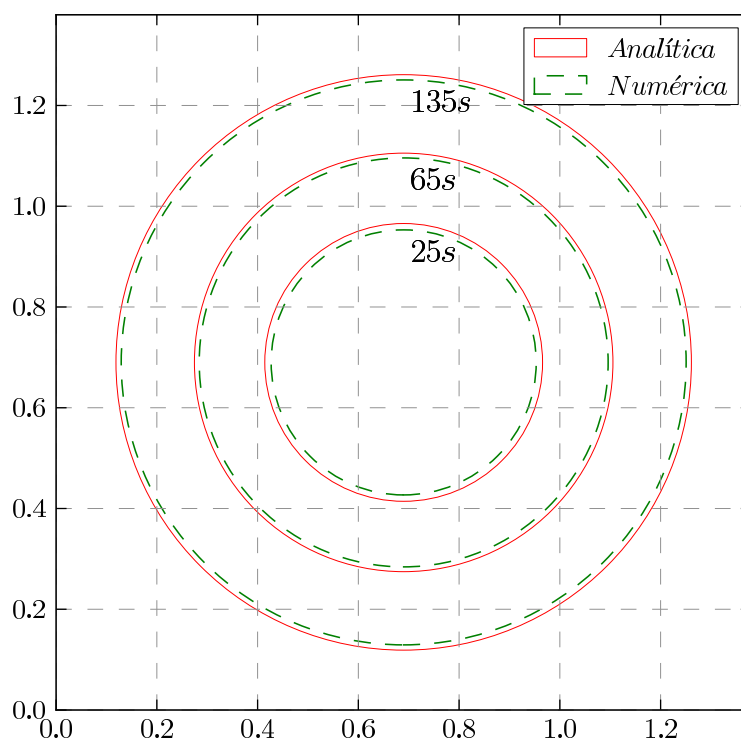


Figura 5.8: Comparação da posição e forma da frente do escoamento calculada numérica e analiticamente para três instantes de tempo para o caso de injeção com pressão constante e permeabilidade corrigida.

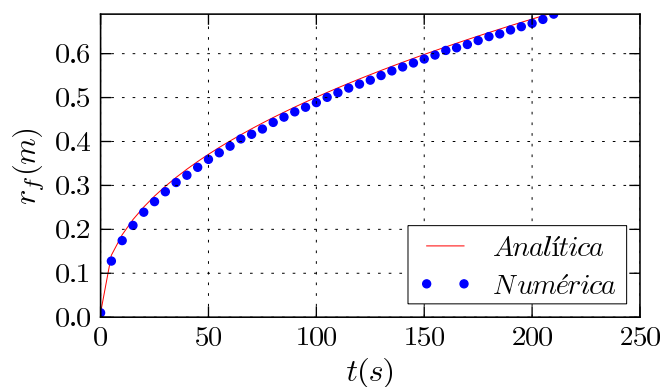


Figura 5.9: Evolução da solução numérica e analítica da posição da frente do escoamento no decorrer do tempo para o caso de injeção com pressão constante e permeabilidade corrigida.

5.2 Aplicação em casos experimentais

Os resultados listados a partir de agora são referentes ao caso E1 descrito no final na seção 4.2. Nas simulações, utilizou-se uma malha cartesiana com 75 x 75 volumes. A

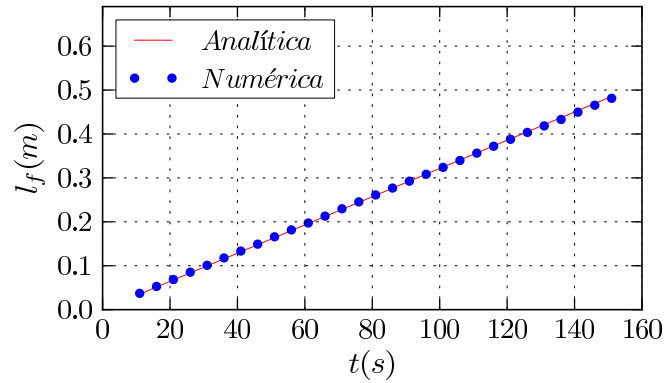


Figura 5.10: Evolução da posição da frente do escoamento linear no decorrer do tempo obtida numérica e analiticamente.

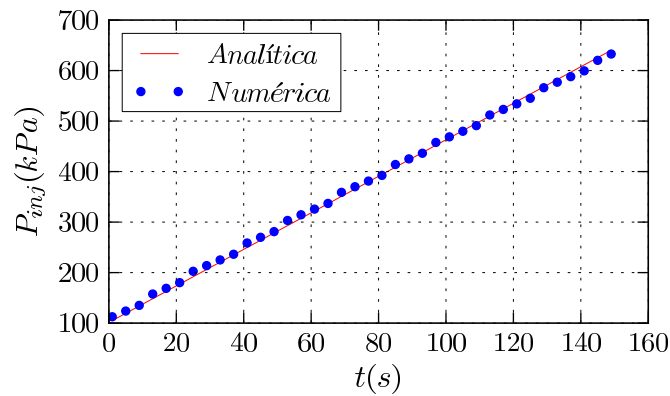


Figura 5.11: Comparação entre a curva de pressão de injeção no tempo, numérica e analítica.

Figura 5.12 mostra uma comparação entre os valores do raio da frente de resina calculados por meio dos experimentos com valores calculados numericamente. Percebe-se que existe pouca discrepância entre os resultados, principalmente nos instantes finais, a partir de 500 s. Pode-se atribuir, como prováveis causas para as diferenças apresentadas nos resultados, os erros experimentais ou ainda sutis heterogeneidades no meio que fazem com que ele não se comporte como totalmente isotrópico ou mesmo homogêneo.

Foi mencionado na Seção 4.2 que, no decorrer do experimento, a posição da frente do escoamento é captada por meio de imagens digitais registradas por uma câmera posicionada sobre a cobertura transparente do molde. Durante a simulação, uma maneira bastante eficiente de avaliar qualitativamente o avanço da frente é por meio da visualização de campos de saturação. A Figura 5.13 compara imagens digitais captadas nos

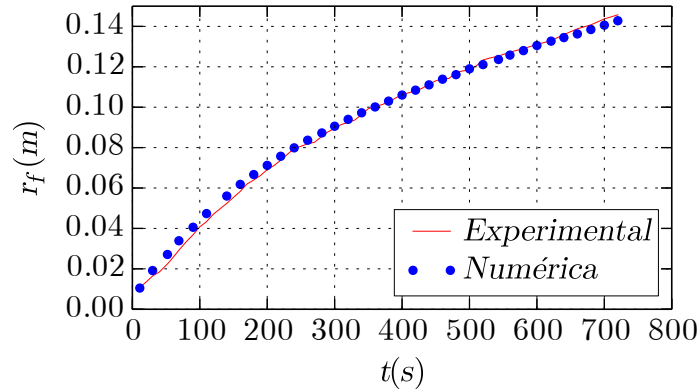


Figura 5.12: Comparação dos raios da frente de resina experimentais e numéricos.

experimentos com resultados numéricos do caso E1 em três instantes de tempo: 100, 300 e 600 s. A cor vermelha (interior do círculo) indica regiões da cavidade completamente preenchidas pelo fluido de injeção, ou seja, a saturação da fase injetada é igual a um ($S^p = 1$). A cor azul (região fora do círculo) indica locais ainda não atingidos pelo escoamento, onde existe apenas presença de ar nos espaços vazios do meio poroso. As regiões identificadas pelas cores intermediárias são regiões de transição, locais em que apenas uma parte do reforço está impregnada com o fluido de injeção.

O comportamento da frente de avanço radial de fluxo pode ser observado tanto nas imagens dos experimentos quanto nos resultados provenientes da simulação. As leves irregularidades no formato circular da frente observadas nos experimentos podem ser resultado de pequenas heterogeneidades na distribuição da porosidade ou permeabilidade do meio, devido, por exemplo, a uma maior ou menor concentração de fibras no local ou irregularidades na trama do reforço fibroso. Uma vez que há um meio perfeitamente homogêneo durante a simulação computacional, a frente apresenta um formato perfeitamente circular.

As imagens referentes à solução numérica mostradas na Figura 5.13 foram mapeadas com cinco cores, como pode ser visto na legenda da figura. No visualizador desenvolvido no presente trabalho, a partir do MayaVi, é possível especificar o número de cores utilizadas no mapeamento da imagem. A Figura 5.14 mostra uma comparação entre imagens geradas com cinco e duas cores. Nota-se que, para a avaliação da exata posição da frente de fluxo, a segunda opção pode se mostrar mais precisa, em especial se comparado com a imagem

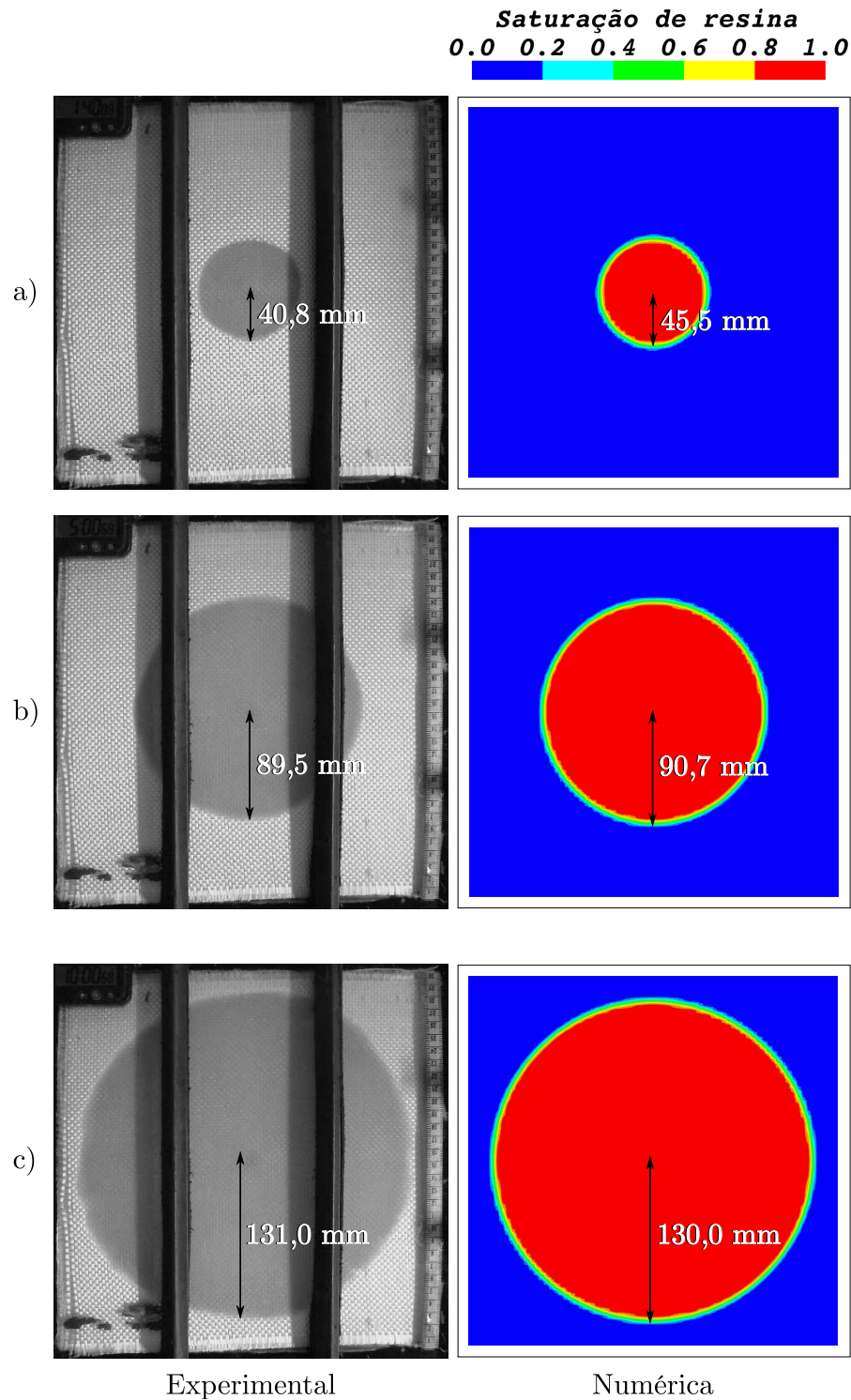


Figura 5.13: Análise da frente de avanço da resina referente ao caso E1. Imagens do experimento e campos obtidos via simulação numérica para os tempos: a) 100 s, b) 300 s e c) 600 s.

experimental. Todos os resultados referentes ao raio da frente de fluxo no presente trabalho são calculados por meio de imagens renderizadas com apenas duas cores, inclusive os valores mostrados na Figura 5.13.

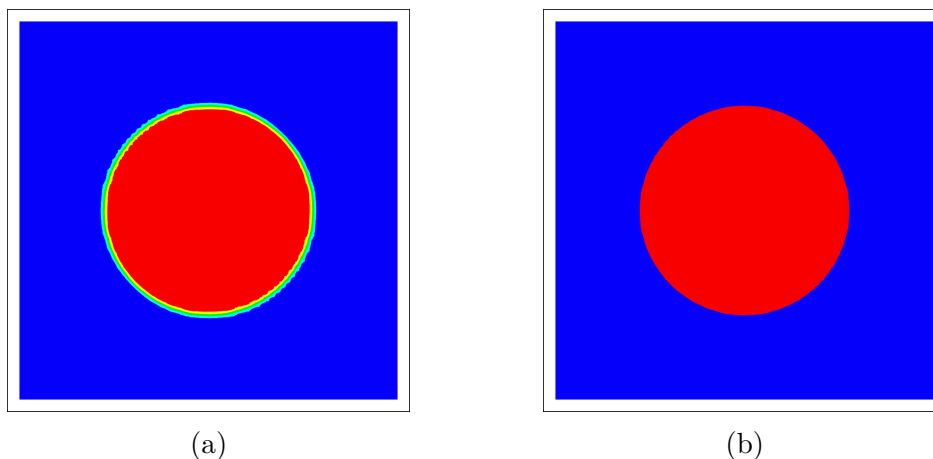


Figura 5.14: *Imagens representando campos de saturação geradas com a) 5 cores e b) 2 cores.*

Como abordado na Seção 2.3.1, os níveis de pressão envolvidos na etapa de injeção de resina constituem um importante parâmetro do processo. Além de influenciar no tipo de resina e material a ser usado como reforço, são decisivos no projeto do molde nas especificações do restante do ferramental utilizado. Altas pressões são indesejáveis pois encarecem o processo e potencializam problemas.

A Figura 5.15 apresenta a variação radial da pressão no meio, desde o ponto de injeção central até a borda ao longo da linha tracejada mostrada no esquema da Figura 5.16. A magnitude da pressão no gráfico é mostrada em seus valores absolutos, enquanto que o valor descrito na Tabela 4.5 representa a pressão manométrica de injeção. No simulador, a pressão é tratada em valores absolutos e, por este motivo, em todos os resultados obtidos a partir dele, os valores de pressão são exibidos dessa maneira.

Analisando os perfis de pressão para diferentes tempos na Figura 5.15, percebe-se que, no ponto de injeção ($x = 0,15$ m), a pressão é sempre a máxima verificada no interior do molde, para cada instante de tempo. Isto é esperado uma vez que é o gradiente de pressão, desde a injeção até a linha de frente de fluxo, que promove o escoamento do fluido até as saídas de ar. O gráfico também aponta que os gradientes mudam na direção radial: são maiores quanto mais próximo do ponto de injeção e menores em regiões mais distantes. Para $t = 100$ s, percebe-se que a pressão de injeção ainda não está no valor prescrito, o que só ocorre depois de 150 s, segundo Figura 4.7.

A condição inicial dentro do meio poroso é de ar sob pressão atmosférica. Em qualquer

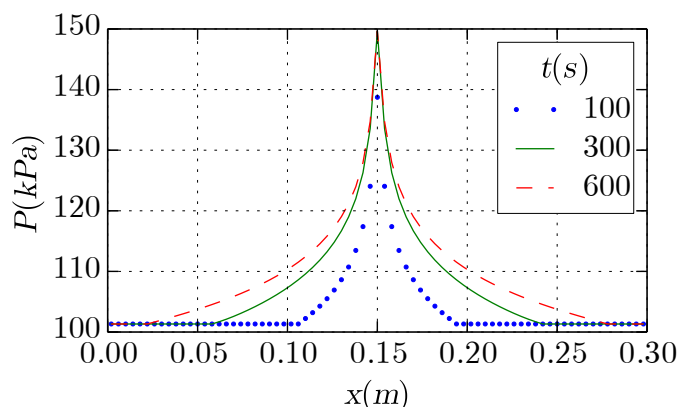


Figura 5.15: Variação da pressão dentro da cavidade do molde ao longo da linha horizontal que passa pelo ponto de injeção de resina.

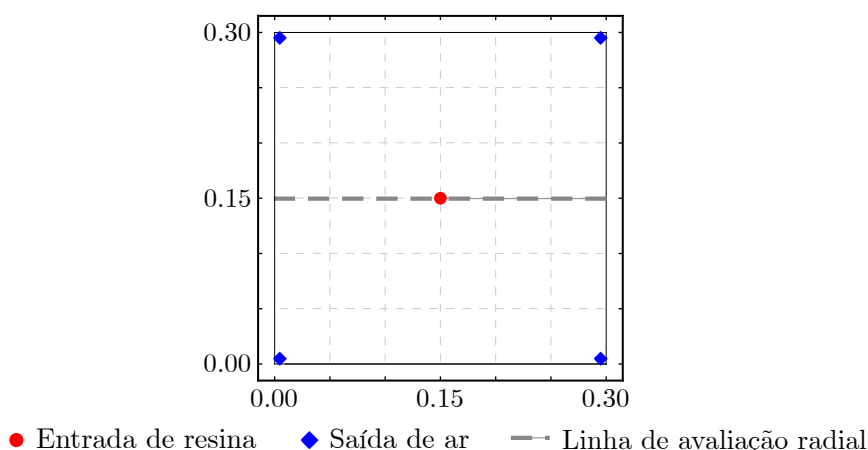


Figura 5.16: Linha horizontal passando pelo ponto de injeção de resina indicando as posições usadas para avaliar o campo de pressão.

ponto do domínio, a pressão não muda até que a frente de resina o alcance. Isto pode ser observado tomando como exemplo a curva de pressão para o tempo de 100 s. Como o campo de pressão muda aproximadamente em $x = 0,1$ e $x = 0,2$ m, pode se dizer que essa é a posição atual da frente neste instante de tempo. Para todos os tempos, o mesmo comportamento é observado: a pressão tende à pressão atmosférica à medida que x tende à posição das bordas ($x = 0,0$ e $x = 0,3$ m). Neste ponto a pressão do meio só é perturbada no instante de tempo em que a frente atinge a borda do molde.

A Figura 5.17 apresenta os campos de pressão obtidos na simulação para os tempos 100, 300 e 600 s. As imagens permitem visualizar os mesmos comportamentos da pressão discutidos até aqui. A cor azul escuro representa as regiões que estão sob pressão atmosférica.

rica (101325 Pa). O vermelho indica a atual pressão de injeção e as demais cores, apontam valores intermediários, que variam linearmente de acordo com a legenda. Analisando os campos de pressão e o mapa de cores é possível perceber, como anteriormente observado, que os gradientes de pressão são maiores nas proximidades do ponto de injeção, para qualquer tempo.

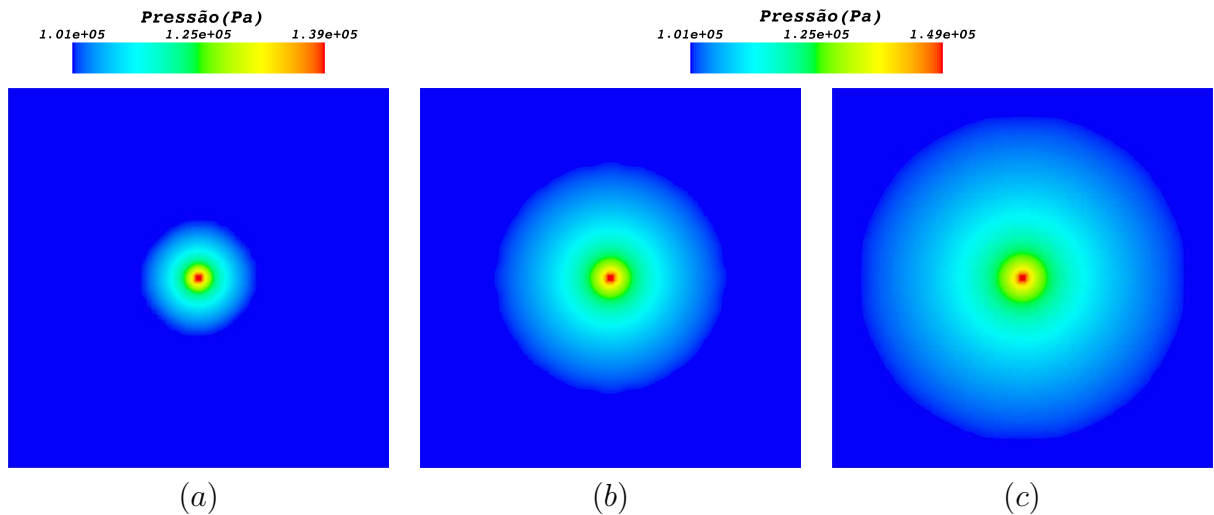


Figura 5.17: Campos de pressão obtidos numericamente para a) 100 s, b) 300 s e c) 600 s.

É possível observar na Figura 5.18 o campo de pressão e os gradientes em visão 3D, em perspectiva. A superfície plana retangular inferior representa a cavidade do molde. As linhas verticais indicam o nível de pressão em determinado ponto. A altura das linhas é diretamente proporcional ao valor da pressão naquele ponto. As cores são análogas às aquelas exibidas na legenda de cores mostrada na Figura 5.17.

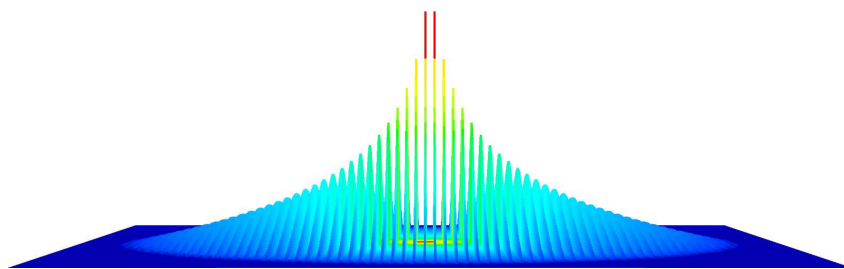


Figura 5.18: Visualização em 3D do campo de pressão em 600 s.

Como destacado anteriormente, o experimento foi realizado com pressão de injeção

constante. Na verdade, a pressão varia no início do experimento, mas tende a se estabilizar a partir de certo instante de tempo e a permanecer nesse patamar até o final do processo. A Figura 5.19 mostra a curva transiente de vazão com a qual o líquido é injetado no meio. Como a pressão manométrica no início do processo parte de próximo de zero, a vazão inicial é baixa e cresce até o momento em que a pressão se estabiliza (pouco mais de 150 s). A partir daí, para a pressão de injeção se manter no mesmo nível, a vazão deve sofrer uma leve e gradativa queda.

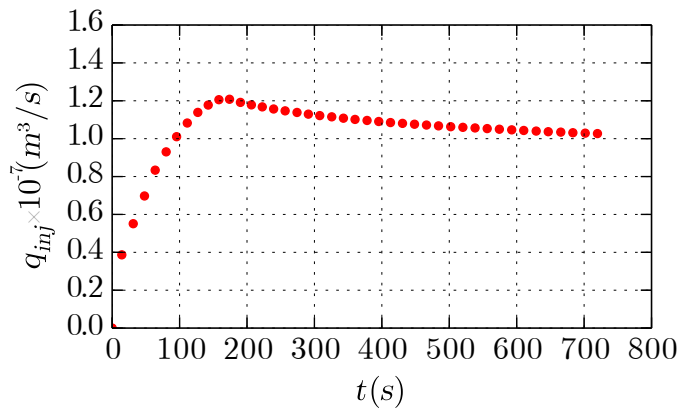


Figura 5.19: Vazão de injeção de resina calculada numericamente ao longo do tempo.

Esse comportamento da vazão pode ser facilmente explicado por meio da lei de Darcy, a qual relaciona o diferencial de pressão entre o ponto de injeção e algum ponto na frente de fluxo como sendo diretamente proporcional ao produto da distância entre os mesmos pela vazão de injeção:

$$dp \propto q_{inj} dr \quad (5.1)$$

Como a cada momento, a frente tende a se localizar cada vez mais distante do ponto de injeção, é fácil verificar que uma redução na vazão é necessária para que o diferencial de pressão se mantenha constante.

Para realizar medições dos níveis de pressão nos experimentos em laboratório, seria necessário utilizar sensores de pressão espalhados ao longo do molde, o que encareceria bastante o procedimento experimental. Isso torna evidente a vantagem do uso de simula-

ções como ferramenta auxiliar à pesquisa em laboratório.

5.3 Aplicação em casos com bordas irregulares

5.3.1 Caso G1: injeção pela borda

A evolução da posição da frente de resina para o caso de geometria irregular com entrada de resina e saída de ar nas extremidades opostas da cavidade pode ser vista na Figura 5.20 em três tempos diferentes. Observando esta figura, nota-se que a frente inicia com a forma da borda da cavidade por onde entra a resina. Com o tempo, devido ao perfil divergente da cavidade (no sentido do fluxo), a forma da frente se torna linear, perpendicular à direção do fluxo, como se observa-se na imagem referente ao tempo decorrido de 35 s. Para tempos maiores do preenchimento a frente alcança o final da cavidade de forma não uniforme, atingindo mais rapidamente os cantos. Verifica-se, neste momento, que a frente de resina assume a forma da borda dianteira.

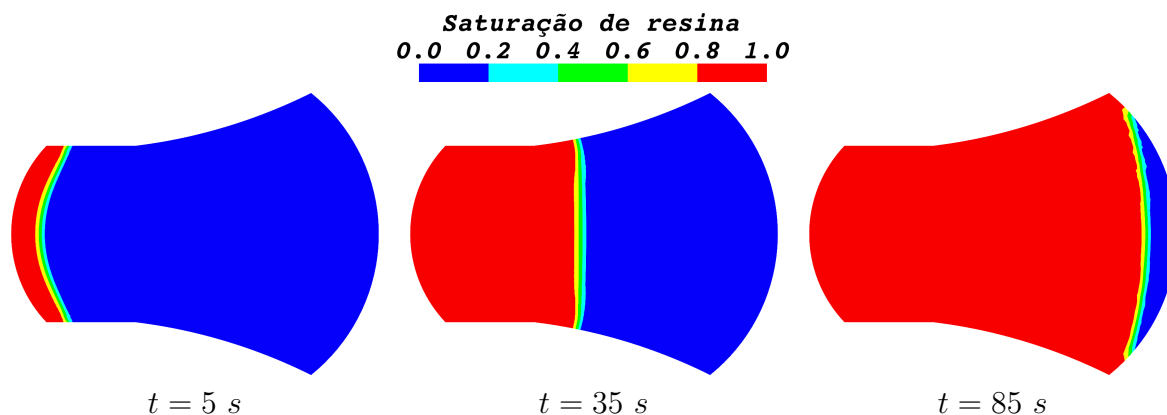


Figura 5.20: Posição da frente de resina para três instantes de tempo: 5, 35 e 85 s.

Como nos casos de escoamentos radiais e unidirecionais, o campo de pressão na cavidade está de acordo com a posição da frente. A Figura 5.21 mostra o campo de pressão na cavidade após 35 s de injeção.

Comparando a imagem da Figura 5.21 com a que mostra a frente de resina no mesmo instante de tempo, Figura 5.20, percebe-se que a pressão deixa de ser a atmosférica apenas

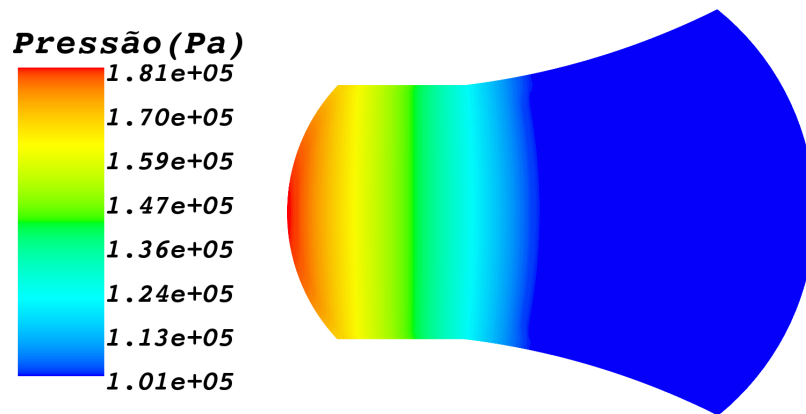


Figura 5.21: *Campo de pressão no interior da cavidade em $t=35$ s.*

onde existe escoamento de resina. Também é possível observar que a pressão é maior na região do domínio mais próxima à região de entrada de resina, com maiores valores no centro desta. Esse comportamento pode ser visto com mais clareza pela Figura 5.22, que detalha o campo de pressão na região de entrada de resina, destacada pela linha de volumes cujas bordas aparecem em cor preta. A cor vermelha indica que, no centro, as pressões são realmente mais elevadas que nos demais pontos do domínio. Para uma análise quantitativa mais precisa dos níveis de pressão nessa região, foi plotada na Figura 5.23 a curva de pressão ao longo da linha de injeção de resina. Essa medição, assim como outras discutidas a seguir, foram feitas com o apoio de linhas de avaliação visualizadas no esquema da Figura 5.24. Esse comportamento pode ser facilmente explicado considerando-se a distância entre os pontos de injeção e a frente de resina. Os pontos nas extremidades superior e inferior estão mais próximos à frente do que aqueles localizados na região central. A maior distância implica em uma quantidade maior de partículas a escoar, exigindo maiores índices de pressão naquele ponto.

Para investigar se a diferença de pressão perdura por todo o tempo do processo, utilizou-se os “sensores” mostrados na Figura 5.24. A evolução da pressão nestes dois pontos do domínio pode ser vista na Figura 5.25. A Figura 5.24 também mostra uma linha de avaliação traçada longitudinalmente em relação à geometria. O perfil da pressão ao longo dessa linha pode ser visto na Figura 5.26 para três instantes de tempo (5, 35 e 85 s). O comportamento observado em 35 s é de decréscimo linear desde os pontos de injeção ($x = 0$ m), onde a pressão é a máxima, até o valor da pressão atmosférica nas regiões onde existe apenas ar. Para o tempo de 85 s decorridos, o comportamento é linear

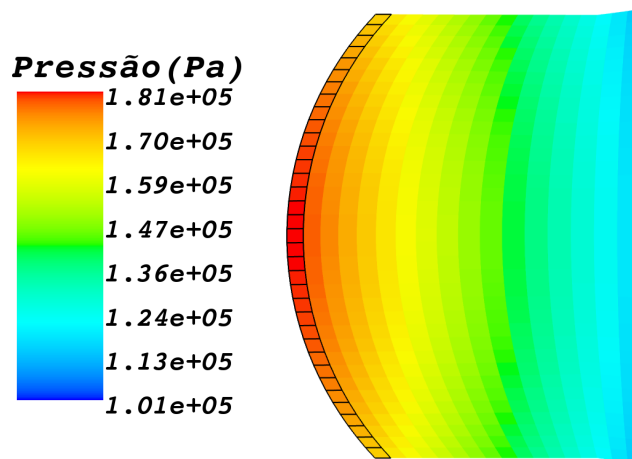


Figura 5.22: Detalhe do campo de pressão na região de injeção de resina em $t=35$ s.

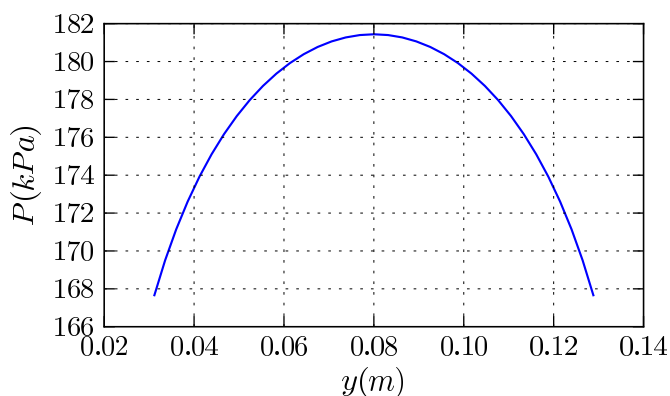


Figura 5.23: Curva de pressão na região de injeção de resina em $t=35$ s.

apenas até aproximadamente 0,1 m, quando uma leve curva é percebida evidenciando uma variação não linear na queda de pressão ao longo de x, semelhante até certo ponto ao comportamento percebido nos testes com escoamentos radiais. A explicação está na forma da geometria, que, a partir deste ponto, modifica o formato da frente de resina para uma forma convexa, similar ao que é observado em escoamentos radiais.

A idéia de que a forma da frente de resina influencia o perfil de pressão por trás da frente também é reforçada ao se analisar a curva referente ao tempo de 5 s, que pode ser vista em detalhe na Figura 5.27. Percebe-se que, neste caso, a concavidade é voltada para baixo.

As alterações na forma da frente de resina, que inicia côncava (5 s), torna-se apro-

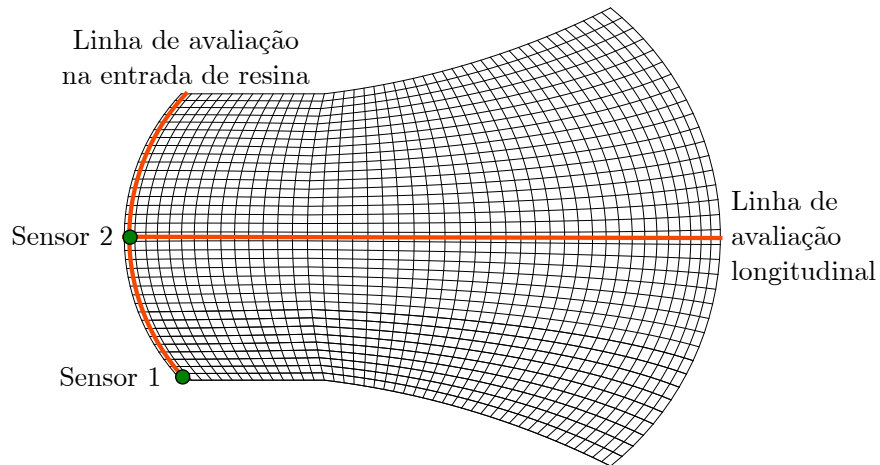


Figura 5.24: Curva de pressão na região de injeção de resina em $t=35$ s.

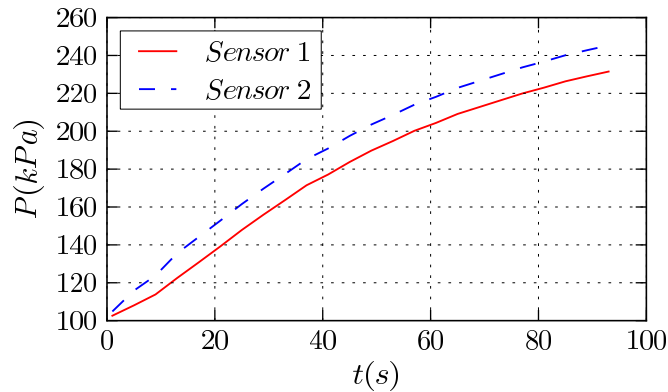


Figura 5.25: Evolução da pressão ao longo do tempo de processo para os “sensores” 1 e 2.

ximadamente retilínea (35 s) e, posteriormente, passa a ser convexa (85 s), podem ser facilmente percebidas nas imagens da Figura 5.20.

5.3.2 Caso G2: injeção multiponto

Na Figura 5.28 está representada a posição da frente de avanço da resina para os três esquemas de distribuição de pontos de injeção testados em dois instantes de tempo: 500 s decorridos do início da injeção e o instante em que a frente de resina alcança pelo menos uma das saídas de ar, que varia dependendo da configuração utilizada conforme pode ser visto nas próprias figuras. Os pontos pretos indicam as posições das entradas de resina e saídas de ar.

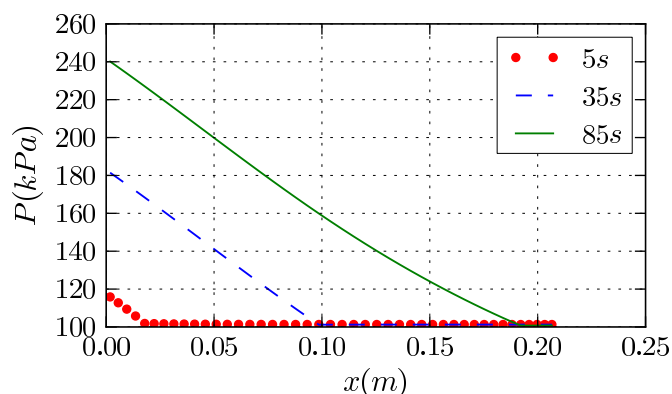


Figura 5.26: Perfil da pressão ao longo da linha de simetria da geometria para três instantes de tempo: 5, 35 e 85 s.

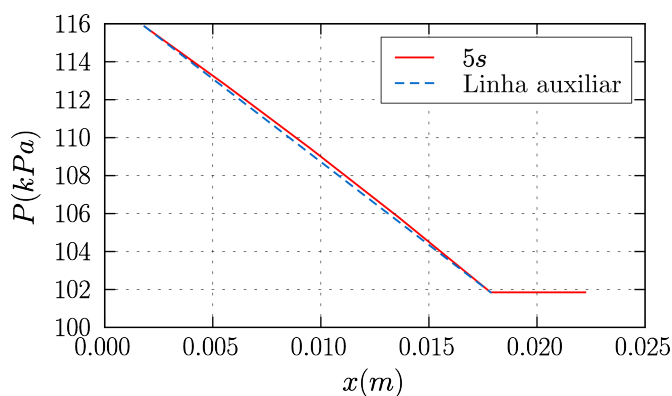


Figura 5.27: Perfil da pressão ao longo da linha de simetria da geometria para $t=5$ s.

Analisando os escoamentos ilustrados na Figura 5.28, percebe-se que o uso da primeira configuração de pontos resulta na chegada da frente de resina inicialmente nas saídas de ar localizadas nas extremidades do molde, contudo a frente ainda está bem distante da saída de ar central. Com esta configuração a frente só chega à saída central após 2500 s decorridos. Quando se usa a segunda distribuição, com os dois pontos de injeção mais próximos ao centro, a resina atinge primeiro a saída de ar central, sendo necessário um pouco mais de tempo para chegar às saídas externas. Neste caso, após 2200 s a resina atinge as demais saídas de ar.

Analisando as imagens referentes ao terceiro esquema de distribuição de pontos, percebe-se que a frente de resina chega a praticamente todas as saídas de ar simultaneamente próximo aos 2000 s, tornando essa a melhor opção para produção. Tomando como base o esquema 3 de distribuição, foi realizado um estudo para avaliar os níveis de pressão

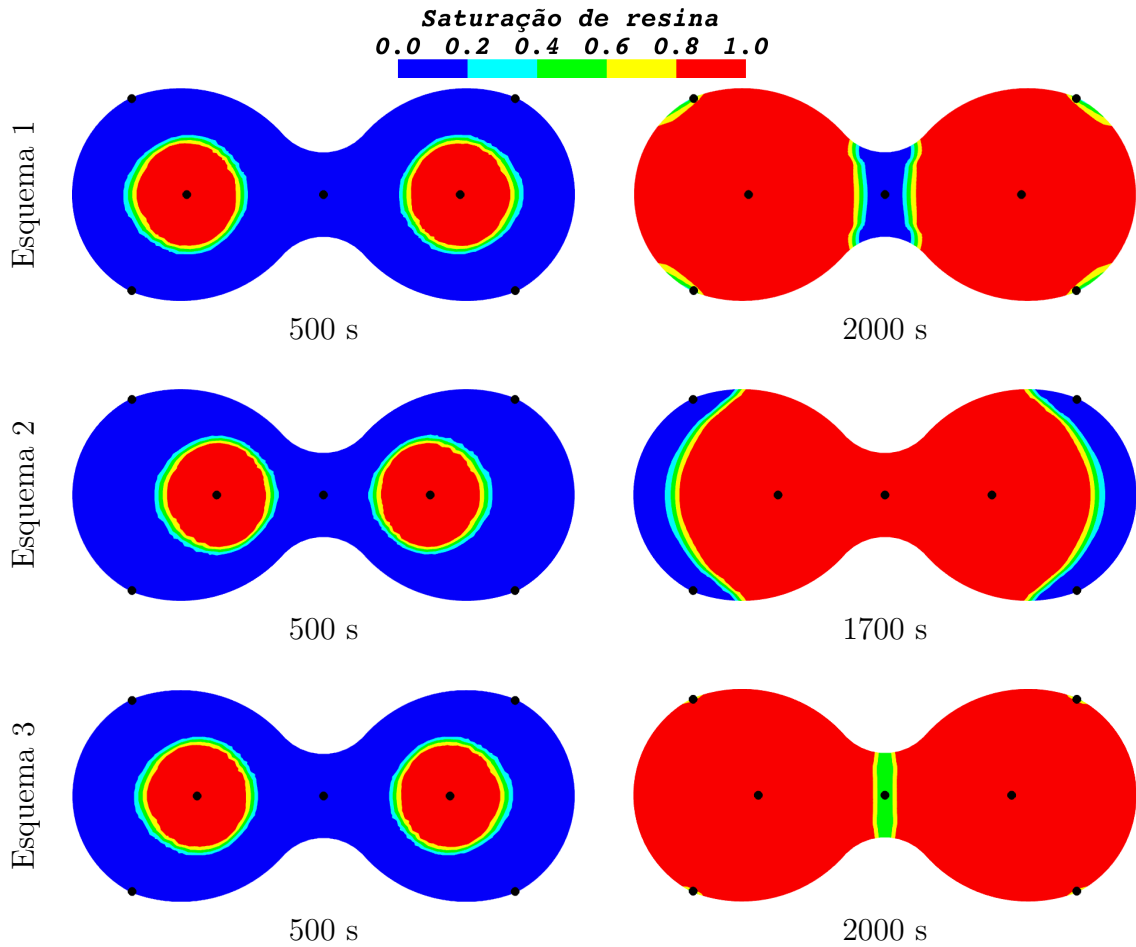


Figura 5.28: Posição da frente de resina para as distribuições de pontos de injeção estudadas em dois instantes de tempo: 500 s e o instante em que a resina atinge pelo menos uma saída.

envolvidos. Como P é máxima no ponto de injeção de resina, decidiu-se plotar a sua evolução no tempo em um dos dois pontos. Como a geometria é simétrica, a curva plotada na Figura 5.29 é válida para qualquer um dos pontos de injeção.

Inicialmente, o comportamento da curva é similar ao de escoamentos radiais com a mesma condição de injeção, ou seja, com um decréscimo gradativo no grau de crescimento da pressão com o tempo. Após esse período, a curva sofre um aumento perceptível apenas depois de 1600 s decorridos. Analisando a posição da frente de resina nesse tempo, apresentada na Figura 5.30, percebe-se que este aumento é consequência da chegada da frente de resina nas fronteiras do molde, que oferecem resistência ao escoamento. A partir desse ponto e, à medida que o tempo passa, uma região cada vez maior entra em contato com a parede, elevando gradativamente a pressão até o momento em que a resina alcança as

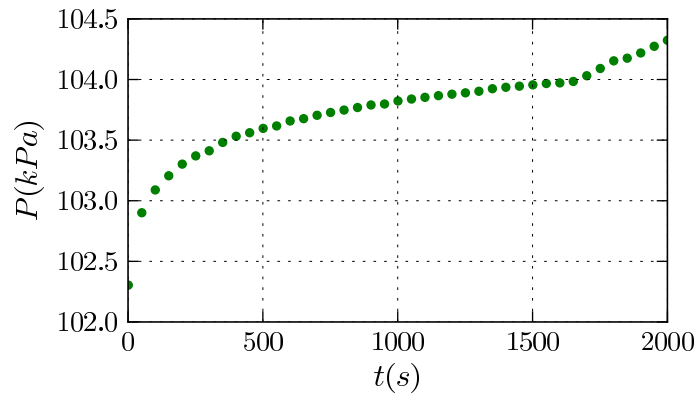


Figura 5.29: *Evolução da pressão com o tempo em qualquer um dos pontos de injeção de resina distribuídos conforme o esquema 3.*

saídas de ar. Os campos de pressão em todo o domínio para os tempos de 100, 500, 1600 e 2000 segundos podem ser visualizados na Figura 5.31.

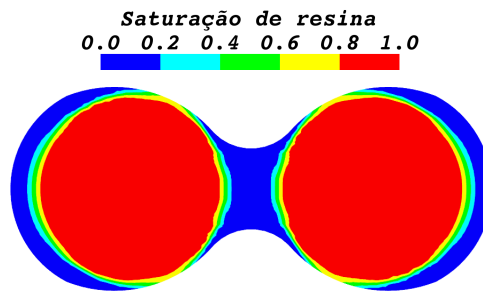


Figura 5.30: *Posição da frente de resina para o esquema 3 de distribuição de pontos de injeção em $t = 1600$ s.*

5.4 O sistema computacional desenvolvido

5.4.1 Plataforma para utilização do software

Conforme explanado na Seção 2.3.4, entre outras características, a linguagem Python permite rápido desenvolvimento enquanto que a linguagem C++ produz aplicações de rápido processamento. No presente trabalho, o Python foi usado nas ferramentas de pré e pós-processamento enquanto o solver numérico foi desenvolvido em linguagem C++.

A linguagem Python não depende do sistema operacional. Os aplicativos desenvolvi-

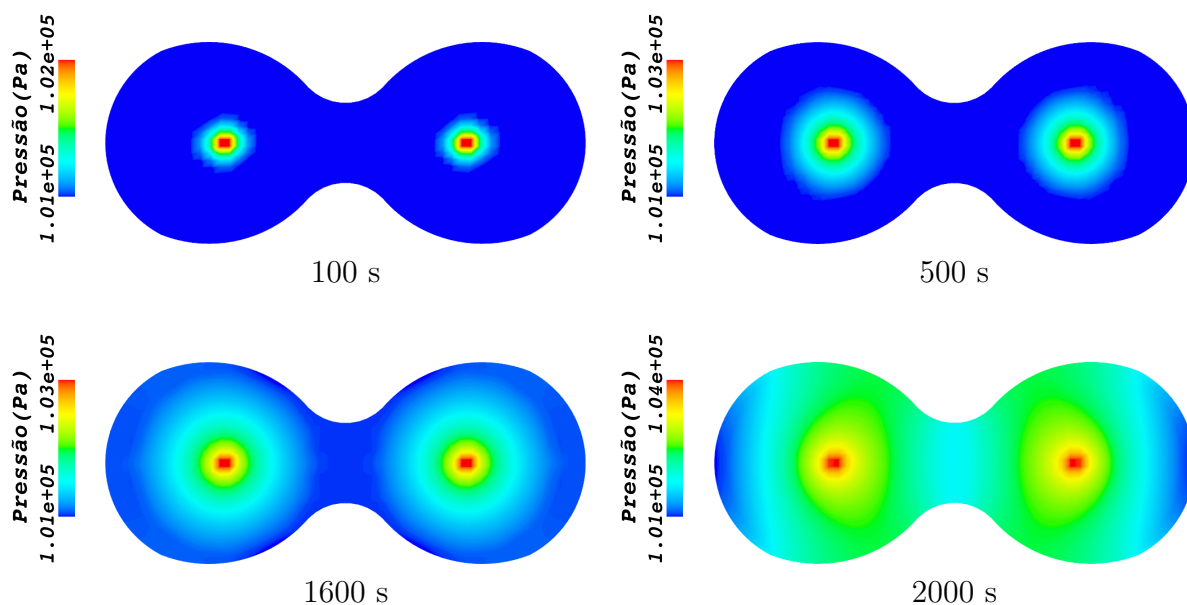


Figura 5.31: Campos de pressão obtidos com o esquema 3 de distribuição de pontos para quatro instantes de tempo: 100, 500, 1600 e 2000 s.

dos funcionam em qualquer plataforma, sendo necessário apenas que todas as bibliotecas utilizadas estejam devidamente instaladas. Aplicativos desenvolvidos em linguagem C++ podem ser utilizados em qualquer sistema operacional para o qual esteja disponível um compilador ANSI C/C++ compatível. Durante a realização desta pesquisa, devido a limitações de tempo para realização de testes, foi utilizado exclusivamente o sistema operacional Linux em processadores Intel e o compilador C++ GCC (GNU Compiler Collection). As bibliotecas utilizadas foram escolhidas considerando a portabilidade do software, de modo que possa ser utilizado em outros sistemas operacionais.

5.4.2 Fluxo de dados e informações no sistema

A Figura 5.32 mostra como dados e informações circulam entre os aplicativos desenvolvidos no presente trabalho. Note que esta figura é bastante similar à Figura 2.21. Os seus detalhes são explicados no decorrer desta seção.

No início do processo, usando a ferramenta de pré-processamento, todos os parâmetros fornecidos pelo usuário são armazenados no arquivo de dados, a ser utilizado como entrada para o solver numérico. O arquivo de dados é gerado em linguagem XML, detalhada na

Seção 2.3.4.2. O aplicativo de pré-processamento também gera algumas tabelas de propriedades em arquivos de texto puro (ascii) a partir das expressões definidas pelo usuário que relacionam a viscosidade e a densidade dos fluidos com a pressão e as permeabilidades relativas com a saturação.

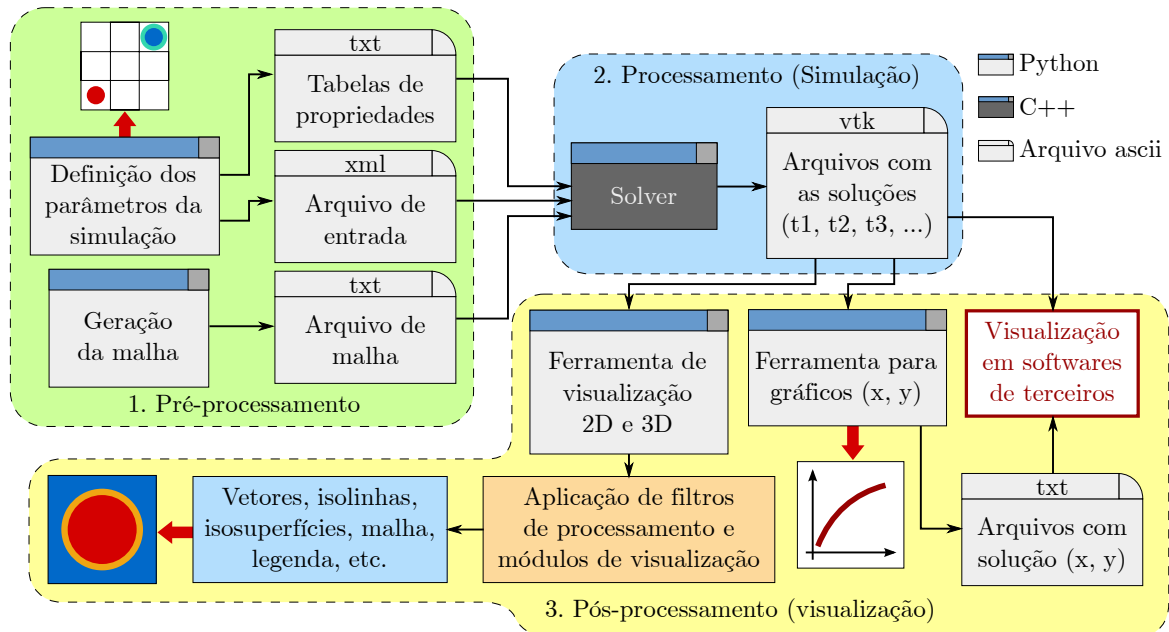


Figura 5.32: Fluxo de informações entre as ferramentas desenvolvidas no presente trabalho.

No início do processamento, o simulador busca no arquivo de malha as coordenadas dos pontos. O arquivo de malha pode ser gerado pela ferramenta de geração de malhas cartesianas ou generalizadas. É possível também utilizar algum aplicativo desenvolvido por terceiros, sendo necessário que o arquivo gerado esteja no formato aceito pelo simulador numérico. Alguns exemplos de softwares gratuitos para esta finalidade incluem o *CAF 2D/GENGRID* do *Computer Applied Fluid Laboratory* da *Yeungnam University* e o *CFD Mesh* ou *CFD Grid Editor* disponíveis na página da *web* do Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor - SINMEC, da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC). Uma lista mais completa de geradores de malha de domínio público ou comerciais pode ser acessada em Schneiders (1998). Em alguns casos é necessário utilizar uma ferramenta de conversão entre formatos para que o solver reconheça o arquivo gerado externamente.

A partir das informações da malha, as variáveis são armazenadas na memória usando técnicas de alocação dinâmica. Em seguida, a partir do arquivo de entrada (XML) são lidos os parâmetros definidos pelo usuário. Durante a solução transiente, os valores da pressão e saturação são calculados a cada instante de tempo. As propriedades dos fluidos que são função dessas variáveis são calculadas, via interpolação, a partir das tabelas de propriedades geradas na etapa anterior. Essa abordagem é bem mais eficiente do que realizar avaliações de expressões matemáticas.

Em cada instante de tempo, os resultados com os valores das grandezas calculadas (pressão e saturação da fase resina) são armazenados em arquivos de dados com o formato *vtk legacy*, discutido na Seção 4.4.1.2. Também são armazenados dados úteis para um provável reinício da simulação, caso seja necessária sua interrupção. Para geração de gráficos no plano cartesiano (x,y), a ferramenta de pós-processamento baseia-se na quantidade e posição de sensores. Em seguida varre os arquivos de solução, buscando os valores a serem plotados nas regiões do domínio e instantes de tempo especificados. Estes arquivos podem ser plotados diretamente ou salvos em arquivos texto para utilização posterior em softwares de terceiros.

5.4.3 Interface gráfica (pré e pós-processamento)

A presente seção tem como objetivo oferecer ao leitor uma idéia geral de funcionamento e utilização do software desenvolvido no presente trabalho, abordando as suas principais funcionalidades.

A Figura 5.33 mostra a caixa de diálogo “Sobre”, que é carregada no início da execução. Normalmente essa janela é utilizada em aplicativos GUI para descrever informações relevantes do sistema. Ela abre automaticamente quando o programa inicia e pode ser acessada a qualquer momento pelo menu: Help > About. A interface da ferramenta de pré-processamento é exibida na Figura 5.34. Conforme pode ser visto, a janela principal é organizada em 3 regiões: a) o menu principal, b) abas de propriedades e parâmetros e c) definições comuns ao caso. Nas definições comuns ao caso, o usuário atribui rótulo e descrição que possam facilitar a identificação do arquivo de entrada, além de fazer referência ao arquivo da malha a ser utilizado durante a simulação. O arquivo deve estar localizado

na pasta *grids* do projeto.



Figura 5.33: A caixa de diálogo “Sobre” com informações relevantes do aplicativo.

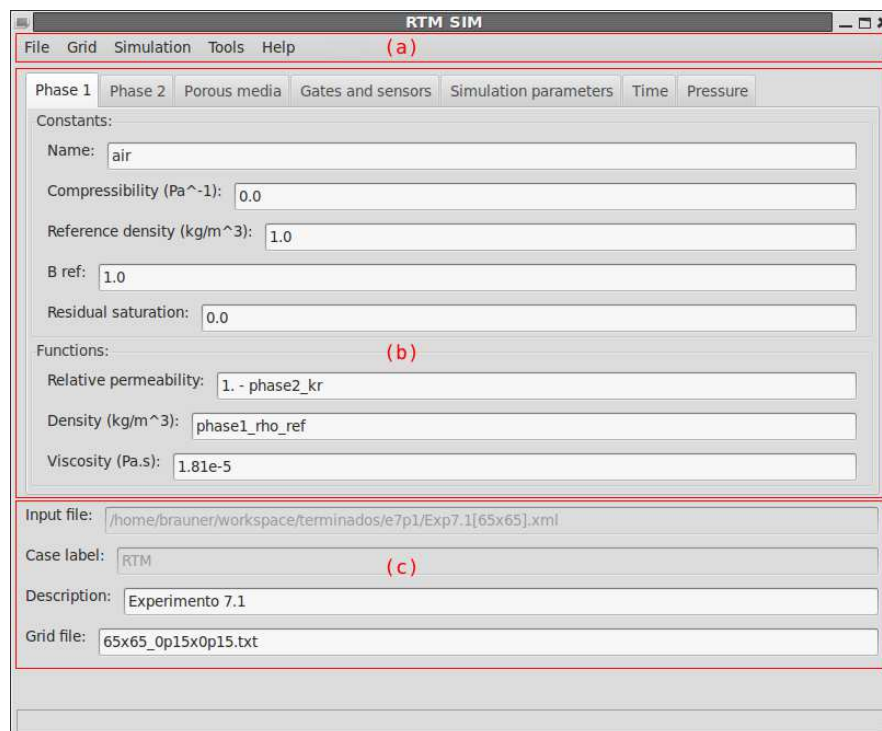


Figura 5.34: Janela principal da ferramenta de pré-processamento: a) Menu principal, b) abas de propriedades e parâmetros e c) definições comuns ao caso.

5.4.3.1 Menu principal

Abaixo são descritos os componentes e funcionalidades que podem ser acessados por meio do menu principal.

File: permite que o usuário gerencie os arquivos de dados (xml). É possível navegar pelas pastas do sistema ao abrir ou salvar o arquivo. Uma lista de arquivos recentes, atualizada constantemente, permite acesso mais rápido aos últimos arquivos editados. Também contempla o comando para fechar o aplicativo;

Grid: fornece ferramentas ao usuário para selecionar, gerar, importar e visualizar arquivos de malhas bidimensionais;

Simulation: inicia o processamento numérico. Caso existam dados de uma simulação anterior, é possível dar continuidade a ela, especificando o instante de tempo de reinício;

Tools: permite ao usuário executar ferramentas diversas e de pós-processamento / visualização. Algumas dessas são descritas adiante;

Help: fornece informações relevantes do sistema e permite acesso à documentação e aos arquivos de ajuda.

5.4.3.2 Abas de propriedades e parâmetros

Todos os dados referentes às fases do sistema, ao meio poroso, às entradas de resina e saídas de ar, aos sensores de avaliação de grandezas e demais parâmetros da simulação são organizados na forma de abas. Sempre que um campo está relacionado a uma grandeza física, o seu valor deve ser definido de acordo com as unidades exigidas, mostradas ao lado do nome da mesma.

As Figuras 5.35 e 5.36 mostram as abas *Phase 2* e *Porous media*, respectivamente. A aba *Phase 2* é bastante similar a *Phase 1*. Nelas são definidas as propriedades das fases que compõem o sistema multifásico (ar e resina, respectivamente) e do meio poroso (pré-forma fibrosa). Optou-se por nomear como “Fase 1” o fluido presente no meio poroso

no início do processo (ar) e como “Fase 2” o fluido a ser injetado (resina).

Figura 5.35: *Aba de propriedades das fases fluidas.*

Figura 5.36: *Aba de propriedades do meio poroso.*

As propriedades das fases que são funções de outras variáveis devem ser escritas utilizando expressões baseadas nos operadores aritméticos da linguagem Python ou em funções do módulo *math*, que faz parte da distribuição padrão. As expressões são avaliadas para geração das tabelas de propriedades, usadas no simulador numérico. A lista dos operadores aritméticos e principais funções matemáticas é mostrada na Tabela 5.1.

Os parâmetros referentes às entradas de resina, saídas de ar e sensores são definidos na aba *Gates and sensors*, Figura 5.37. Dá-se o nome de “sensor” a um ponto que o usuário especifica no domínio para realizar medições de grandezas transientes. Esta funcionalidade seria útil, por exemplo, para avaliar a variação da pressão no decorrer do tempo em um determinado ponto da cavidade do molde. Nos controles mostrados na Figura 5.37, o usuário deve especificar uma das condições de operação possíveis para a injeção: pressão

Tabela 5.1: Lista de operadores aritméticos da linguagem Python. Fonte: Zelle (2004).

Operador/função	Descrição
+	adição
-	subtração
*	multiplicação
/	divisão
**	exponenciação
//	divisão inteira
%	resto
abs(x)	módulo de x
pi	π
e	e
sin(x)	$\sin x$
cos(x)	$\cos x$
tan(x)	$\tan x$
asin(x)	$\arcsin x$
acos(x)	$\arccos x$
atan(x)	$\arctan x$
log(x)	$\ln x$
log10(x)	$\log_{10} x$
exp(x)	e^x

ou vazão de resina constante. Outros parâmetros exigidos são as quantidades de cada um destes pontos (entradas, saídas e sensores). Para especificar a posição, o usuário escolhe o tipo de coordenada mais viável clicando no controle de opção (i, j) ou (x, y). Em seguida, a janela *Coordinates* abre permitindo ao usuário especificar as coordenadas para cada um dos pontos.

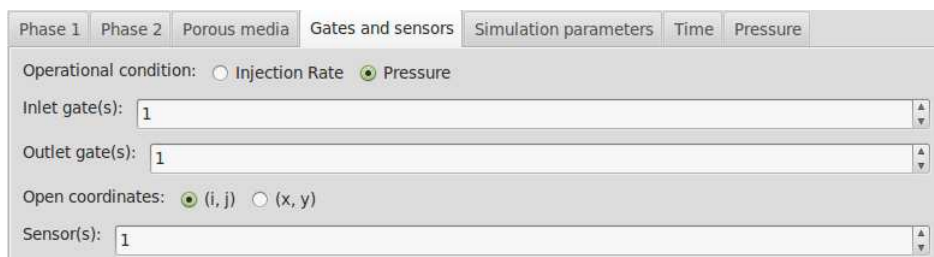


Figura 5.37: Aba de parâmetros referentes às entradas de resina, saídas de ar e sensores.

A Figura 5.38 mostra as duas formas de definir as coordenadas. A mesma figura também ilustra que, dependendo da condição de contorno, parâmetros adicionais são

solicitados. Caso a condição seja de vazão de injeção constante, é necessário especificar o valor da vazão em cada entrada de resina e saída de ar. Neste caso, a janela *Coordinates*, passa a solicitar a vazão volumétrica em cada ponto, Figura 5.38 (a). Para garantir a conservação da massa, a soma das vazões de entrada deve ser correspondente à soma das vazões de saída. Conforme consta na Seção 3.1.1, o valor especificado de vazão na entrada deve ser sempre negativo e positivo na saída.

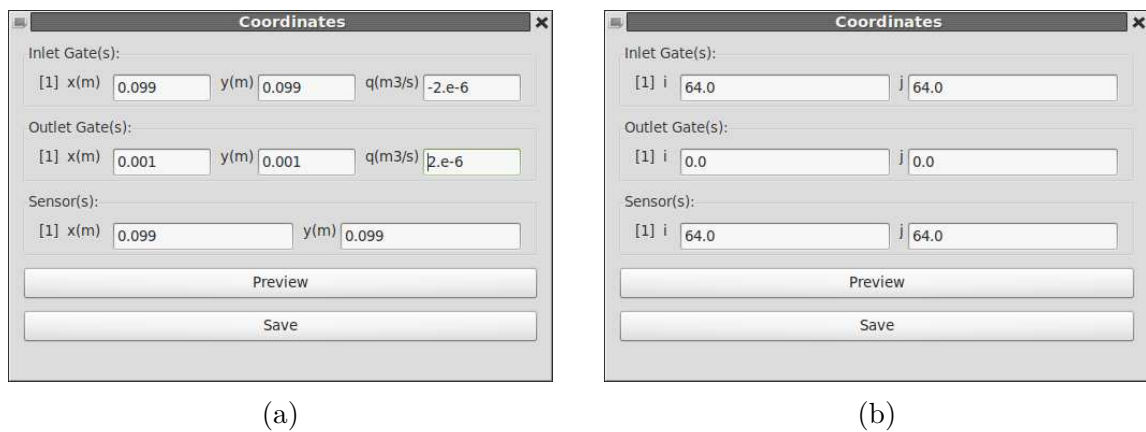


Figura 5.38: Atribuição de parâmetros dos pontos: a) coordenadas (x , y) e vazões de injeção de resina e saída de ar e b) coordenadas (i , j).

Para injeção com pressão constante, conforme mencionado na Seção 3.3.8, a pressão de injeção deve partir da pressão atmosférica no início do processo até atingir o valor pré-definido. Sendo assim, é necessário que o usuário forneça a variação da pressão no decorrer do tempo, como no gráfico da Figura 4.7. Isto é feito por meio de um arquivo texto, composto por duas colunas (tempo e pressão) separadas por espaço ou tabulação. O arquivo deve ser colocado na pasta *Tables* do projeto e ser referenciado na aba *Pressure*, no campo *Injection pressure file*. Os dados devem abranger todo o tempo do processo a ser simulado, partindo de $t = 0$. O arquivo pode ser editado manualmente. Entretanto, acessando o menu *Tools*, o usuário dispõe de uma ferramenta capaz de auxiliar na obtenção destes dados, definindo modelos matemáticos para o comportamento da pressão com o tempo.

O botão *Preview* da janela *Coordinates* permite observar a distribuição dos pontos na malha, como no exemplo da Figura 5.39. Cada tipo de ponto é representado por uma

cor: azul para entrada de resina, vermelho para saída de ar e verde representando um sensor. Ao lado de cada ponto, o seu identificador (número inteiro positivo) é mostrado. Diferentemente dos pontos de entrada de resina e saída de ar, os sensores não são utilizados durante a etapa de processamento e podem ser definidos apenas no momento da visualização dos resultados. A idéia do uso de sensores é especificar locais do domínio onde as grandezas calculadas (pressão e saturação da resina) podem ser medidas pontualmente em qualquer instante de tempo.

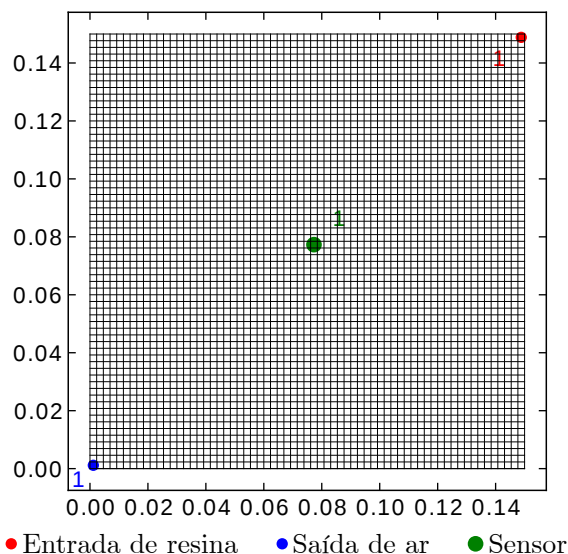


Figura 5.39: Visualização da malha e da distribuição dos pontos (entradas de resina, saídas de ar e sensores).

O restante dos parâmetros da simulação são especificados nas demais abas: *Simulation parameters*, *Time* e *Pressure*.

5.4.3.3 Ferramenta de visualização

O usuário pode optar por visualizar os resultados antes do final da simulação. Como foi dito, os arquivos no formato *vtk legacy* da solução transiente são armazenados na pasta *output* do projeto. Para visualizá-los, utiliza-se a ferramenta de visualização, acessível pelo menu *Tools > Visualization tool*.

A interface da ferramenta de visualização pode ser vista na Figura 5.40. A Janela

é dividida em duas áreas: no lado esquerdo estão localizados alguns controles de configuração/manipulação e, integrada no lado direito, a interface do MayaVi. Utilizando os controles é possível navegar pelos arquivos de solução, que são exibidos de acordo com o passo de tempo (especificado em segundos). A navegação pode ser feita clicando com o botão esquerdo do mouse sobre o nome do arquivo desejado ou com as setas direcionais do teclado. O usuário pode definir a quantidade de cores utilizada na composição da imagem. Caso o problema simulado seja simétrico e o usuário tenha optado por simular utilizando apenas 1/4 do domínio, o visualizador constroi a imagem completa, desde que o usuário habilite a opção *1/4 configuration*. Também é possível mostrar os pontos de injeção de resina e saídas de ar, bem como o tempo referente à captura da imagem.

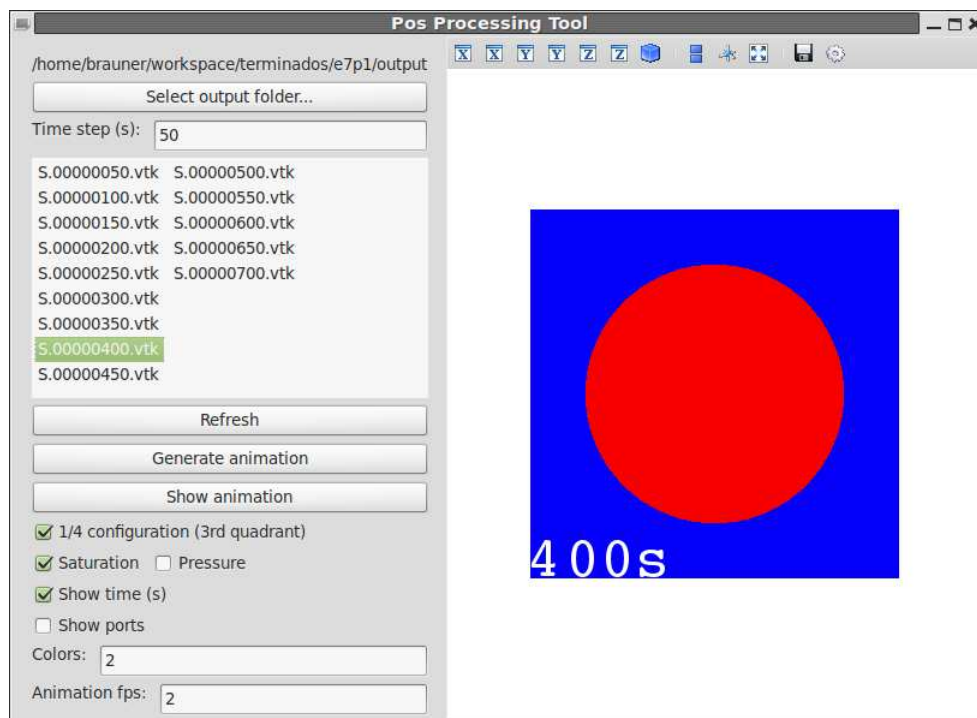


Figura 5.40: Visualização dos resultados (arquivos vtk) baseada no MayaVi.

Para visualizar com mais detalhes a evolução da solução no tempo, também é possível criar animações a partir dos arquivos de solução atualmente listados. O usuário deve lançar mão de dois parâmetros: a quantidade de imagens a ser utilizadas na animação, que é inversamente proporcional ao valor do parâmetro *Time step (s)*, e o número de quadros por segundo (fps). Quanto mais imagens são utilizadas e maior o valor do fps, mais suavemente é mostrada a animação e maior o arquivo gerado. A animação é salva

na mesma pasta dos arquivos de saída.

A janela integrada do MayaVi, por sua vez, traz uma série de ferramentas no topo da tela, que permitem configurar: o ângulo de visão (vistas ortogonais ou perspectiva), o tipo de perspectiva (paralela ou cônica), posição do ícone indicador da posição dos eixos, a exibição em tela cheia e demais parâmetros da cena. Além disso, há um botão para salvar a visualização atual em arquivo de imagem. O usuário ainda pode interagir com a cena (zoom e ângulo de visualização), clicando e deslizando os botões do mouse. A animação é gerada com as configurações de cena mais atuais.

A imagem visualizada na Figura 5.40, referente a um instante de tempo de um escoamento radial, mesmo com as configurações já citadas, pode não satisfazer completamente as necessidades do usuário. Ele pode desejar utilizar outro perfil de cores (em tons de cinza, por exemplo), exibir a malha ou as fronteiras da geometria, mostrar uma legenda que relacione valores com as cores exibidas ou ainda utilizar isolinhas para exibir seus resultados. O MayaVi permite utilizar os poderosos recursos do Visualization Toolkit. Para acessar as demais funcionalidades disponíveis, o usuário deve utilizar a interface de visualização avançada, Figura 5.41, clicando com o botão direito do mouse no nome do arquivo que deseja visualizar.

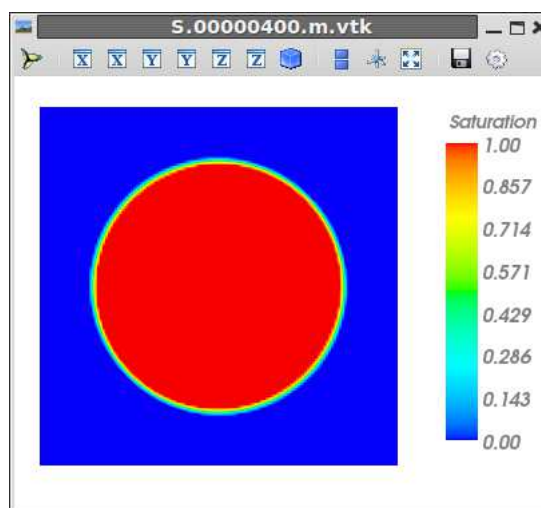


Figura 5.41: *Visualização avançada baseada no MayaVi.*

Além da exibição da legenda, que pode ser notada inicialmente, uma importante dife-

rença entre essa e a janela integrada, citada nos parágrafos anteriores, está na possibilidade de utilizar o botão de acesso à *pipeline* de visualização do MayaVi, localizado na extremidade esquerda da barra de ferramentas. A Figura 5.42 mostra a *pipeline* de visualização referente à imagem visualizada na Figura 5.41.

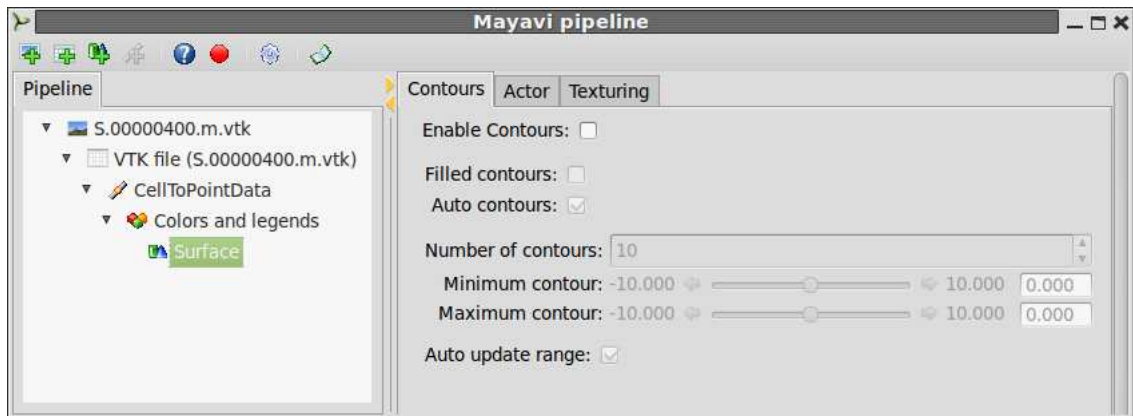


Figura 5.42: *Pipeline de visualização para imagem da Figura 5.41.*

Nas imagens de escoamento radial mostradas até aqui, Figuras 5.40 e 5.41, foram utilizados do MayaVi, o filtro *CellToPointData*, que tranforma dados de células em dados pontuais por meio de cálculos médios, e o módulo *Surface*, que desenha uma superfície a partir de um conjunto de dados com ou sem contornos. Isto pode ser facilmente observado na Figura 5.42. Como mostra a figura, o acesso à *pipeline* de visualização permite maior personalização. É possível remover e adicionar filtros e módulos, alterar suas configurações, escolher uma tabela de cores, mudar fonte da legenda, etc., como pode ser visto na Figura 5.43.

5.4.3.4 Ferramentas para gráficos no plano cartesiano

Alguns gráficos plotados no plano cartesiano são úteis para se estudar parâmetros importantes do problema, como, por exemplo, a variação do valor de certas grandezas no decorrer do tempo. No menu *Tools*, há duas ferramentas auxiliares para esta finalidade, ambas baseadas no conceito de sensores.

Quando se quer analisar sensores individualmente, opta-se pela *Transient spot output*,

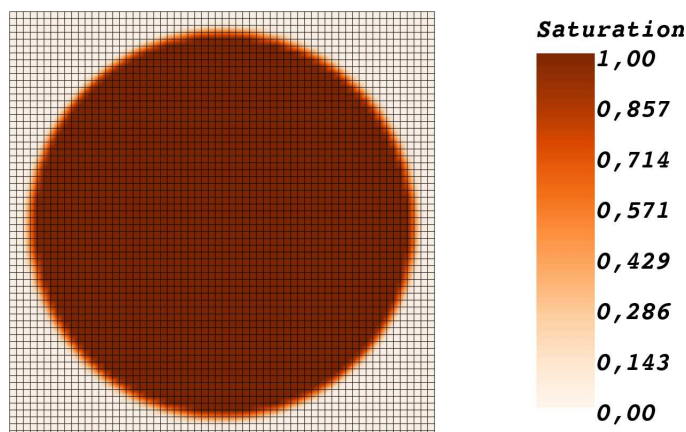


Figura 5.43: *Figura gerada a partir de uma visualização personalizada via pipeline.*

que é capaz de indicar quanto uma grandeza (P ou S) variou naquele ponto durante todo o processo. Conforme se vê na Figura 5.44, basta o usuário especificar o sensor que ele quer analisar e a grandeza desejada. Os valores podem ser armazenados em arquivo texto e usados em outro aplicativo para construção dos gráficos.

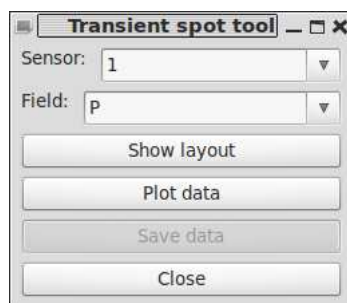


Figura 5.44: *Avaliação de grandezas por meio de sensores individuais.*

A Figura 5.45 mostra gráficos com valores de pressão e saturação no decorrer do tempo, medidos no sensor 1 (Figura 5.39). Ambas as figuras apontam que a frente de fluxo passa pelo sensor em um tempo situado entre 350 e 400 segundos após o início do processo.

Além de utilizados individualmente, os sensores podem ser muito úteis quando agrupados em linhas. Dessa forma, pode-se avaliar, por exemplo, o comportamento de uma grandeza em um corte do domínio de estudo, para determinados instantes de tempo. A ferramenta *Transient line output*, cuja interface gráfica pode ser vista na Figura 5.46, está disponível no menu *Tools* e permite ao usuário esse tipo de análise. O usuário deve inicialmente especificar a posição da linha onde são distribuídos os sensores, como ilustra

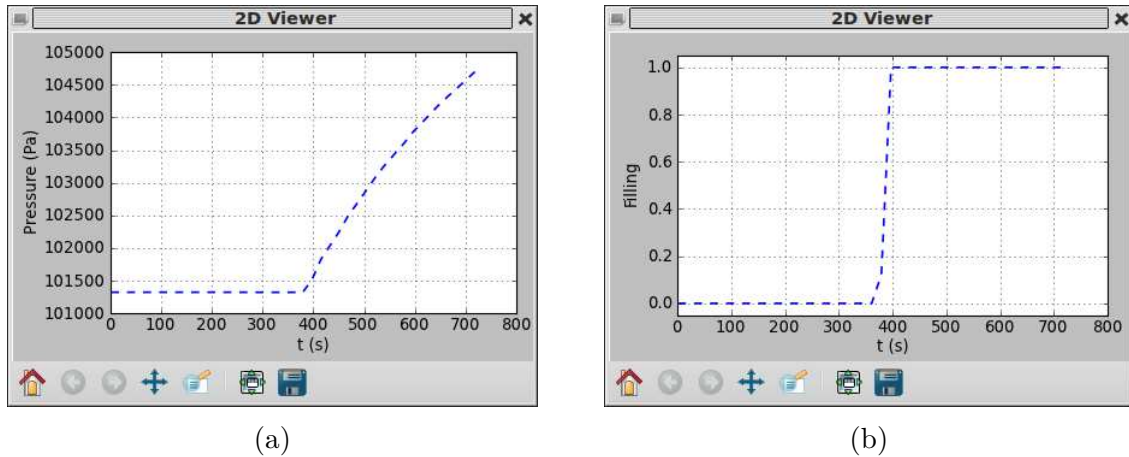


Figura 5.45: *Evolução de grandezas medidas por um sensor no decorrer do tempo: a) pressão e b) saturação.*

o exemplo da Figura 5.47.

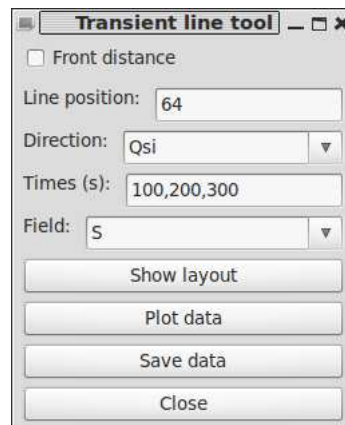


Figura 5.46: *Interface para avaliação de grandezas por meio de sensores distribuídos em linhas.*

A Figura 5.48 mostra um exemplo como podem variar os valores de pressão e saturação ao longo da linha de sensores mostrada na Figura 5.47.

Se o usuário deseja calcular a distância da frente de resina, ele deve escolher o ponto de injeção de referência e em que linha os sensores são distribuídos. Nota-se que, como se está considerando apenas o terceiro quadrante da geometria real, a linha de sensores vai do centro até a extremidade do molde e essa configuração pode ser usada para o cálculo da posição da frente, pelo menos até o momento em que a frente atinge as bordas. Um exemplo pode ser visto no gráfico da Figura 5.49, mostrando a variação do raio da frente

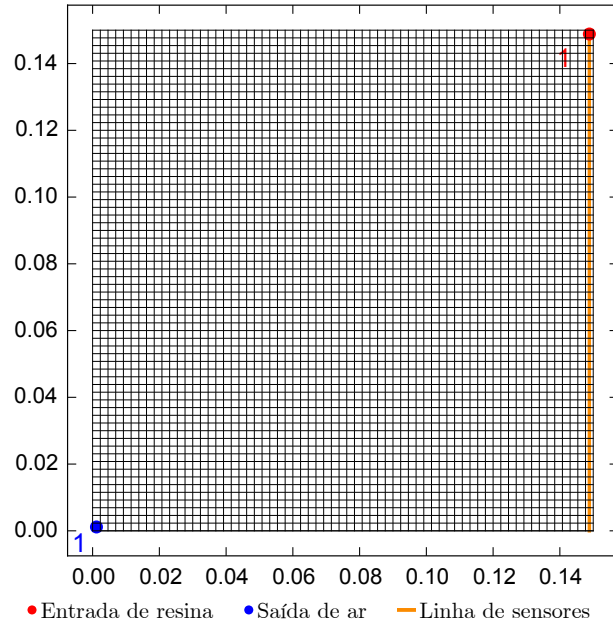
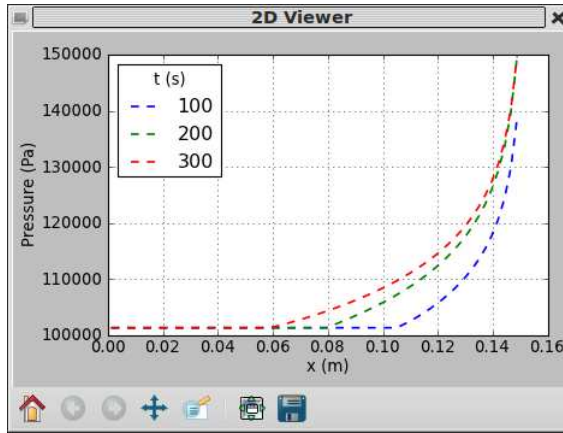


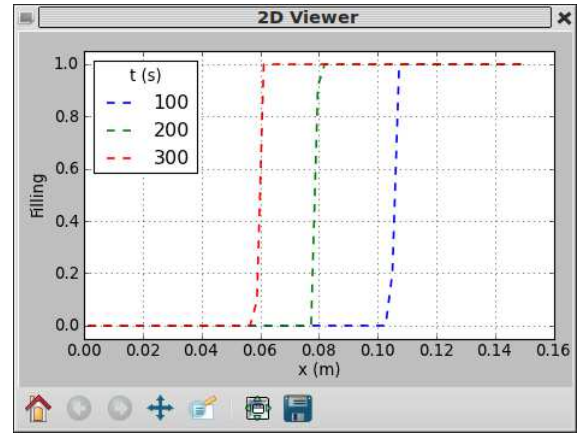
Figura 5.47: *Visualização da malha, pontos e linha de sensores.*

de resina durante a simulação.

As Figuras 5.45, 5.48 e 5.49 trazem imagens capturadas da ferramenta desenvolvida para visualização de gráficos 2D, que utiliza recursos da biblioteca Matplotlib. Os controles na base da janela permitem, entre outras ações, aproximar ou mover a visualização e salvar a visualização em diversos formatos vetoriais (eps, pdf ou svg) ou em mapa de bits (png). O visualizador da malha, do layout de pontos de injeção de resina, de saída de ar e de sensores também utiliza esta mesma ferramenta. As Figuras 5.39 e 5.47 são exemplos de imagens vetoriais geradas dessa forma.



(a)



(b)

Figura 5.48: *Evolução de grandezas medidas por uma linha de sensores no decorrer do tempo: a) pressão e b) saturação.*

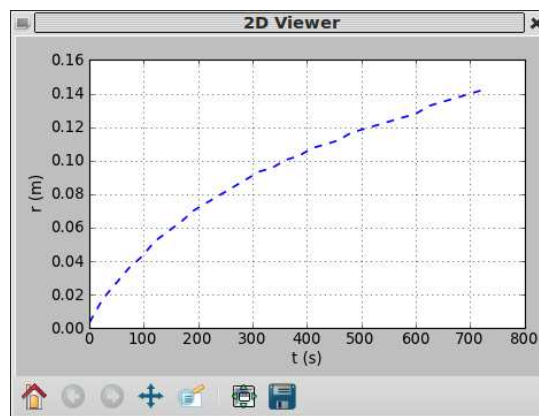


Figura 5.49: *Evolução da frente da resina com o tempo de processamento.*

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

6.1 Conclusões

Neste trabalho foi apresentada uma revisão teórica sobre os materiais compósitos, o método de produção RTM e como a simulação computacional de escoamentos multifásicos em meios porosos pode ser útil para a otimização do processo pela análise dos parâmetros envolvidos na etapa de preenchimento do molde pela resina.

Também foi apresentada uma modelagem matemática tratando o problema físico como um escoamento bifásico imiscível (ar-resina). Foram detalhados e discutidos os conceitos relevantes envolvidos na solução numérica das equações diferenciais parciais governantes, discretizadas pelo Método dos Volumes Finitos em coordenadas generalizadas. Em cada instante de tempo a solução foi obtida usando a metodologia totalmente implícita, onde as grandezas (pressão e saturação da fase resina) são calculadas simultaneamente.

Um modelo de ajuste de permeabilidade foi proposto com o intuito de corrigir discrepâncias de algumas grandezas calculadas (tempo de preenchimento, pressão de injeção, posição da frente de fluxo) em relação aos modelos analíticos devido ao fato de se trabalhar, no presente trabalho, com um modelo bifásico que considera a existência de permeabilidades relativas entre as fases.

Para programação das ferramentas computacionais, utilizou-se o paradigma de programação orientada a objetos. Além do simulador numérico (feito em linguagem C++), foram desenvolvidos aplicativos para auxiliar nas etapas de pré e pós processamento usando a linguagem Python, com interfaces gráficas (GUIs) baseadas em WxPython. Para visualização dos resultados, optou-se pelo MayaVi, que permite utilizar de maneira rápida todos os recursos do Visualization Toolkit, uma poderosa biblioteca multiplataforma de código-aberto para visualização científica. Para visualização de dados em gráficos no plano cartesiano (x,y), optou-se pelo uso da biblioteca Matplotlib, capaz de gerar imagens vetoriais de alta qualidade.

O simulador computacional desenvolvido foi testado em casos envolvendo escoamentos radiais e retilíneos, cujos resultados foram validados com soluções analíticas disponíveis na literatura. Simulações também foram realizadas para casos experimentais de escoamentos radiais em cavidades retangulares e em estudos com geometrias de bordas arbitrárias irregulares.

Sobre a modelagem e o problema físico

Em um processo RTM, a etapa de injeção de resina é determinante para a qualidade final do produto, o que torna primordial realização de estudos visando conhecer as características do escoamento. A simulação computacional mostra-se uma ferramenta bastante viável, podendo ser usada como alternativa ou aliada às técnicas experimentais convencionais. Devido à natureza do problema físico (dinâmica dos fluidos), o método numérico utilizado para solução do modelo matemático deve garantir a conservação das grandezas envolvidas, o que é uma característica fundamental do Método dos Volumes Finitos.

A modelagem matemática e metodologia numérica apresentadas produziram resultados bastante próximos aqueles obtidos via solução analítica para os escoamentos radiais com as duas condições de contorno estudadas: pressão e vazão de injeção constantes. Para o caso de vazão constante, o erro no tempo de preenchimento foi de cerca de 1,22%. O erro no valor da pressão de injeção ao final do preenchimento do molde foi minimizado após ajuste no valor da permeabilidade, caindo para 0,2%. Para a condição de pressão constante, os resultados obtidos com a nova permeabilidade apresentaram erros de 0,7 e 0,38%,

respectivamente referentes ao tempo de preenchimento e vazão de injeção correspondente.

Para escoamentos retilíneos com vazão de injeção constante, os resultados numéricos mostraram-se também bastante próximos aos previstos pelos modelos analíticos. A média dos erros percentuais relativos entre os valores numéricos e analíticos para a posição da frente de fluxo e a pressão no injetor de resina no decorrer do tempo foram, respectivamente, de 0,93 e 1,8%.

Sobre a aplicação em experimentos de RTM com molde retangular

As comparações dos resultados numéricos com dados experimentais mostraram-se suficientemente próximas quando a permeabilidade do meio foi calculada de acordo com a metodologia proposta, provando que o modelo utilizado pode prever o comportamento do fenômeno físico estudado.

A evolução no tempo da posição da frente de resina bem como sua forma mostraram boa similaridade, o que pode ser observado comparando as fotografias digitais dos experimentos com figuras geradas a partir dos resultados numéricos.

A simulação permitiu mensurar os níveis de pressão no interior do molde durante toda a etapa de preenchimento pela resina. As simulações indicaram que os níveis de pressão em determinado ponto da cavidade sofrem alteração do valor inicial (pressão atmosférica, 101325 Pa) apenas quando a frente de resina passa por aquele local, tendendo a subir gradativamente.

A taxa de injeção instantânea de resina mostrou-se fisicamente coerente com o modelo de Darcy, ou seja, para garantir que a pressão de injeção permaneça constante, a vazão sofre queda à medida que a frente de resina avança no meio poroso.

Sobre a aplicação em moldes de geometrias arbitrarias

O uso de malhas coincidentes com as fronteiras permitiu aplicar a modelagem matemática a casos envolvendo geometrias de fronteiras irregulares, difíceis de se estudar com malhas cartesianas. Foi possível analisar a influência da geometria da cavidade na forma

da frente de resina e como o padrão da frente afeta o comportamento da pressão na região saturada.

A ferramenta computacional desenvolvida mostrou-se bastante útil na tarefa da localização dos pontos de injeção. Foi possível encontrar um esquema de distribuição de pontos que permitiu a resina atingir as saídas de ar do molde, simultaneamente.

Sobre o simulador desenvolvido

O uso da programação orientada a objetos mostrou-se útil tanto na implementação das ferramentas de pré e pós processamento quanto do simulador. Nos dois primeiros casos permitiu o reaproveitamento do código e o uso de várias bibliotecas da linguagem Python. No simulador, resultou em um código de fácil manutenção, implementação de novas funcionalidades e alterações de modelagem, sem prejuízo na performance.

A biblioteca MayaVi foi empregada sem maiores dificuldades, possibilitando, em um curto espaço de tempo, a implementação de ferramentas para visualização dos campos de pressão e saturação usando os poderosos recursos do *Visualization Toolkit*. O acesso ao *pipeline* de visualização propiciou a personalização de diversos parâmetros da cena, incluindo o gerenciamento de filtros e módulos.

A linguagem Python demonstrou ser uma importante ferramenta para o desenvolvimento de aplicações científicas, principalmente devido a grande disponibilidade de recursos em sua instalação padrão, clareza e objetividade do código-fonte. Alguns dos recursos utilizados incluem a avaliação de expressões matemáticas, gerenciamento de arquivos e pastas, chamadas de processos externos, entre outros. Prováveis limitações de performance não foram notadas onde a linguagem foi utilizada (ambientes de pré e pós-processamento).

A biblioteca WxPython exigiu um relativo pouco tempo de aprendizado e possibilitou a criação de interfaces gráficas com diversas opções de controles e uma perfeita integração com a biblioteca MayaVi.

O sistema operacional GNU Linux, como plataforma de desenvolvimento e utilização das ferramentas computacionais, mostrou-se estável e de fácil instalação e configuração

das bibliotecas necessárias.

A aplicação da biblioteca Matplotlib, para produção de gráficos no plano cartesiano, foi bastante simplificada pelos inúmeros e variados exemplos disponíveis na sua documentação online. As imagens geradas, em formato vetorial, são de excelente qualidade gráfica.

As ferramentas desenvolvidas para pré e pós-processamento suprem o usuário de diversas funcionalidades úteis para análise do processo, como visualização de campos das grandezas calculadas (pressão e saturação), cálculo da posição da frente de resina no decorrer do tempo, utilização de sensores para realizar medições pontuais, etc.

6.2 Sugestões para trabalhos futuros

Como sugestões para futuros trabalhos, propõe-se:

- Investigar a utilização de modelos de permeabilidades relativas disponíveis na literatura;
- Estudar outras abordagens matemáticas para estimativa da permeabilidade;
- Promover alterações no modelo que permitam simulações com regiões impermeáveis ou totalmente permeáveis (vazios) no domínio de estudo;
- Incluir o efeito do calor, tornando a modelagem não isotérmica;
- Permitir a utilização meios não isotrópicos;
- Implementar múltiplos pontos de injeção no molde ao se usar condição de contorno de injeção com pressão constante;
- Utilizar técnicas de processamento paralelo no intuito de reduzir o tempo de simulação em equipamentos *multi-core*;
- Desenvolver um ambiente interativo para determinação otimizada das posições de sensores e pontos de entrada e saída de fluidos na geometria;

- Migrar os aplicativos desenvolvidos para outras plataformas computacionais, realizar testes visando evitar possíveis incompatibilidades e elaborar documentação detalhada, incluindo arquivos tutoriais e de ajuda.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AHRENS J.; GEVECI B.; LAW C. Paraview: An end user tool for large data visualization. **the Visualization Handbook**. Edited by CD Hansen and CR Johnson. Elsevier, 2005. Citado na(s) pág(s). 112
- ALLEN III M. B. Numerical modelling of multiphase flow in porous media. **Advances in Water Resources**, 8:162–187, 1985. Citado na(s) pág(s). 54, 55, 61
- ALMEIDA M. B. Uma introdução ao XML, sua utilização na internet e alguns conceitos complementares. **Ciência da Informação, Brasília**, 31(2):5–13, 2002. Citado na(s) pág(s). 48
- ANDERSON J. *Computational fluid dynamics: the basics with applications*. McGraw-Hill series in aeronautical and aerospace engineering. McGraw-Hill, 1995. Citado na(s) pág(s). 33
- ATAIE-ASHTIANI B.; RAEESI-ARDEKANI D. Comparison of numerical formulations for two-phase flow in porous media. **Geotechnical and Geological Engineering**, 28(4):373–389, 2010. Citado na(s) pág(s). 55
- BALIGA B. R.; PATANKAR S. V. A New Finite-Element Formulation for Convection-Diffusion Problems. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, 3(4): 393–409, 1980. Citado na(s) pág(s). 37

- BARTON J. J.; NACKMAN L. R. *Scientific and Engineering C++: an introduction with advanced techniques and examples*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1994. Citado na(s) pág(s). 44, 45, 46, 47
- BASTIAN P. **Numerical computation of multiphase flows in porous media**. Habilitationsschrift, Technischen Fakultät Christian-Albrechts-Universität der at Kiel, 1999. Citado na(s) pág(s). 12, 13, 14, 15, 25, 27
- BEAR J.; BRAESTER C. On the flow of two immiscible fluids in fractured porous media. **Soil Sci**, 2:177–202, 1972. Citado na(s) pág(s). 14, 15
- BEAR J. *Dynamics of fluids in porous media*. American Elsevier, 1972. Citado na(s) pág(s). 15, 16
- BECKMANN O.; FIELD A. J.; GORMAN G.; HUFF A.; HULL M.; KELLY P. H. Overcoming barriers to restructuring in a modular visualisation environment. **Em Proceedings of the 7th workshop on Workshop on languages, compilers, and run-time support for scalable systems**, páginas 1–7. ACM, 2004. Citado na(s) pág(s). 113
- BLAZEK J. *Computational fluid dynamics: principles and applications*, volume 2. Elsevier Science, 2005. Citado na(s) pág(s). 32, 34, 36, 37, 38, 39
- BROBOANA D.; CALIN A.; OU Y. T.; BALAN C. M.; KADAR R.; MARCULESCU C.; BALAN C. Visualizations and numerical techniques in the complex flows analysis. **UPB Scientific Bulletin Series D: Mechanical Engineering**, 70(4):23–34, 2008. Citado na(s) pág(s). 44
- BROOKS R. H.; COREY A. T. *Hydraulic Properties of Porous Media*. Hydrology papers. Colorado State University, 1964. Citado na(s) pág(s). 25, 27
- CASE J.; CHILVER L.; ROSS C. T. F. *Strength of materials and structures*. Elsevier, 4th ed., 1999. Citado na(s) pág(s). 17
- CHANG R.-Y.; YANG W.-H. Numerical simulation of mold filling in injection molding using a three-dimensional finite volume approach. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, 37(2):125–148, 2001. Citado na(s) pág(s). 53

- CHAPRA S.; CANALE R. *Numerical methods for engineers*. McGraw-Hill international editions. McGraw-Hill, 6 ed., 2009. Citado na(s) pág(s). 35
- CHAWLA K. *Composite Materials: Science and Engineering*. Springer, 1987. Citado na(s) pág(s). 7
- CHEN .; GUI .; LI .; LIANG . Non-isothermal mold filling and curing simulation for resin transfer molding. **Chinese Journal of Aeronautics**, 16(4):247–252, 2003. Citado na(s) pág(s). 52
- CHEN Y.; RODRIGUEZ A.; MINAIE B. A methodology to determine permeability distribution of a preform in resin transfer molding process. **Journal of Reinforced Plastics and Composites**, 30(2):169–178, 2010. Citado na(s) pág(s). 19
- CHEN Z.; HUAN G.; MA Y. *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. Computational Science And Engineering. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006. Citado na(s) pág(s). 22, 56, 57
- CHUI W. K.; GLIMM J.; TANGERMAN F. M.; JARDINE A. P.; MADSEN J. S.; DONNELLAN T. M.; LEEK R. Process modeling in resin transfer molding as a method to enhance product quality. **SIAM review**, páginas 714–727, 1997. Citado na(s) pág(s). 27, 53, 55
- CHUI W.; GLIMM J.; TANGERMAN F.; JARDINE A.; MADSEN J.; DONNELLAN T.; LEEK R. Porosity migration in RTM. **Numerical methods in thermal problems.**, 9:1323–1334, 1995. Citado na(s) pág(s). 11, 14, 25, 31, 53
- COLLINS R. *Flow of fluids through porous materials*. Reinhold chemical engineering series. Reinhold Pub. Corp., 1961. Citado na(s) pág(s). 16, 17, 18, 24, 26, 30
- COUTINHO B. G. **Solução numérica de problemas de reservatórios de petróleo usando coordenadas generalizadas**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Campina Grande, 2002. Citado na(s) pág(s). 40, 93
- CRAWFORD R. *Plastics Engineering*. Referex Engineering. Elsevier Science, 1998. Citado na(s) pág(s). 9

- CUNHA A. R. **Uma metodologia para simulação numérica tridimensional de reservatórios de petróleo utilizando modelo black-oil e formulação em frações mássicas.** Dissertação de Mestrado, UFSC, Florianópolis, 1996. Citado na(s) pág(s). 86, 89
- DAI F.; ZHANG B.; DU S. Analysis of upper- and lower- limits of fill time in resin transfer mold filling simulation. **Journal of Composite Materials**, 38(13):1115–1136, 2004. Citado na(s) pág(s). 52, 53, 100
- DANIEL I.; ISHAI O. **Engineering Mechanics of Composite Materials.** Oxford University Press, USA, 1994. Citado na(s) pág(s). 7, 8, 9
- DARCY H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon.** Victor Dalmont, 1856. Citado na(s) pág(s). 28
- DEB M. K.; REDDY M. P. Finite element analysis of three-dimensional RTM process. **Em 56th Ann. Tech. Conf. ANTEC**, 1998. Citado na(s) pág(s). 50
- DEO R.; STARNES I.; HOLZWARATH R. Low-cost composite materials and structures for aircraft applications. **Em NATO RTO AVT Panel spring symposium and specialists' meeting Loen, NORWAY**, 2001. Citado na(s) pág(s). 7, 8
- DONG C. Injection gate definition for improving the accuracy of liquid composite molding process simulation. **Journal of Composite Materials**, 41(15):1851–1870, 2007. Citado na(s) pág(s). 34, 52
- DUBOIS P. F. Ten good practices in scientific programming. **Computing in Science and Engineering**, 1(1):7–11, 1999. Citado na(s) pág(s). 42
- EVANS A. S. Reasoning with UML class diagrams. **Em Industrial Strength Formal Specification Techniques, 1998. Proceedings. 2nd IEEE Workshop on**, páginas 102–113. IEEE, 1998. Citado na(s) pág(s). 114
- FAIGLE B. **Two-phase flow modeling in porous media with kinetic interphase mass transfer processes in fractures.** Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2009. Citado na(s) pág(s). 14, 17, 23, 32

- FARRASHKHALVAT M.; MILES J. *Basic Structured Grid Generation: With an introduction to unstructured grid generation*. Referex Engineering. Elsevier Science, 2003. Citado na(s) pág(s). 76
- FERLAND P.; GUITTARD D.; TROCHU F. Concurrent methods for permeability measurement in resin transfer molding. **Polymer Composites**, 17(1):149–158, 1996. Citado na(s) pág(s). 19, 20
- FERZIGER J.; PERIĆ J. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag GmbH, 2002. Citado na(s) pág(s). 13, 22, 38, 41, 43
- FUTTER G. **Investigation of the influences of different refinement approaches in the modelling of multiphase flow in porous media**. Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2012. Citado na(s) pág(s). 23, 24, 25, 27
- GANTOIS R.; CANTAREL A.; FELICES J.-N.; SCHMIDT F. Numerical simulation of resin transfer molding using BEM and Level Set Method. **International Journal of Material Forming**, 3:635–638, 2010. Citado na(s) pág(s). 54
- GAUVIN R.; TROCHU F. Key issues in numerical simulation for liquid composite molding processes. **Polymer composites**, 19(3):233–240, 1998. Citado na(s) pág(s). 19
- GAY D.; HOA S.; TSAI S. *Composite Materials: Design and Applications*. Materials science. Taylor & Francis, 2002. Citado na(s) pág(s). 7
- GEORGE A. *Optimization of resin infusion processing for composite materials: simulation and characterization strategies*. Tese de Doutorado, University of Stuttgart, 2011. Citado na(s) pág(s). 19, 20
- GOODMAN S. *Handbook of Thermoset Plastics*. Plastics & Elastomers. Noyes Publications, 1998. Citado na(s) pág(s). 10
- GOU J.; ZHANG C.; LIANG Z.; WANG B.; SIMPSON J. Resin transfer molding process optimization using numerical simulation and design of experiments approach. **Polymer Composites**, 24(1):1–12, 2003. Citado na(s) pág(s). 33, 53
- HATTABI M.; ECHAABI J. Numerical and experimental analysis of the resin transfer molding process. **Korea-Australia Rheology**, 20(7), 2008. Citado na(s) pág(s). 54

- HETLAND M. L. *Beginning Python: from novice to professional*. Apress, 2005. Citado na(s) pág(s). 109
- HOFFMANN K.; CHIANG S. *Computational Fluid Dynamics*, volume 1. Engineering Education System, 2000. Citado na(s) pág(s). 35, 36, 76, 77, 78, 79
- HUBBERT M. K. Darcy's law and the field equations of the flow of underground fluids. **International Association of Scientific Hydrology. Bulletin**, 2(1):23–59, 1957. Citado na(s) pág(s). 19, 28, 29, 32
- HULTQUIST J. *Interactive Numerical Flow Visualization Using Stream Surfaces*. University of North Carolina at Chapel Hill, 1995. Citado na(s) pág(s). 44
- HUNTER J. D. Matplotlib: a 2D graphics environment. **Computing in Science and Engineering**, 9(3):90–95, 2007. Citado na(s) pág(s). 114
- ISOLDI L. A. A.; OLIVEIRA C. P.; ROCHA L. A. O.; SOUZA J. A.; AMICO S. C. Three-dimensional numerical modeling of RTM and LRTM processes. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, 34:105 – 111, 06 2012. Citado na(s) pág(s). 55
- JACOBS S. *Beginning XML with DOM and Ajax: From Novice to Professional*. Expert's voice in Web development. Apress, 2006. Citado na(s) pág(s). 49
- JAGANATHAN S.; VAHEDI TAFRESHI H.; POURDEYHIMI B. A realistic approach for modeling permeability of fibrous media: 3D imaging coupled with CFD simulation. **Chemical Engineering Science**, 63(1):244–252, 2008. Citado na(s) pág(s). 19
- JASAK H.; WELLER H. G.; NORDIN N. In-cylinder CFD simulation using a C++ object-oriented toolkit. **SAE SP**, páginas 81–188, 2004. Citado na(s) pág(s). 46
- JOSHI S. C.; LAM Y. C.; LIU X.-L. Mass conservation in numerical simulation of resin flow. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 31(10):1061–1068, 2000. Citado na(s) pág(s). 50
- KAIPENG Z.; HUA T.; JIHUI W.; YINGDAN Z. Numerical simulation of mold filling in resin transfer molding using isoparametric method. **Journal of Wuhan University of Technology-Mater. Sci. Ed.**, 20(1):98–101, 2005. Citado na(s) pág(s). 51

- KAVIANY M. *Principles of Heat Transfer in Porous Media*. Mechanical Engineering Series. Springer, 1995. Citado na(s) pág(s). 12
- KAW A. *Mechanics of Composite Materials, Second Edition*. Mechanical and Aerospace Engineering Series. Taylor & Francis, 2010. Citado na(s) pág(s). 6
- KIM S. K.; DANIEL I. M. Observation of permeability dependence on flow rate and implications for liquid composite molding. **Journal of Composite Materials**, 41(7): 837–849, 2007. Citado na(s) pág(s). 19
- KLITZ M. **Homogenised Fluid Flow Equations in Porous Media with Application to Permeability Computations in Textiles**. Diplomarbeit, Institut für Numerische Simulation, Universität Bonn, 2006. Citado na(s) pág(s). 32
- KREITH F.; GOSWAMI D.; SANDOR B. *The CRC Handbook of Mechanical Engineering, Second Edition*. Mechanical Engineering Handbook Series. Taylor & Francis, 2004. Citado na(s) pág(s). 7
- KUMAR V. **Coupling of Free Flow and Flow in Porous Media - Dimensional Analysis and Numerical Investigation**. Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2012. Citado na(s) pág(s). 25, 27, 31
- LAFORE R. *Object-oriented programming in C++*. Kaleidoscope Series. Sams, 2002. Citado na(s) pág(s). 45, 46
- LANGTANGEN H. P. *Python scripting for computational science*, volume 3. Springer, 2008. Citado na(s) pág(s). 47, 48
- LEE S. H.; YANG M.; SONG Y. S.; KIM S. Y.; YOUN J. R. Three-dimensional flow simulation of resin transfer molding utilizing multilayered fiber preform. **Journal of Applied Polymer Science**, 114(3):1803–1812, 2009. Citado na(s) pág(s). 51
- LEFEVRE D.; COMAS-CARDONA S.; BINETRUY C.; KRAWCZAK P. Coupling filtration and flow during liquid composite molding: Experimental investigation and simulation. **Composites Science and Technology**, 69(13):2127–2134, 2009. Citado na(s) pág(s). 50

- LIM S. T.; LEE W. I. An analysis of the three-dimensional resin-transfer mold filling process. **Composites Science and Technology**, 60:961–975, 2000. Citado na(s) pág(s). 41, 51
- LIMA J. C.; CARVALHO C. L. **Extensible markup language (XML)**. Relatório Técnico 002-05, Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás, 2005. Citado na(s) pág(s). 48
- LISEIKIN V. **Grid Generation Methods**. Scientific Computation. Springer, 2010. Citado na(s) pág(s). 76
- LIU M. **Identification of a REV for a given upscaling method**. Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2005. Citado na(s) pág(s). 24, 25, 27
- LIU Q.; PARNAS R. S.; GIFFARD H. S. New set-up for in-plane permeability measurement. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 38(3):954–962, 2007. Citado na(s) pág(s). 19
- LIU X.-L. Isothermal flow simulation of liquid composite molding. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 31(12):1295–1302, 2000. Citado na(s) pág(s). 101
- LONG A. C. **Design and manufacture of textile composites**. CRC Press, 1 edition ed., 2006. Citado na(s) pág(s). 11, 13, 33
- LUTZ M. **Learning Python**. O’Reilly & Associates, Inc., Sebastopol, CA, USA, 3 ed., 2008. Citado na(s) pág(s). 47, 48
- LUZ F. F. **Análise comparativa do escoamento de fluido em experimentos RTM utilizando aplicativos comerciais**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011. Citado na(s) pág(s). 19, 102, 103, 104
- MACHADO G. L. P.; GARAY A. C.; ROESE P. B.; SCHMIDT T. M.; SOUZA J. A.; AMICO S. C. Simulação numérica da infiltração em processo de fabricação de compósitos por RTM. **Em 10º Congresso Brasileiro de Polímeros – CBPol**, páginas 1–10, 2009. Citado na(s) pág(s). 55

- MALISKA C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC, 2 ed., 2004. Citado na(s) pág(s). 34, 37, 39, 41, 46, 70, 78
- MANGANI L. *Development and Validation of an Object Oriented CFD Solver for Heat Transfer and Combustion Modeling in Turbomachinery Applications*. Tese de Doutorado, PhD thesis, Università degli studi di Firenze, 2008. Citado na(s) pág(s). 35, 36, 37
- MARCONDES F. *Simulação numérica usando métodos adaptativos-implícitos e malha de Voronoi de problemas de reservatórios de petróleo*. Tese de Doutorado, Doutorado em Engenharia Mecânica, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, 1996. Citado na(s) pág(s). 90
- MOHAN R. V.; NGO N. D.; TAMMA K. K. On a pure finite-element-based methodology for resin transfer molds filling simulations. **Polymer Engineering & Science**, 39(1): 26–43, 1999. Citado na(s) pág(s). 50
- MORREN G.; BOSSUYT S.; SOL H. 2D permeability tensor identification of fibrous reinforcements for RTM using an inverse method. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 39(9):1530–1536, 2008. Citado na(s) pág(s). 19
- MUSKAT M.; WYCKOFF R. D. *The flow of homogeneous fluids through porous media*. International series in physics. J.W. Edwards, 1946. Citado na(s) pág(s). 12, 28
- NABOVATI A.; LLEWELLIN E. W.; SOUSA A. C. M. A general model for the permeability of fibrous porous media based on fluid flow simulations using the Lattice Boltzmann method. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 40(6-7):860–869, Jul 2009. Citado na(s) pág(s). 19
- NAKAYAMA Y.; BOUCHER R. *Introduction to Fluid Mechanics*. Elsevier Science, 1998. Citado na(s) pág(s). 44
- NEUMAN S. Theoretical derivation of darcy’s law. **Acta Mechanica**, 25:153–170, 1977. Citado na(s) pág(s). 32
- OLIVEIRA C. P.; SOUZA J. A.; AMICO S. C.; ISOLDI L. A.; SILVA R. D. S. Comparação dos métodos VOF e FE/CV aplicados à solução de problemas de RTM. **Vetor (FURG)**, 21:22–33, 2011a. Citado na(s) pág(s). 55

- OLIVEIRA I. R.; RIBEIRO S. M. S.; AMICO S. C.; SOUZA J. A.; LIMA A. G. B.; GARAY A. C. Modelagem e simulação numérica do processo RTM com diferentes tipos de reforços. **Em 9º Congresso Brasileiro de Polímeros – CBPol**, páginas 527–532, 2011b. Citado na(s) pág(s). 55
- OLIVEIRA I. R.; AMICO S. C.; SOUZA J. A.; LUZ F. F.; BARCELLA R. A.; LIMA A. G. B. Resin transfer molding process: a numerical investigation. **Defect and Diffusion Forum**, 334–335:193–198, 2013. Citado na(s) pág(s). 55
- OWEN S. J. A survey of unstructured mesh generation technology. **Em International Meshing Roundtable**, páginas 239–267, 1998. Citado na(s) pág(s). 38, 39
- PATANKAR S. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Electro Skills Series. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. Citado na(s) pág(s). 37
- PEACEMAN D. **Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation**. Developments in Petroleum Science. Elsevier Scientific Publishing Company : distributors for the U.S. and Canada, Elsevier North-Holland, 1977. Citado na(s) pág(s). 27, 56
- PHELAN F. R. Simulation of the injection process in resin transfer molding. **Polymer Composites**, 18(4):460–476, 1997. Citado na(s) pág(s). 50, 121
- POLO G. PyGTK, PyQT, Tkinter and wxPython comparison. **The Python Papers**, 3(1):26–37, 2008. Citado na(s) pág(s). 108
- PORTO J.; LETZOW M.; SANTOS E. D.; AMICO S. C.; SOUZA J. A.; ISOLDI L. A. Computational modeling of RTM and LRTM processes applied to complex geometries. **Engenharia Térmica**, 11:93–99, 2012. Citado na(s) pág(s). 55
- QUILTER A. Composites in aerospace applications. **Aircraft Maintenance Technology**, 16, 1:14–16, 2004. Citado na(s) pág(s). 7
- RAMACHANDRAN P. Mayavi: a free tool for CFD data visualization. **Em 4th annual CFD symposium, Aeronautical Society of India**, 2001. Citado na(s) pág(s). 112
- RAPPIN N.; DUNN R. **wxPython in Action**. Manning, 2006. Citado na(s) pág(s). 109

- ROUHI M. S.; WYSOCKI M.; LARSSON R. Modeling of coupled dual-scale flow–deformation processes in composites manufacturing. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 46(0):108 – 116, 2013. Citado na(s) pág(s). 14
- RUDD C.; LONG A.; KENDALL K. *Liquid Moulding Technologies: Resin Transfer Moulding, Structural Reaction Injection Moulding, and Related Processing Techniques*. Society of Automotive Engineers, 1997. Citado na(s) pág(s). 20, 21, 97, 98, 99, 119, 120, 121, 124
- SAOUAB A.; BRÉARD J.; LORY P.; GARDAREIN B.; BOUQUET G. Injection simulations of thick composite parts manufactured by the RTM process. **Composites science and technology**, 61(3):445–451, 2001. Citado na(s) pág(s). 12
- SAYRE J. R. *Vacuum-assisted resin transfer molding (VARTM) model development, verification, and process analysis*. Tese de Doutorado, Virginia Polytechnic Institute and State University, 2000. Citado na(s) pág(s). 17
- SCHÄFER M. *Computational Engineering – Introduction to Numerical Methods*. Springer, 2006. Citado na(s) pág(s). 34, 35, 36, 38, 39, 40, 63, 73
- SCHELL J.; DELEGLISE M.; BINETRUY C.; KRAWCZAK P.; ERMANNI P. Numerical prediction and experimental characterisation of meso-scale-voids in liquid composite moulding. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 38(12): 2460 – 2470, 2007. Citado na(s) pág(s). 14
- SCHMIDT F. M.; LAFLEUR P.; BERTHET F.; DEVOS P. Numerical simulation of resin transfer molding using linear Boundary Element Method. **Polymer Composites**, 20(6):725–732, 1999. Citado na(s) pág(s). 54
- SCHNEIDERS R. **Mesh generation software**, 1998. URL <http://www.robertschneiders.de/meshgeneration/software.html>. Acessado em: 30/09/2013. Citado na(s) pág(s). 141
- SCHROEDER W.; KITWARE I. *Visualization Toolkit User’s Guide*. Kitware, 2003. Citado na(s) pág(s). 110

- SCHROEDER W.; MARTIN K.; LORENSEN B. *The Visualization Toolkit: An Object-Oriented Approach To 3D Graphics*. Kitware, Inc., 3 ed., 2002. Citado na(s) pág(s). 109, 110, 112
- SCHROEDER W. J.; AVILA L. S.; HOFFMAN W. Visualizing with VTK: a tutorial. **Computer Graphics and Applications, IEEE**, 20(5):20–27, 2000. Citado na(s) pág(s). 109, 113
- SHEN C.; ZHAI M.; GU Y. An improved algorithm for the simulation of injection-molding filling process. **Journal of Reinforced Plastics and Composites**, 24(7):691–698, 2005. Citado na(s) pág(s). 52
- SHI F.; DONG X. 3D numerical simulation of filling and curing processes in non-isothermal RTM process cycle. **Finite Elements in Analysis and Design**, 47(7):764–770, 2011. Citado na(s) pág(s). 51, 53
- SHOJAEI A.; GHAFFARIAN S. R.; KARIMIAN S. M. H. Modeling and simulation approaches in the resin transfer molding process: a review. **Polymer Composites**, 24(4):525–544, Aug 2003a. Citado na(s) pág(s). 11, 12, 14, 30, 33, 55
- SHOJAEI A.; GHAFFARIAN S. R.; KARIMIAN S. M. H. Numerical simulation of three-dimensional mold filling in resin transfer molding. **Journal of Reinforced Plastics and Composites**, 22(16):1497–1529, Nov 2003b. Citado na(s) pág(s). 14, 19, 20, 41, 51
- SHOJAEI A. Numerical simulation of three-dimensional flow and analysis of filling process in compression resin transfer moulding. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 37(9):1434 – 1450, 2006. Citado na(s) pág(s). 100, 101
- SIMACEK P.; ADVANI S. G. Gate elements at injection locations in numerical simulations of flow through porous media: applications to mold filling. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 61(9):1501–1519, 2004. Citado na(s) pág(s). 52
- SINSBECK M. **Adaptive grid refinement for two-phase flow in porous media**. Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2011. Citado na(s) pág(s). 15, 16, 25, 32

- SONG Y.; CHUI W.; GLIMM J.; LINDQUIST B.; TANGERMAN F. Applications of front tracking to the simulation of Resin Transfer Molding. **Computers & Mathematics with Applications**, 33(9):47 – 60, 1997. Citado na(s) pág(s). 53
- SOUKANE S.; TROCHU F. Application of the Level Set method to the simulation of resin transfer molding. **Composites Science and Technology**, 66(7-8):1067–1080, 2006. Citado na(s) pág(s). 54
- STEGMAIER S. *Acceleration techniques for numerical flow visualization*. Tese de Doutorado, University of Stuttgart, 2006. URL <http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2006/2840/>. <http://d-nb.info/981751261>. Citado na(s) pág(s). 44
- STROUSTRUP B. *The C++ programming language*. Professionelle Programmierung. Addison-Wesley, 1997. Citado na(s) pág(s). 46
- TANNEHILL J.; ANDERSON D.; PLETCHER R. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Second Edition*. Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences Series. Taylor & Francis Group, 1997. Citado na(s) pág(s). 77
- THOMPSON J.; WARSI Z.; MASTIN C. *Numerical grid generation: foundations and applications*. North-Holland, 1985. Citado na(s) pág(s). 76
- THOMPSON J.; SONI B.; WEATHERILL N. *Handbook of Grid Generation*. CRC Press, 1999. Citado na(s) pág(s). 36, 76
- THOMPSON J. F.; THAMES F. C.; MASTIN C. W. Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies. **Journal of Computational Physics**, 15(3):299–319, 1974. Citado na(s) pág(s). 78
- TOBY B. H. EXPGUI, a graphical user interface for GSAS. **Journal of Applied Crystallography**, 34(2):210–213, 2001. Citado na(s) pág(s). 42
- TROCHU F.; RUIZ E.; ACHIM V.; SOUKANE S. Advanced numerical simulation of liquid composite molding for process analysis and optimization. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 37(6):890–902, 2006. Citado na(s) pág(s). 50

- TUCKER C. L.; DESSENBERGER R. B. Governing equations for flow and heat transfer in stationary fiber beds. **Em Advani S. G, editor, *Flow and Rheology in Polymer Composites Manufacturing***, páginas 257–257. Elsevier, 1994. Citado na(s) pág(s). 30
- VAFAI K. ***Handbook of Porous Media, Second Edition***. Taylor & Francis, 2005. Citado na(s) pág(s). 9, 14
- VAN DER VORST H. A. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. **SIAM Journal on scientific and Statistical Computing**, 13:631, 1992. Citado na(s) pág(s). 91
- VAZIRI A. Scientific visualization in high-speed network environments. **Computer Networks and ISDN Systems**, páginas 111–129, 1991. Citado na(s) pág(s). 42
- VERLEYE B.; LOMOV S.; LONG A.; VERPOEST I.; ROOSE D. Permeability prediction for the meso–macro coupling in the simulation of the impregnation stage of resin transfer moulding. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, 41(1):29 – 35, 2010. <ce:title>Special Issue: Flow Processes in Composite Materials</ce:title>. Citado na(s) pág(s). 14
- VOLLER V. ***Basic Control Volume Finite Element Methods for Fluids and Solids***. IISc research monographs series. World Scientific Publishing Company Incorporated, 2008. Citado na(s) pág(s). 37
- WELLER H. G.; TABOR G.; JASAK H.; FUREBY C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. **Computers in physics**, 12:620, 1998. Citado na(s) pág(s). 47
- WHITE F. ***Fluid mechanics***. McGraw-Hill, fourth ed., 1998. Citado na(s) pág(s). 22
- XIA B.; SUN D.-W. Applications of Computational Fluid Dynamics (CFD) in the food industry: a review. **Computers and Electronics in Agriculture**, 34(1):5–24, 2002. Citado na(s) pág(s). 42, 43
- YANG J.; JIA Y.; SUN S.; MA D.; SHI T.; AN L. Mesoscopic simulation of the impregnating process of unidirectional fibrous preform in resin transfer molding. **Materials Science and Engineering: A**, 435-436:515–520, 2006. Citado na(s) pág(s). 53

YOO Y.-E.; LEE W. I. Numerical simulation of the resin transfer mold filling process using the Boundary Element Method. **Polymer Composites**, 17(3):368–374, 1996.

Citado na(s) pág(s). 54

ZELLE J. M. *Python Programming: An Introduction to Computer Science*.

Franklin, Beedle & Associates, Inc., 2004. Citado na(s) pág(s). 44, 45, 114, 146