

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA**



**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO
PROCESSO DE CURA DO FILAMENTO
ENROLADO**

Antonio de Oliveira Samel Moraes
Alfredo Fernandes dos Santos Jr.

Projeto de Final de Curso

Orientadores

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr, D. SC.
Verônica Maria de Araújo Calado, D. SC.

Abril 2009

OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE ENROLAMENTO FILAMENTAR

Antonio de Oliveira Samel Moraes

Alfredo Fernandes dos Santos Jr.

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção de grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Argimiro Resende Secchi, D.Sc

Carlos Eduardo Fontes, D.Sc

Fernando Luiz Bastian, D.Sc

Orientado por:

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., D.Sc.

Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Abril 2009

Moraes, Antonio de Oliveira Samel.

Santos, Alfredo Fernandes

Otimização do Processo de Enrolamento Filamentar/Antonio de Oliveira Samel Moraes e Alfredo Fernandes dos Santos Jr.. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2009.

vii, 84 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2009.

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr. e Verônica Maria de Araújo Calado

1. Enrolamento Filamentar 2. Otimização de Processos 3. Cinética de Reação 4. Monografia. (Graduação – UFRJ/EQ) 5. Evaristo Chalbaud Biscaia Jr. e Verônica Maria de Araújo Calado I. Otimização do Processo de Enrolamento Filamentar

AGRADECIMENTOS

Os autores prestam muitos agradecimentos aos professores e orientadores Evaristo e Verônica pela oportunidade concedida para realização deste projeto e por todo aprendizado advindo de sua realização.

Um agradecimento especial ao Rogério pela amizade e a intensa colaboração, que foi indispensável para a conclusão deste trabalho.

Ao professor Maurício pelo apoio fornecido no treinamento das redes neuronais, ferramenta muito importante que foi utilizada no trabalho.

Ao Denis pelo grande apoio na realização da experiência de Enrolamento Filamentar e ao Prof. Fernando Luiz Bastian por permitir a utilização dos equipamentos do Laboratório de Compósitos do Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ.

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE CURA DO FILAMENTO ENROLADO

Antonio de Oliveira Samel Moraes

Alfredo Fernandes dos Santos Jr.

Abril 2009

Orientadores: Prof. Evaristo Chaubald Biscaia Jr., D.Sc.

Prof^a Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc.

O processo de Enrolamento Filamentar é um método de produção de sólidos de revolução feitos de compósitos de matriz polimérica os quais são largamente utilizados em áreas industriais tais como, militares, químicas e petroquímicas e de materiais esportivos. Nesse processo, camadas de fibras passam através de um banho de resina e são continuamente enroladas sobre um suporte rotativo onde o sistema resina/fibra é transformado, através de uma reação química exotérmica, no material compósito. Neste trabalho são apresentadas a modelagem do processo de Enrolamento Filamentar e a sua resolução numérica, utilizando o método das linhas, para predição do comportamento térmico do compósito durante um ciclo de cura da resina, sendo os modelos matemáticos utilizados baseados nos balanços unidimensionais transientes de massa e de energia. Dois modelos resultam das duas formas diferentes utilizadas para calcular a taxa cinética de reação da resina. No primeiro, ela é calculada através de um modelo autocatalítico e no segundo, por uma rede neuronal. A equação do balanço de energia é discretizada na direção radial com o auxílio da técnica de diferenças finitas, resultando em um sistema de equações algébrico-diferenciais que são integradas utilizando-se a sub-rotina DASSL. A cinética autocatalítica é utilizada inicialmente para a validação do modelo, que é feita com dados experimentais da literatura e com dados obtidos em um experimento próprio de Enrolamento Filamentar. Segue-se a simulação do modelo híbrido, que é comparado ao anterior para mostrar a validade da nova abordagem proposta. Por fim, é feita a otimização do ciclo de cura através da minimização de uma função objetivo econômica, que é integrada ao sistema de equações do processo, utilizando o método de enxame de partículas (PSO).

ÍNDICE

Capítulo 1	1
Capítulo 2	4
2.1 Compósitos de Matriz Polimérica	4
2.1.1 Reforços	5
2.1.2 Matriz Polimérica	6
2.1.3 Reação de Cura das Resinas	7
2.1.4 Propriedades Físicas do Compósito	9
2.2 O Processo de Enrolamento Filamentar	9
2.3 O Método das Diferenças Finitas	11
2.3.1 Expansões em Série de Taylor	12
2.3.2 O Método das Linhas	15
2.4 Redes Neurais Artificiais	17
2.4.1 Ajuste das Redes. O algoritmo Backpropagation	20
2.5 O Algoritmo do Enxame de Partículas (PSO)	22
Capítulo 3	27
3.1 Modelo Fenomenológico	30
3.2 Modelo Híbrido	33
Capítulo 4	35
4.1 Formulação Numérica do Modelo	35
4.3 Otimização do Ciclo de Cura	40
4.3 Procedimento Experimental	44
Capítulo 5	48
5.1 Validação do Modelo	48
5.2 Análise de sensibilidade do modelo	52
5.2.2 Variação Radial dos Perfis	55
5.3 Simulação com o modelo híbrido	57
5.2.1 Resultados do Treinamento das Redes	57
5.2.2 Resultados da Simulação do Processo	62

5.3 Otimização do Ciclo de Cura.....	64
5.3.1 Otimização do Processo	64
Capítulo 6	72
Referencias Bibliográficas.....	73
Apêndice.....	76
Apêndice A – Solução de Sistema Dinâmico de 2ª Ordem Subamortecido.....	76
Apêndice B – Aplicação do PSO modificado à otimização de funções padrão	82

Capítulo 1

Introdução

Os compósitos poliméricos, também denominados de plásticos reforçados, são materiais formados por duas fases, uma fase descontínua (o reforço) inserida em uma matriz polimérica, que se agregam físico-quimicamente após o processo de polimerização da resina. Esses materiais vêm se apresentando como uma excelente alternativa aos materiais tradicionais de engenharia, devido principalmente a sua facilidade de produção e as suas características, que possibilitam uma melhoria na segurança e confiabilidade dos processos, assim como uma redução nos custos de uma planta industrial.

As vantagens que devem ser destacadas nesses materiais são o baixo peso, o que reduz os custos de montagem e facilita a sua instalação, a elevada resistência a corrosão, que os tornam excelentes alternativas para aplicação em ambientes úmidos, alta resistência a pressões e temperaturas elevadas, além de excelentes propriedades mecânicas e durabilidade. (Contant, 2004)

Dentre os vários métodos de fabricação, destaca-se o Enrolamento Filamentar (*Filament Winding*), um processo muito utilizado na produção em larga escala de sólidos de revolução como tanques e dutos. Nesse processo, camadas contínuas de fibras passam através de um banho de resina e são continuamente enroladas sobre um suporte cilíndrico rotativo (o mandril) até que o sistema seja transformado, através de uma reação química exotérmica, no material compósito.

A modelagem matemática adotada para o processo está fundamentada nos balanços unidimensionais transientes de massa e de energia e em modelos para a descrição da taxa cinética de reação que ocorre durante a cura da resina. Especificamente, a modelagem apresentada neste trabalho é feita para a predição do comportamento térmico do compósito durante o ciclo de cura da resina, sendo a energia liberada durante a reação, inserida como um termo de geração no balanço de energia do compósito.

Uma solução do sistema de equações pelo método das linhas é apresentada. A técnica de diferenças finitas é utilizada para discretizar à direção radial das equações do balanço de energia, resultando em um sistema de equações algébrico-diferenciais que são integradas no tempo utilizando-se a sub-rotina DASSL.

A taxa cinética de reação é inicialmente descrita por um modelo autocatalítico e dados experimentais retirados do trabalho de Calius, Lee e Springer (1990) são utilizados para validação da modelagem adotada. A validação do modelo é feita, ainda, com dados experimentais próprios obtidos em um experimento de Enrolamento Filamentar. Em seguida, um modelo híbrido proposto por Pagano *et al* (2008)^a, em que a taxa cinética é descrita por uma rede neuronal, é apresentado e comparado ao anterior para mostrar a validade desta nova abordagem. Os modelos propostos são, por fim, utilizados para determinar ciclos de cura otimizados para o processo, por meio da minimização de uma função objetivo econômica, que é integrada ao sistema de equações do processo.

No Capítulo 2 é feita uma revisão de literatura onde são expostos os principais conceitos a respeito dos tópicos tratados durante o trabalho. Apresenta-se também a discussão de alguns trabalhos a fim de mostrar a amplitude dos estudos que vêm sendo realizados sobre os diversos assuntos tratados no texto.

No Capítulo 3 a modelagem matemática do processo é apresentada, assim como as considerações adotadas. São apresentados os dois modelos que serão resolvidos: o modelo determinístico, cuja taxa é estimada por um modelo autocatalítico e o modelo híbrido, onde a taxa é descrita por uma rede neuronal. É feito também o adimensionamento das equações para os modelos apresentados.

No Capítulo 4 são apresentadas todas as metodologias utilizadas nas simulações, na otimização do processo e no procedimento experimental. São apresentadas, a formulação numérica do modelo de equações pelo método das diferenças finitas e o procedimento utilizado para a otimização. Neste capítulo é apresentada ainda uma função objetivo alternativa, que é utilizada para a otimização do processo.

No Capítulo 5 os principais resultados são apresentados e discutidos. Inicialmente, apresenta-se a validação experimental do modelo determinístico com dados experimentais retirados do trabalho de Calius, Lee e Springer (1990) e os dados obtidos no experimento de Enrolamento Filamentar realizado. Em seguida, apresentam-se os resultados obtidos utilizando-se o modelo híbrido que é comparado ao anterior para mostrar a validade desta nova abordagem. Segue-se então a otimização do ciclo de cura que é realizada pela minimização da função objetivo para todos os casos tratados anteriormente, utilizando-se um algoritmo modificado do Enxame de Partículas (PSO) Moraes *et al* (2008).

O Capítulo 6 encerra este trabalho apresentando as conclusões e considerações finais e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão de Literatura

A demanda crescente por materiais compósitos, em particular os compósitos poliméricos, faz crescer a importância do estudo de novas formas de produção desses materiais em larga escala e o aprimoramento dos processos já existente. Neste contexto, o processo de Enrolamento Filamentar vem sendo amplamente estudado atualmente a fim de se aperfeiçoar este método, que se apresenta hoje como uma das principais formas de produção destes materiais.

Vários autores vêm estudando muito esse processo. Nesta linha, merecem destaque os trabalhos de Calius, Lee e Springer (1990) que estudaram detalhadamente a modelagem do processo, tanto em nível de comportamento mecânico quanto térmico, realizando a validação experimental do mesmo, o trabalho de Contant *et al* (2004) que estudou com sucesso a aplicação de redes neurais para previsão do comportamento mecânico e térmico dos produtos gerados no processo e o trabalho de Pagano *et al* (2008)^a que estudaram a utilização de modelos híbridos e propuseram métodos para otimização do processo, que serão também abordados neste trabalho.

2.1 Compósitos de Matriz Polimérica

Os compósitos poliméricos são materiais formados por uma ou mais fases descontínuas inseridas em uma matriz polimérica contínua, sendo suas características resultado da combinação das propriedades dessas fases. Esses materiais se apresentam atualmente como uma excelente alternativa aos materiais tradicionais de Engenharia por apresentarem diversas vantagens em relação aos mesmos como, baixa massa específica, elevada resistência à corrosão e à pressões e temperaturas elevadas, excelentes propriedades mecânicas e durabilidade.

2.1.1 Reforços

Dentre os diversos tipos de reforços, as fibras estão entre as mais utilizadas para conferir resistência mecânica aos compósitos. Em particular, as fibras de vidro ocupam uma posição de destaque devido ao seu baixo coeficiente de dilatação térmica, boas propriedades mecânicas, retenção de propriedades mecânicas em altas temperaturas, facilidade de processamento e baixo custo. (Albuquerque, 2005).

As Tabelas 2.1 e 2.2 mostram as propriedades de alguns tipos de fibras de vidro e uma comparação qualitativa entre as propriedades das fibras de vidro e de grafite, muito utilizada também no processo de Enrolamento Filamentar.

Tabela 2.1. Propriedades Típicas de Fibras de Vidro (Albuquerque, 2005)

Fibras	Peso Específico (g/cm ³)	Limite de Resistência (MPa)	Módulo de Elasticidade (GPa)	Coefficiente de Expansão Térmica (10 ⁻⁶ /K)
Tipo E	2,58	3450	72,5	5,0
Tipo ECR	2,62	3625	72,5	5,0
Tipo S	2,48	4590	86	5,6

Tabela 2.2. Relação entre Propriedades de Fibras de Vidro e de Carbono (Calado e Advani, 2000)

Fibra	Custo	Propriedades Elétricas	Resistência Química	Resistência Temperatura Elevada	Propriedades Mecânicas	Condutividade de Térmica
Vidro	Baixo	Baixa	Bom	Bom	Muito Bom	Baixo
Carbono	Alto	Excelente	Excelente	Excelente	Excelente	Alto

2.1.2 Matriz Polimérica

Matrizes metálicas, cerâmicas e poliméricas podem ser usadas para materiais compósitos, fibrosos ou não. Entretanto, os compósitos de matriz polimérica são os mais utilizados atualmente. Essas matrizes podem ser divididas em termoplásticas e termorrígidas, de acordo com a mudança de seu comportamento mecânico e químico com o aumento da temperatura.

Matrizes termoplásticas são aquelas que fundem quando submetidas a aquecimento. São utilizadas para produzir compósitos com elevada tenacidade, apresentando um alto custo de processamento devido à complexidade tecnológica de processamento. Entre as mais utilizadas estão o polipropileno, policloreto de vinila (PVC), nylon, poliuretano, poliétercetona, polissulfeto de fenileno e polissulfona.

As matrizes termorrígidas são aquelas que formam ligações cruzadas durante o processo de fabricação e não “amolecem” quando reaquecidas. São as mais utilizadas para fabricação de compósitos devido ao seu menor custo e facilidade de processamento. Dentre essas matrizes, as resinas poliéster, vinil éster e a epóxi correspondem a cerca de 90 % dos sistemas poliméricos utilizados na fabricação de compósitos poliméricos de matriz termorrígida. (Albuquerque, 2005)

As resinas poliéster são as mais largamente utilizadas devido ao seu menor custo e pela facilidade de produção de compósitos com esta matriz. As resinas epóxi são o segundo tipo mais utilizado. São mais caras do que a primeira, mas apresentam melhor resistência mecânica e à umidade, assim como uma menor contração durante o processo de cura. (Albuquerque, 2005).

A Tabela 2.3 mostra um quadro que faz uma comparação qualitativa entre as propriedades das resinas termorrígidas.

Tabela 2.3. Propriedades das Resinas Termorrígidas (Calado e Advani, 2000)

<i>Resina</i>	<i>Desempenho</i>	<i>Processamento</i>	<i>Custo</i>
Poliéster Éster Vinílico Epóxi Fenólica Poliamida	Baixo ↓ Elevado	Fácil ↓ Difícil	Baixo ↓ Elevado

2.1.3 Reação de Cura das Resinas

As matrizes termorrígidas mencionadas acima são obtidas através de uma reação de polimerização altamente exotérmica denominada de reação de cura, em que as moléculas da resina reagem com uma mistura de monômeros, auxiliados por aditivos que são os agentes de cura, iniciadores, inibidores e catalisadores da reação. Esses aditivos são adicionados para possibilitar a formação das ligações cruzadas na matriz polimérica, promovendo o endurecimento.

O grau de cura mede a conversão desta reação e é definido de acordo com a Equação (2.1)

$$\alpha \equiv \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad (2.1)$$

em que C_{A0} é a concentração inicial do reagente e C_A é a concentração do reagente em um instante qualquer do processo.

Este parâmetro é, entretanto, determinado indiretamente pela razão entre o calor liberado em um certo instante e o calor total da reação de cura em condições adiabáticas, ambos obtidos no DSC (*Differential Scanning Calorimeter*), que monitora o grau de cura através do calor gerado durante a reação de cura. (Santos, 2007)

$$\alpha \equiv \frac{\Delta H(t)}{\Delta H_{Total}} \quad (2.2)$$

O mecanismo de cura é um fenômeno complexo e ainda não está totalmente desvendado. Dessa forma, a taxa de reação é prevista através de modelos empíricos, em que os parâmetros são estimados a partir de dados experimentais, que podem ser obtidos no DSC.

Um modelo amplamente utilizado na literatura é o modelo autocatalítico, descrito pela Equação 2.3

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = [K_1 + K_2 \alpha^m] \cdot (1 - \alpha)^n \quad (2.3)$$

As constantes K_1 e K_2 são as funções no formato de Arrhenius e, como tal, são funções da temperatura.

$$K_i = A_i \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{RT}\right) \quad (2.4)$$

Nestas equações seis parâmetros cinéticos devem ser estimados a partir de dados experimentais. São eles:

- ΔE_1 e ΔE_2 = Energias de Ativação
- A_1 e A_2 = Fatores Pré Exponenciais
- $m+n$ = Ordem global da reação

A influência das fibras na cinética da reação também não é bem compreendida. Contudo, há confirmação experimental da influência da fração volumétrica das fibras sobre os parâmetros cinéticos do modelo, feita por Han *et al* (1986) que estudaram também a influência da variação de dosagens dos catalisadores e dos iniciadores sobre os parâmetros cinéticos.

2.1.4 Propriedades Físicas do Compósito

As propriedades físicas do compósito são combinações das propriedades das resinas e das fibras utilizadas, sendo calculadas neste trabalho a partir das seguintes Equações.

$$P = \phi P_f + (1 - \phi) P_r \quad (2.5)$$

$$P = \frac{1}{\frac{\phi}{P_f} + \frac{(1 - \phi)}{P_r}} \quad (2.6)$$

Sendo:

P	Propriedade física do compósito
P_f	Propriedade física da fibra
P_r	Propriedade da resina
ϕ	Fração mássica

A Equação 2.5 foi utilizada para o cálculo da densidade e da capacidade calorífica do compósito, enquanto que a Equação 2.6 foi utilizada no cálculo da condutividade térmica.

2.2 O Processo de Enrolamento Filamentar

O processo de Enrolamento Filamentar é um método automático de produção de sólidos de revolução como tubos, dutos e tanques, feitos de compósitos de matriz polimérica. Nesse processo, camadas de fibras são puxadas de carretéis, passando através de um banho de resina e são continuamente enroladas sobre um suporte rotativo, o mandril, que serve de molde para obtenção da forma geométrica da peça desejada.

O sistema enrolado pode ser curado continuamente durante o enrolamento à temperatura ambiente, ou, alternativamente em estufa. No primeiro caso, chamado de cura

on-line, há um fornecimento de energia ao sistema imediatamente antes de começar o enrolamento, como mostrado na Figura 2.2(b). No segundo, chamado de processo com cura a quente, um ciclo de cura, no qual a temperatura do ambiente externo é controlada de maneira adequada é imposto ao sistema para promover a cura do sistema.

A Figura 2.2 mostra duas representações esquemáticas do Processo de Enrolamento Filamentar. Na Figura 2.2(b), θ é o ângulo de orientação das fibras no compósito, ω é a velocidade angular do mandril, que junto com a velocidade da plataforma V determina o ângulo θ , T é a tensão aplicada nas fibras, o que produz uma pressão de compactação no reforço e w é a espessura do feixe de fibras que está sendo enrolado.

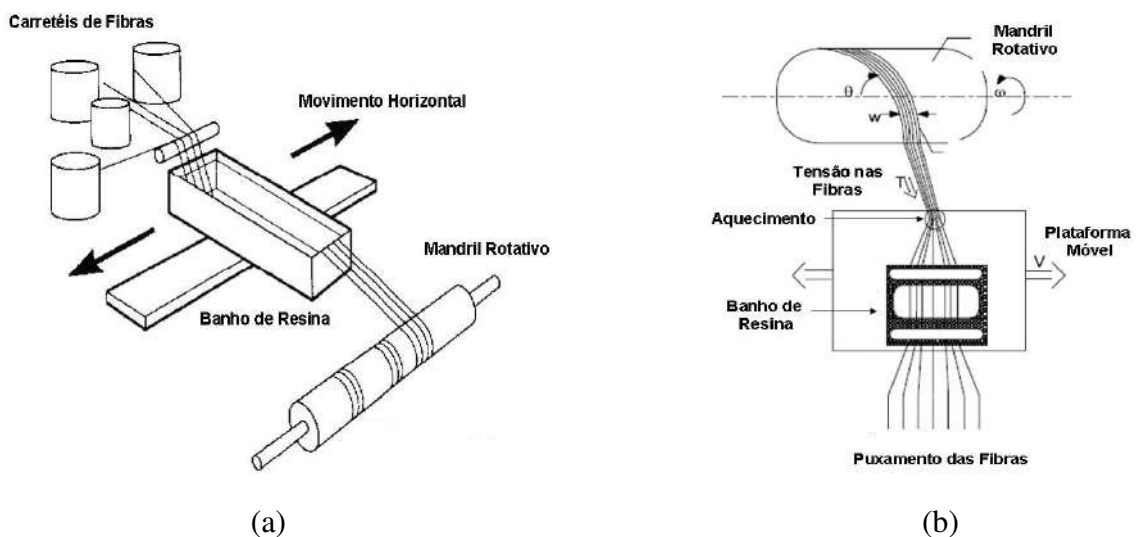


Figura 2.2. Representações Esquemáticas do Processo de Enrolamento Filamentar. (a) Representação simplificada. (b) Representação detalhada

A Figura 2.2 (b) mostra ainda um aquecimento imediatamente antes de o sistema começar a ser enrolado no mandril. O aquecimento é feito de modo a iniciar o processo de cura do sistema (Processos com cura a frio).

A determinação do ciclo de cura adequado, e por vezes o ciclo ótimo, para promover a reação de cura da resina é uma tarefa bastante trabalhosa, visto o nível de complexidade envolvido nas reações de polimerização da resina. Todavia, isso constitui uma das principais tarefas deste trabalho que são a predição do comportamento térmico do

compósito durante o processo e a determinação de um ciclo de cura otimizado para o processo que satisfaça aos requisitos do problema.

2.3 O Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas é uma das técnicas de resolução de sistemas equações diferenciais baseadas na discretização do domínio das variáveis independentes de um modelo. O objetivo principal desses métodos é transformar um sistema de equações diferenciais, em um problema composto por equações algébricas, lineares ou não, que podem então ser resolvidas por diversos métodos de solução, amplamente conhecidos e utilizados.

A resolução de problemas por esses métodos consiste, inicialmente, em discretizar o domínio contínuo das variáveis independentes do modelo, subdividindo-o em pontos onde as variáveis dependentes podem ser calculadas através de operações algébricas.

O segundo passo é gerar aproximações para as derivadas das variáveis dependentes nesses pontos discretos em termos dos valores dessas variáveis em um conjunto de pontos desse domínio. O resultado desse procedimento é um conjunto de equações algébricas acopladas.

A solução do problema é composta, portanto, de um conjunto enumerável de pontos onde os valores dessas variáveis são conhecidos.

O tratamento do problema encerra-se pela especificação das propriedades físicas, parâmetros pertinentes do modelo e pela definição das condições iniciais e de contorno, estas últimas sendo introduzidas, geralmente, pela modificação das equações em pontos nas fronteiras do domínio.

A Figura 2.3 mostra um exemplo da discretização de um domínio bidimensional. A Figura 2.3(b) mostra os pontos onde são conhecidas as soluções do problema.

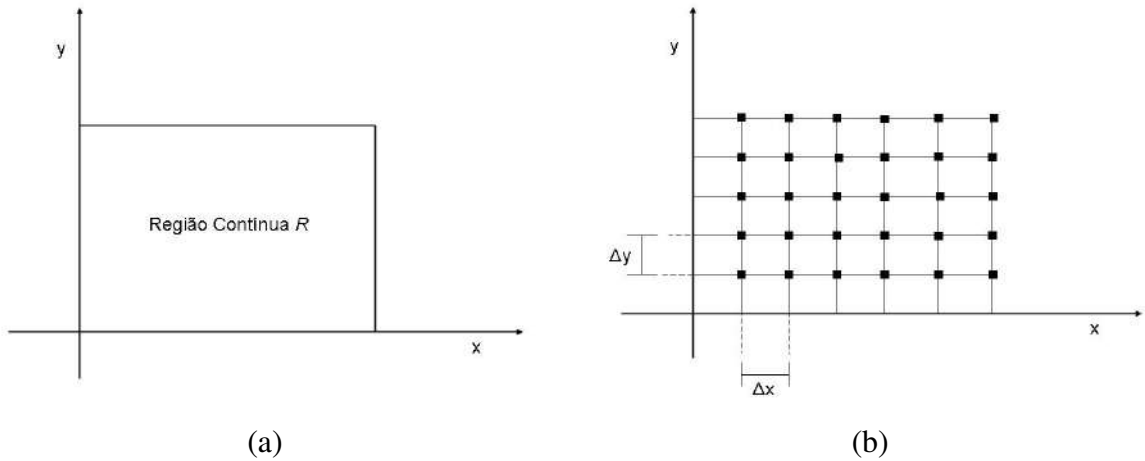


Figura 2.3. Exemplo de discretização de domínio bidimensional. (a) Região Contínua. (b) Região discretizada

2.3.1 Expansões em Série de Taylor

A resolução de um problema pelo método das diferenças finitas consiste, portanto, em aplicar os passos descritos anteriormente, aproximando as derivadas do modelo através de equações de diferenças finitas, as quais podem ser facilmente obtidas a partir de uma expansão em série de Taylor das variáveis dependentes do problema em torno de um ponto base do domínio discreto.

Para uma função $f(x)$, contínua no intervalo $[a,b]$, o teorema de Taylor permite escrever, para todo x , pertencente a esse intervalo as seguintes expressões para f :

$$f(x_j + \Delta x_j) = f(x_j) + \sum_{n=1}^{N-1} \left[\frac{1}{n!} \cdot \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \Big|_{x_j} \cdot (\Delta x_j)^n \right] + R_N \quad (2.7)$$

$$f(x_j - \Delta x_j) = f(x_j) + \sum_{n=1}^{N-1} \left[\frac{(-1)^n}{n!} \cdot \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \Big|_{x_j} \cdot (\Delta x_j)^n \right] + R_N \quad (2.8)$$

Em que R_N , definido pela Equação 2.9, é o resto dessa soma e fornece o erro de truncamento da série, Δx_j , definido pela Equação 2.10, é o passo no intervalo e o subíndice j indica um ponto base do domínio discreto.

$$R_N = \frac{1}{N!} \cdot \frac{\partial^N f}{\partial x^N} \cdot (\Delta x_j)^N \quad (2.9)$$

$$\Delta x_j = x_{j+1} - x_j = x_j - x_{j-1} \quad (2.10)$$

O truncamento dessa série permite gerar aproximações para as derivadas, sendo o grau da aproximação determinado pelo número de pontos utilizados na aproximação da função e pela ordem do truncamento.

A aproximação da primeira derivada de f pode ser obtida, por exemplo, a partir do truncamento da série descrita pela Equação 2.7 no primeiro termo do somatório. Assim, a função no ponto $j+1$, fica descrita segundo a seguinte Equação:

$$f(x_{j+1}) = f(x) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_j} \cdot \Delta x_j + O(\Delta x_j)^2 \quad (2.11)$$

em que

$$x_{j+1} = x_j + \Delta x_j \quad \text{e} \quad x_{j-1} = x_j - \Delta x_j$$

O termo $O(\Delta x_j)^2$ indica a ordem da aproximação adotada. Dividindo a Equação 2.11 por Δx_j , obtêm-se uma aproximação para a primeira derivada de $f(x)$ no ponto j .

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_j} = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{\Delta x_j} + O(\Delta x_j) \quad (2.12)$$

A Equação 2.12 é uma equação de diferenças finitas que utiliza diferenças progressivas (*forward differences*), visto que foram utilizados o valor da função no ponto

$j+1$ (adiantado) do domínio discreto e o valor da função no próprio ponto j . Representa também uma aproximação de primeira ordem, o que indica que uma redução no espaçamento entre os pontos do domínio leva a uma redução de mesma ordem do erro da aproximação da derivada. Observa-se, entretanto, que essa redução é local, correspondendo a redução do erro de aproximação da derivada em j . O erro total da solução final do problema é resultado da propagação de erros ao longo do processo de resolução das equações.

Da mesma maneira, uma aproximação por diferenças regressivas (*backwards differences*) poderia ser obtida pela manipulação algébrica da Equação 2.8. A aproximação da derivada é dada, neste caso, pela seguinte Equação.

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_j} = \frac{f(x_j) - f(x_{j-1})}{\Delta x_j} + O(\Delta x_j) \quad (2.13)$$

O erro na aproximação das derivadas pode ainda ser melhorado através da utilização da informação contida em outros pontos do domínio. Para aproximação da primeira derivada, isso pode ser feito através da subtração das Equações 2.7 e 2.8 truncadas no segundo termo.

$$f(x_{j+1}) = f(x_j) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_j} \cdot \Delta x_j + \frac{1}{2!} \cdot \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_j} \cdot (\Delta x_j)^2 + O(\Delta x_j)^3 \quad (2.14)$$

$$f(x_{j-1}) = f(x_j) - \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_j} \cdot \Delta x_j + \frac{1}{2!} \cdot \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_j} \cdot (\Delta x_j)^2 + O(\Delta x_j)^3 \quad (2.15)$$

Subtraindo-se as equações 2.14 e 2.15 obtêm-se:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_j} = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_{j-1}))}{2\Delta x_j} + O(\Delta x_j)^2 \quad (2.16)$$

Essa equação é denominada de aproximação por diferenças centrais (*Central Differences*), visto que utilizada para aproximação da derivada no ponto j , o valor da função no ponto anterior e no ponto posterior. O fato de utilizar a informação nos pontos anterior e posterior aumenta a ordem da aproximação, o que significa, neste caso, que reduções no tamanho do passo empregado provocam reduções quadráticas no erro local de aproximação da derivada.

A aproximação da segunda derivada também pode ser facilmente obtida pela manipulação das Equações 2.7 e 2.8. Somando-se essas equações, obtêm-se a seguinte equação para aproximação da derivada segunda de f em j .

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_j} = \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1}))}{(\Delta x_j)^2} + O(\Delta x_j)^2 \quad (2.17)$$

A Equação 2.17 é uma aproximação de segunda ordem para a derivada segunda de f em j .

A ordem da aproximação pode ser melhorada à medida que se utilizam mais pontos (mais valores funcionais) na aproximação das derivadas. Diversos métodos utilizam essa forma para melhorar a ordem desta aproximação. Entretanto, aproximações envolvendo os valores da função em mais de três pontos adjacentes geram uma maior dificuldade na resolução do sistema de equações algébricas resultantes do processo de discretização. (Pinto e Lage, 2001)

2.3.2 O Método das Linhas

O método das linhas consiste na discretização parcial de uma equação diferencial parcial em que todas as variáveis independentes, exceto uma, são discretizadas. A equação diferencial deve ser de primeira ordem em relação a essa variável ou de ordem maior desde que possa ser convertida por uma transformação de variável. Em modelos descritos pelas equações de transporte, essa derivada aparece geralmente como o termo de acúmulo, sendo a variável não discretizada o tempo. O processo de discretização resulta, neste caso, em um

sistema de equações algébrico diferenciais em que as derivadas são de primeira ordem no tempo e podem ser integradas nesta variável para obtenção dos perfis desejados.

A grande vantagem da utilização desse método reside na existência de um grande número de pacotes computacionais de integração de sistema de equações algébricos diferenciais disponíveis para utilização, dentre os quais se destaca a sub-rotina DASSL em linguagem de programação Fortran desenvolvida por Linda Petzold (1989), que utiliza métodos BDF (*Backwards Differentiation Formula*).

2.4 Redes Neurais Artificiais

As Redes Neurais Artificiais são ferramentas matemáticas inspiradas no funcionamento do cérebro humano, que são capazes de representar o comportamento de um processo ou de um sistema, sem a necessidade de um modelo fenomenológico.

Dentre os diversos tipos de redes, destaca-se aqui a rede *Multilayer Perceptron* (MLP), muito utilizada em diversos problemas da Engenharia Química, em particular na análise de dados, onde é aplicada, por exemplo, na descrição do comportamento dinâmico de processos, na avaliação de modelos e na modelagem e controle de processos. Neste trabalho, por exemplo, esta rede será utilizada para descrever a taxa cinética de cura de uma resina durante o processo de Enrolamento Filamentar.

Essa rede (MLP) é do tipo *feedforward* e, como o próprio nome diz, consiste em elementos (*perceptrons*) distribuídos em três tipos de camadas. Uma camada de entrada (*input*), camadas escondidas (*hidden*) e uma camada de saída (*output*). A Figura 2.4 mostra o exemplo de uma topologia típica de uma rede *feedforward* com dois neurônios na camada de entrada, uma camada escondida com n neurônios e um neurônio na camada de saída.

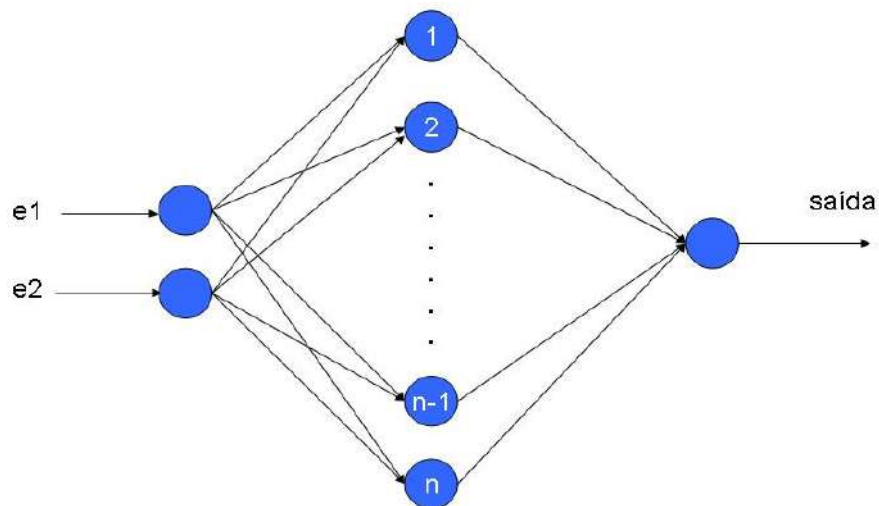


Figura 2.4. Topologia de uma Rede Neuronal *feedforward* típica com uma camada escondida e um neurônio de saída.

A cada interconexão entre os neurônios, representados na Figura 2.4, é associado um peso, onde estão contidas as informações que serão transmitidas através da rede. A cada neurônio é associado ainda um *bias*, que corresponde a um limite interno de ativação do neurônio (De Souza Jr., 2001). O ajuste desses parâmetros corresponde à etapa de ajuste da rede que será discutido na próxima seção.

O funcionamento de uma rede *feedforward*, depois do ajuste, é bastante simples. Consiste no processamento dos sinais de entrada através de suas camadas consecutivas até os neurônios finais da camada de saída da rede. A Figura 2.5 exemplifica o funcionamento de um neurônio da rede.

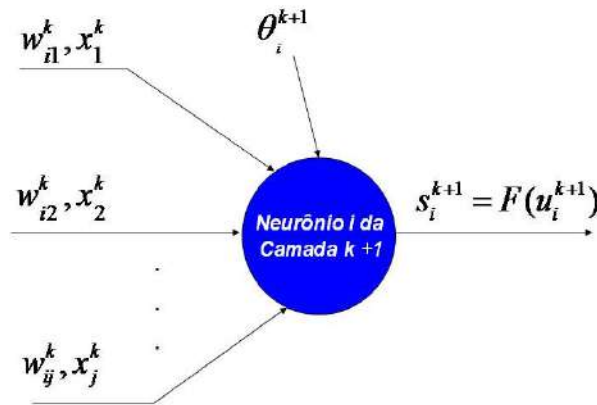


Figura 2.5. Esquema de processamento em um neurônio *i* em uma rede de topologia *feedforward*

O processamento em cada neurônio se dá de acordo com as Equações 2.18 e 2.19. Nessas equações, N é o número de neurônios na camada k , w_{ij}^k são os *pesos* associados às interconexões dos neurônios j da camada k com o neurônio i da camada $k+1$ e θ_i^{k+1} é o *bias* associado ao neurônio i da camada $k+1$.

$$u_i^{k+1} = \left(\sum_{j=1}^N w_{ij}^k x_j^k \right) + \theta_i^{k+1} \quad (2.18)$$

$$s_i^{k+1} = F(u_i^{k+1}) \quad (2.19)$$

A função F é chamada de função de ativação, podendo ser de vários tipos. As equações 2.20 a 2.24 dão alguns exemplos de funções de ativação globais utilizadas, as quais, segundo De Souza Jr. (2001) produzem uma saída ativa para um intervalo amplo de valores de entrada, fornecendo uma aproximação global para os dados experimentais.

- Função Linear

$$F(u_i^{k+1}) = u_i^{k+1} \quad (2.20)$$

- Função Degrau

$$F(u_i^{k+1}) = \delta \quad \text{se } u_i^{k+1} < 0 \quad (2.21)$$

$$F(u_i^{k+1}) = -\delta \quad \text{se } u_i^{k+1} > 0 \quad (2.22)$$

- Função Sigmoidal (Logística)

$$F(u_i^{k+1}) = \frac{1}{1 + \exp(-u_i^{k+1})} \quad (2.23)$$

- Função Tangente Hiperbólica

$$F(u_i^{k+1}) = \tanh(u_i^{k+1}) \quad (2.24)$$

A função linear é geralmente utilizada para os neurônios da camada de entrada. Para camadas internas (camadas escondidas), usualmente, se obtêm melhores resultados utilizando-se funções do tipo Tangente Hiperbólica e Sigmoidal, esta última também sendo bastante utilizada nos neurônios de saída. A Figura 2.6 mostra os gráficos das funções Sigmoidal e da Tangente Hiperbólica.

Há também as funções de ativação locais, que produzem uma saída ativa apenas na vizinhança de seu centro de ativação (De Souza Jr., 2001). O exemplo principal dessa classe são as funções de base radial, como, por exemplo, a função Gaussiana.

- Função Gaussiana

$$F(u_i^{k+1}) = \prod_{i=1}^n \exp\left[\frac{(s_i^{k+1} - \mu_{ij})^2}{-2\sigma_i^2}\right] \quad (2.25)$$

em que, σ_i é o desvio padrão da Gaussiana e μ_{ij} é o centro ativo da mesma (De Souza Jr. 2001)

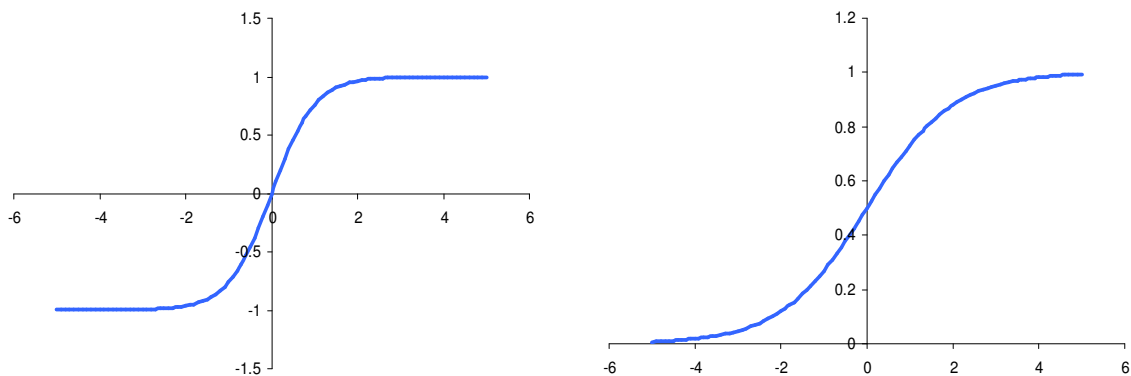


Figura 2.6. Gráficos das Funções de Ativação Tangente Hiperbólica e Sigmoidal. (a) Tangente Hiperbólica. (b) Sigmoidal

2.4.1 Ajuste das Redes. O algoritmo Backpropagation

O ajuste de uma Rede Neuronal consiste na exposição repetida a dados históricos de um processo ou de um sistema particular de análise (geralmente dados experimentais), onde são conhecidos os valores das entradas e das saídas. A partir dessa exposição (cada exposição corresponde a uma Época), os pesos e os biases são ajustados de modo a minimizar o erro entre os valores preditos pela rede e os valores de saída conhecidos

Dentre os algoritmos utilizados neste processo de treinamento, o algoritmo de retro propagação (*backpropagation*) é o mais conhecido e utilizado devido à sua simplicidade e popularidade. De acordo com De Souza Jr. (2001), as redes treinadas por esse algoritmo são multicamadas, sem conexões laterais e os seus sinais são *feedforward*.

O ajuste por este método é feito pelo ajuste dos pesos e dos biases através da minimização da função objetivo que fornece a soma dos erros quadráticos entre os dados de saída e a resposta predita pela rede de acordo com a Equação 2.26 (Barros, 2005)

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x} \in A} [f(\mathbf{x}) - s(\mathbf{x})]^2 \quad (2.26)$$

Na Equação 2.26 A é um conjunto de elementos $[\mathbf{x}, f(\mathbf{x})]$ que corresponde a uma amostra para treinamento, \mathbf{w} é o vetor dos pesos e bias e $s(\mathbf{x})$ é uma saída obtida para uma amostra \mathbf{x} no conjunto A .

A minimização pode ser feita através do método do gradiente descendente que se baseia no cálculo do negativo do gradiente da função da função objetivo para calcular a direção da busca. Dessa forma a atualização dos pesos e dos biases se faz através da Equação 2.27, onde o parâmetro λ_j corresponde ao peso ou o bias na iteração j da busca e η corresponde à taxa de aprendizagem adotada.

$$\lambda_{j+1} = \lambda_j - \eta \frac{\partial E}{\partial \lambda_j} \quad (2.27)$$

O cálculo do gradiente da função objetivo depende da função s utilizada na equação 2.26. Esta função pode ser de vários tipos, devendo ser, entretanto, continuamente diferenciável, visto a necessidade do cálculo do gradiente do erro no método.

O treinamento se faz, portanto, resumidamente, em duas fases. Na primeira é feita a “passagem para frente” dos dados de entrada através da rede (*forward*) de acordo com as Equações 2.18 e 2.19. Na segunda fase, o erro obtido entre a saída atual da rede e o valor alvo pretendido é “propagado para trás” (*backpropagation*), atualizando os pesos e os biases de acordo com a Equação 2.27.

2.5 O Algoritmo do Enxame de Partículas (PSO)

O PSO (*Particle Swarm Optimization*) é um algoritmo heurístico e estocástico de otimização e tem como motivação a simulação do comportamento social encontrado entre diversas espécies na natureza. Pertence a classe dos algoritmos baseados em inteligência de enxames, que partem do pressuposto de que o comportamento individual de cada elemento do grupo depende fortemente de uma componente social. Essa componente social está relacionada à capacidade de interação entre os elementos do enxame, através de mecanismos de troca de informação entre os indivíduos, que podem ser explícitos ou implícitos.

O algoritmo está fundamentado em princípios básicos da inteligência de enxames formulados por Kennedy e Eberhart em 1995. Os princípios formulados por eles podem ser resumidos da seguinte maneira:

- **Avaliação:** relacionado à capacidade das partículas em melhorarem suas próprias avaliações do ambiente. No PSO, cada partícula usa como critério para mudança de posição e de velocidade, a sua melhor posição encontrada até o momento e a melhor posição encontrada por todo o enxame.
- **Comparação:** Os elementos do enxame devem ser capazes de decidir sobre melhores alternativas através de comparações com outros indivíduos. No PSO, as partículas realizam comparações entre si e com outros indivíduos para poderem mudar ou não seu comportamento.
- **Imitação:** relacionada à capacidade de imitação de ações consideradas melhores. As partículas do enxame, embora possam mudar seu comportamento pela comparação com os outros indivíduos, só irão imitar as melhores ações. No PSO, a posição e a velocidade das partículas só serão alteradas quando melhores valores da função objetivo forem registrados.

Proposto inicialmente por Kennedy e Eberhart (1995), o algoritmo consiste em, a cada iteração, atualizar a velocidade e a posição de cada partícula, de acordo com os melhores registros de posições individuais das partículas e com o melhor registro global de posição do enxame. Dessa forma, os autores propuseram as seguintes Equações:

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = \mathbf{v}_i^k + c_1 \cdot r_1 (\mathbf{xm}_i^k - \mathbf{x}_i^k) + c_2 \cdot r_2 (\mathbf{xg}^k - \mathbf{x}_i^k) \quad (2.28)$$

$$\mathbf{x}_i^{k+1} = \mathbf{x}_i^k + \mathbf{v}_i^{k+1} \quad (2.29)$$

Nestas equações, os índices k e i denotam a iteração e a partícula, \mathbf{v} e \mathbf{x} são os vetores velocidade e posição das partículas, c_1 e c_2 são duas constantes positivas, chamados de parâmetros cognitivo e social respectivamente, r_1 e r_2 são dois números sorteados aleatoriamente entre 0 e 1, \mathbf{xm}_i é o vetor da melhor posição encontrada pela partícula i e \mathbf{xg} é o vetor de melhor posição encontrada por todo o enxame.

Essa versão inicial do algoritmo vem sofrendo diversas modificações ao longo dos últimos anos. Uma dessas alterações, proposta por Shi e Eberhart (1998), consiste na introdução de um novo parâmetro, o peso de inércia, que faz uma ponderação no termo relativo à velocidade atual da partícula, de acordo com a Equação 2.30:

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = w \cdot \mathbf{v}_i^k + c_1 \cdot r_1 (\mathbf{xm}_i^k - \mathbf{x}_i^k) + c_2 \cdot r_2 (\mathbf{xg}^k - \mathbf{x}_i^k) \quad (2.30)$$

$$\mathbf{x}_i^{k+1} = \mathbf{x}_i^k + \mathbf{v}_i^{k+1} \quad (2.31)$$

O peso de inércia, w , promove um balanceamento entre o caráter local e global da busca. Este parâmetro pode ser uma constante ou uma função positiva das iterações, linear ou não. Os autores observaram que valores altos de w aumentam o caráter global do processo, aumentando as chances de que o valor ótimo seja encontrado. Contudo, o número de iterações necessárias para que as partículas converjam torna-se maior. Por outro lado,

valores baixos do peso de inércia favorecem o caráter local da busca e fazem com que as partículas converjam rapidamente, podendo, entretanto, não obter sucesso neste caso.

Os autores propuseram então, diminuir linearmente o peso de inércia ao longo das iterações de acordo com a Equação 2.32:

$$w = w_f + (w_i - w_f) \cdot \left(\frac{K_{max} - K}{K_{max}} \right) \quad (2.32)$$

Na equação 2.32, w_f e w_i são os parâmetros correspondentes aos valores final e inicial do peso de inércia, K_{max} é o número máximo de iterações do algoritmo fornecido pelo usuário e K é a iteração atual.

Dessa forma, no início do processo as partículas apresentam um caráter mais exploratório sobre a região de busca, que vai se tornando local à medida que valores melhores da função objetivo vão sendo registrados.

Outra alteração, que será a versão do algoritmo utilizada neste trabalho, proposta por Biscaia Jr. et al. (2004) resulta de uma nova forma de cálculo da velocidade das partículas e na definição de novos números aleatórios. Essa modificação consiste em considerar o movimento de cada uma das partículas como um sistema de 2ª ordem subamortecido, análogo ao sistema massa-mola, de acordo com a Equação 2.33 (forma adimensional):

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = -2\xi_i \cdot \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} - q \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_i) \quad (2.33)$$

Nesta equação, a derivada segunda é o termo correspondente à aceleração (2ª lei de Newton), o termo correspondente a primeira derivada está relacionado às forças dissipativas que causam o amortecimento do movimento das partículas e o termo linear está relacionado à força motriz que determina o movimento das partículas. Este último é uma proporção entre a posição atual da partícula e o ponto \mathbf{X}_i , resultante da média ponderada, entre a melhor posição individual da partícula (\mathbf{x}_{m_i}) e a melhor posição do enxame (\mathbf{x}_g).

$$\mathbf{X}_i = \lambda \mathbf{x} \mathbf{m}_i + (1 - \lambda) \mathbf{x} \mathbf{g} \quad (2.34)$$

onde λ é um número aleatório sorteado no intervalo $[0,1]$. Os parâmetros q e ξ_i são respectivamente, o ganho estático do sistema e o fator de amortecimento das partículas.

A solução analítica desse sistema de equações é apresentada no apêndice A ao final deste trabalho. As formas finais das equações para a posição e a velocidade das partículas são dadas pelas Equações 2.35 e 2.36

$$\mathbf{x}_i^{k+1} = \mathbf{X}_i^k + e^{(-\xi_i' \Delta t')} \left\{ (\mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k) \cdot \cos(\omega' \Delta t') + [\xi_i' \cdot (\mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k) + \mathbf{v}_i^k] \cdot \frac{\text{sen}(\omega' \Delta t')}{\omega'} \right\} \quad (2.35)$$

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = e^{(-\xi_i' \Delta t')} \left\{ \mathbf{v}_i^k \cdot \cos(\omega' \Delta t') - [\xi_i' \mathbf{v}_i^k + (\mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k) \cdot (\omega'^2 + \xi_i'^2)] \cdot \frac{\text{sen}(\omega' \Delta t')}{\omega'} \right\} \quad (2.36)$$

Nestas equações, os seguintes parâmetros estão definidos:

$$\begin{aligned} \omega' &\equiv \frac{\omega}{q} & \omega &= (q - \xi_i'^2)^{1/2} \\ \xi_i' &\equiv \frac{\xi_i}{\sqrt{q}} & \Delta t' &\equiv \sqrt{q} \Delta t & \mathbf{v}_i^k &\equiv \frac{\mathbf{v}_i^k}{\sqrt{q}} \end{aligned}$$

Essas equações sempre convergem para valores de ξ_i' menores do que 1. A faixa limitada desse parâmetro para o qual a partícula converge facilita a sua definição. Uma forma conveniente para se definir este parâmetro é, dessa maneira, fazê-lo crescer de 0, limite inferior, onde as partículas não “sentem” o amortecimento e o algoritmo apresenta um caráter global no processo de busca, até 1, limite superior, onde a busca passa a ser local.

O parâmetro $\Delta t'$ fornece o passo de tempo das equações de posição e velocidade das partículas. Quanto maior esse parâmetro, mais rápida é a convergência. Contudo,

dependendo do problema, o algoritmo pode não obter sucesso se esse número for muito grande. Logo, também é conveniente fazer esse parâmetro crescer a medida que se processa o algoritmo.

Uma proposta apresentada em um trabalho anterior (Moraes, 2008) faz esse parâmetro aumentar hiperbolicamente em função do número de iterações de acordo com a Equação 2.37.

$$w = w_i + (w_f - w_i) \cdot \frac{K}{K + K_{\min}} \quad (2.37)$$

em que K_{\min} é um número mínimo de iterações que o algoritmo deve realizar, sendo um parâmetro fornecido pelo usuário.

Além dessas três versões do algoritmo apresentadas, outras versões vêm sendo também estudada ao longo dos últimos anos. Nesta linha, podemos destacar os trabalhos de Arumugam e Rao (2008), que propuseram parâmetros adaptativos para o método através da formulação de algoritmos híbridos entre PSO e Algoritmos Genéticos e o trabalho de CLERC (1999) com a introdução do fator de constrição à Equação 2.28, garantindo a convergência do método.

O PSO vem sendo também amplamente utilizado na otimização de processos e problemas da Engenharia Química. Destacam-se aqui, os trabalhos de Pagano (2008)^a e a dissertação de mestrado de Schwaab (2005) que utilizaram o PSO em problemas de estimação de parâmetros, procedimento bastante comum dentro da Engenharia Química.

Capítulo 3

Modelagem Matemática do Processo

O sistema é modelado como um mandril cilíndrico oco aonde as fibras, previamente banhadas na resina, vão sendo enroladas e curadas para a formação do compósito.

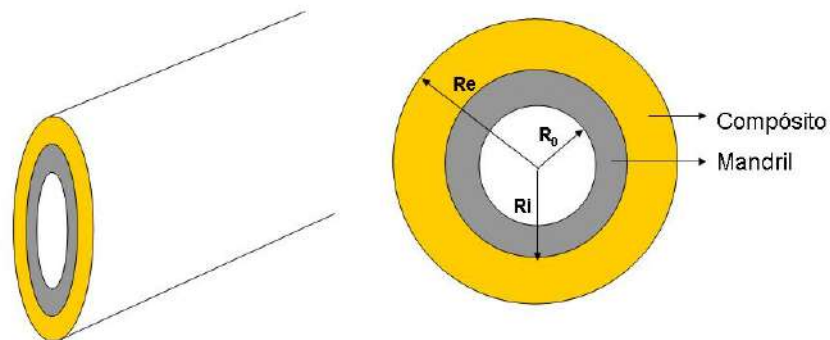


Figura 3.1. Esquema do Processo de Enrolamento Filamental

A modelagem matemática adotada para esse processo está fundamentada nos balanços unidimensionais transientes de massa e de energia para um cilindro infinito. A energia liberada durante a reação de cura da resina é inserida no balanço de energia do compósito como um termo de geração, diretamente proporcional à taxa cinética de reação do sistema resina-fibra, enquanto que apenas a difusão de energia é considerada no mandril.

A Equação 3.1 mostra a equação geral para a conservação de energia térmica num sistema sem escoamento (Equação da Difusão com Geração).

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k(\nabla \cdot \nabla T) + \rho \dot{Q} \quad (3.1)$$

As hipóteses do modelo são:

- Não há perdas de calor pelas laterais do filamento;

- Transferência de calor apenas na direção radial;
- Não há contração durante a cura;
- Espessura uniforme;
- Temperatura constante na região oca do mandril;
- k , ρ e C_p dos materiais são constantes

A equação 3.1 é reescrita para o mandril e para o compósito, em coordenadas cilíndricas, considerando apenas gradientes radiais de temperatura, de acordo com as equações 3.2 e 3.3

$$\rho_m C_p \frac{\partial T_m}{\partial t} = k_m \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_m}{\partial r} \right) \quad (3.2)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho \dot{Q} \quad (3.3)$$

A energia liberada durante a reação de cura é descrita por Zhao *et al* (2001) de acordo com a Equação 3.4

$$\rho \dot{Q} = \rho_r \phi_r (-\Delta H_R) \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (3.4)$$

A taxa cinética de cura da resina é uma função da temperatura e do grau de cura do sistema de acordo com a Equação 3.5.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = F(\alpha, T) \quad (3.5)$$

O modelo do processo se resume dessa forma ao seguinte sistema de equações diferenciais parciais.

$$\rho_m C_p \frac{\partial T_m}{\partial t} = k_m \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_m}{\partial r} \right) \quad (3.6)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho \dot{Q} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = F(\alpha, T) \quad (3.8)$$

Sujeitas às seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\alpha(r, 0) = 0 \quad (3.9)$$

$$T_m(r, 0) = T(r, 0) = T_0 \quad (3.10)$$

$$T_m(t, R_0) = T_{\text{int}} \quad (3.11)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_i} = k_m \frac{\partial T_m}{\partial r} \Big|_{r=R_i} \quad (3.12)$$

$$T(t, R_i) = T_m(t, R_i) \quad (3.13)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_e} = k_{ar} \frac{\partial T_{ar}}{\partial r} \Big|_{r=R_e} \quad (3.14)$$

A Equação 3.14 é descrita em termos de um coeficiente de transferência de calor, segundo a Lei de Newton do resfriamento de acordo com a Equação 3.15

$$k_{ar} \frac{\partial T_{ar}}{\partial r} \Big|_{r=R_e} = h_{ar} [T(t, R_e) - T_{\text{inf}}] \quad (3.15)$$

A condição de contorno 3.14 é então reescrita de acordo com a Equação 3.16

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_i} = \frac{h_{ar}}{k} [T(t, R_e) - T_{\text{inf}}] \quad (3.16)$$

A função F será descrita de duas formas neste trabalho, dando origem a dois modelos para o processo. No primeiro, chamado aqui de modelo fenomenológico, um modelo autocatalítico assim como descrito por Calius, Lee e Springer (1990) é adotado, cujos parâmetros foram estimados por Pagano *et al* (2008)^b a partir de dados cinéticos isotérmicos para a resina Epóxi DER. No segundo, chamado de modelo híbrido e proposto por Pagano *et al* (2008)^a, ela é descrita por uma rede neuronal, ajustada com os mesmos dados cinéticos citados.

3.1 Modelo Fenomenológico

Neste modelo, a taxa cinética de reação é descrita pelo modelo cinético autocatalítico dado pela Equação 3.17.

$$R_{\alpha} = \frac{d\alpha}{dt'} = (K_1 + K_2\alpha^n)(1-\alpha)^m \quad (3.17)$$

Para o adimensionamento das equações, o seguinte conjunto de variáveis adimensionais é definido.

$$r \equiv \frac{r'}{R_e}; \quad u \equiv \frac{r'}{R_i}; \quad t \equiv \frac{t'}{\tau}; \quad \Theta \equiv \left(\frac{T-T_0}{T_0} \right) \sigma_1 \quad \Theta_m \equiv \left(\frac{T_m-T_0}{T_0} \right) \sigma_1$$

Logo, têm-se as seguintes relações:

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = \frac{T_0}{\tau \sigma_1} \frac{\partial \Theta}{\partial t} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t'} = \frac{1}{\tau} \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial r'} \left(r' \frac{\partial T}{\partial r'} \right) = \frac{T_0}{\sigma_1 R_e} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial r'} \left(r' \frac{\partial T_m}{\partial r'} \right) = \frac{T_0}{\sigma_1 R_i} \frac{\partial}{\partial u} \left(u \frac{\partial \Theta_m}{\partial u} \right) \quad (3.21)$$

As Equações do balanço de energia do mandril e do compósito tornam-se:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{k\tau}{\rho C_p R_e^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) + \frac{\rho_r \phi_r \sigma_1 (-\Delta H)}{\rho C_p T_0} R_\alpha \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial \Theta_m}{\partial t} = \frac{k_m \tau}{\rho_m C_{pm} R_i^2} \frac{\partial}{\partial u} \left(u \frac{\partial \Theta_m}{\partial u} \right) \quad (3.23)$$

Definindo os seguintes parâmetros:

$$\lambda_m \equiv \frac{k_m \tau}{\rho_m C_{pm} R_i^2}; \quad \lambda \equiv \frac{k\tau}{\rho C_p R_e^2}; \quad B \equiv \frac{\phi_r \rho_r \sigma_1 (-\Delta H_R)}{\rho C_p T_0}$$

implica:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\lambda}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) + BR_\alpha \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial \Theta_m}{\partial t} = \frac{\lambda_m}{u} \frac{\partial}{\partial u} \left(u \frac{\partial \Theta_m}{\partial u} \right) \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \tau \frac{\partial \alpha}{\partial t'} = \tau (k_1 + k_2 \alpha^n) (1 - \alpha)^m \quad (3.26)$$

Definindo ainda, os seguintes parâmetros adimensionais:

$$\sigma_1 \equiv \frac{E_1}{RT_0}; \quad \sigma_2 \equiv \frac{E_2}{RT_0}; \quad \xi \equiv \frac{A_2}{A_1} e^{(\sigma_1 - \sigma_2)}$$

implica em

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = A_1 \tau e^{(-\sigma_1)} \psi(\alpha, \Theta) = Da \psi(\alpha, \Theta) \quad (3.27)$$

$$Da \equiv A_1 \tau \exp(-\sigma_1) \quad (3.28)$$

$$\psi(\alpha, \Theta) \equiv \left[e^{\left(\frac{\Theta \sigma_1}{\Theta + \sigma_1}\right)} + \xi \alpha^a e^{\left(\frac{\Theta \sigma_2}{\Theta + \sigma_1}\right)} \right] (1 - \alpha)^b \quad (3.29)$$

Logo, o balanço de massa e os balanços de energia para o compósito e mandril são dados, respectivamente, por:

$$\frac{\partial \Theta_m}{\partial t} = \frac{\lambda_m}{u} \frac{\partial}{\partial u} \left(u \frac{\partial \Theta_m}{\partial u} \right) \quad t > 0 \quad \text{e} \quad \frac{R_0}{Ri} < u < 1 \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\lambda}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) + BDa \psi(\alpha, \Theta) \quad t > 0 \quad \text{e} \quad \frac{Ri}{Re} < r < 1 \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = Da \psi(\alpha, \Theta) \quad t > 0 \quad (3.32)$$

Sujeitas as seguintes condições iniciais e de contorno nas formas adimensionais:

Condições Iniciais

$$\alpha(0, r) = 0; \quad \Theta(0, r) = 0; \quad \Theta_m(0, u) = 0$$

Condições de Contorno

$$\Theta_m(t, 0) = \Theta_{int} \quad (3.33)$$

$$\Theta_m(t,1) = \Theta\left(t, \frac{R_i}{R_e}\right) \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial r} \Big|_{r=\frac{R_i}{R_e}} = \gamma \frac{\partial \Theta_m}{\partial u} \Big|_{u=1} \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial r} \Big|_{r=1} = -Nu[\Theta(t,1) - \Theta_{\text{inf}}] \quad (3.36)$$

em que

$$Nu \equiv \frac{h_{ar} R_e}{k} \qquad \gamma \equiv \frac{k_m R_e}{k_r R_i}$$

Para determinação do número de Nusselt, a seguinte correlação para escoamento externo com convecção natural foi utilizada. (Incropera e DeWitt, 5ª Ed., 2002)

$$Nu = C \cdot Re^a \cdot Pr^{1/3} \quad (3.37)$$

Para números de Reynolds baixos ($0,4 < Re < 4,0$): $C = 0,989$ e $a = 0,303$.

3.2 Modelo Híbrido

A taxa cinética é neste caso descrita por uma rede neuronal, a qual é treinada a partir de dados cinéticos isotérmicos para o sistema (resina-fibra).

As mesmas hipóteses do modelo fenomenológico foram utilizadas neste modelo.

O adimensionamento das equações é feito de modo semelhante ao primeiro modelo, com uma pequena alteração apenas na definição da variável adimensional da temperatura, o qual é definido da seguinte maneira:

$$\Theta \equiv \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right) \quad (3.38)$$

Com essa definição, o sistema de equações devidamente adimensionado é dado abaixo.

$$\frac{\partial \Theta_m}{\partial t} = \frac{\lambda_m}{u} \frac{\partial}{\partial u} \left(u \frac{\partial \Theta_m}{\partial u} \right) \quad t > 0 \text{ e} \quad \frac{R_0}{Ri} < u < 1 \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\lambda}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right) + \bar{B} \cdot \text{Rede_Neuronal}(\alpha, \Theta) \quad t > 0 \text{ e} \quad \frac{Ri}{Re} < r < 1 \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \text{Rede_Neuronal}(\alpha, \Theta) \quad t > 0 \quad (3.41)$$

$$\lambda_m \equiv \frac{k_m \tau}{\rho_m C_{pm} R_i^2}; \quad \lambda \equiv \frac{k \tau}{\rho C_p R_e^2}; \quad \bar{B} \equiv \frac{\phi_r \cdot \rho_r (-\Delta H_R)}{\rho C_p T_0}$$

Neste modelo também foi utilizada as mesmas condições iniciais e de contorno do modelo fenomenológico.

Capítulo 4

Metodologia

Neste capítulo são apresentadas as metodologias utilizadas para a simulação do processo de cura Filamento Enrolado e para a otimização do mesmo.

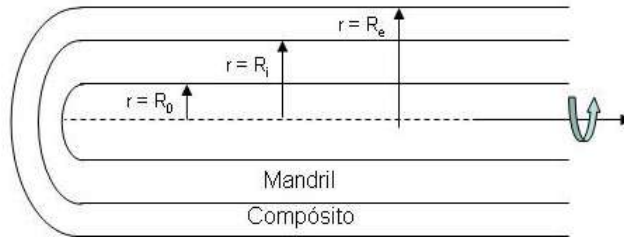
Primeiro é apresentado a formulação numérica do problema, a qual é feita para a simulação do problema. As propriedades físicas e parâmetros cinéticos utilizados são apresentados nesta primeira seção

Em seguida é apresentado o procedimento utilizado para a otimização do problema assim como as funções objetivos utilizadas.

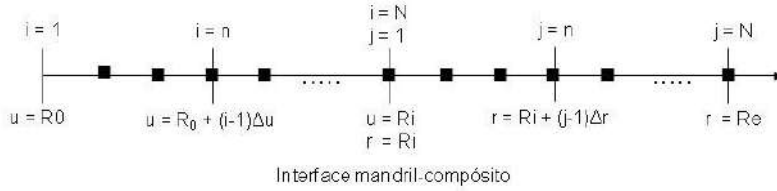
Por fim apresentam os detalhes do procedimento experimental realizado para obtenção de um novo conjunto de dados que foram utilizados para confirmar a validade do modelo.

4.1 Formulação Numérica do Modelo

A simulação do processo consiste em resolver as equações do modelo através do método das linhas, utilizando a técnica das diferenças finitas para discretizar a direção radial das equações. O sistema de equações resultantes é integrado no tempo para obtenção dos perfis de temperatura e de grau de cura no compósito. A Figura 4.1 mostra o domínio discreto utilizado. A Figura 4.1(a) mostra o esquema da geometria do equipamento considerando o mandril oco e a Figura 4.1.(b) mostra a discretização do domínio. A variável u é utilizada para a direção radial na região do mandril e a variável r no compósito. A variável inteira N é o número de divisões utilizadas na direção radial, tanto para o compósito quanto para o mandril e a posição em que $r = u = R_i$ é a interface entre o mandril e o compósito.



(a)



(b)

Figura 4.1. Esquema de Discretização do Domínio. (a) Esquema da Geometria do Modelo. (b) Domínio Discretizado

As Equações abaixo mostram o sistema de equações adimensionais resultantes da discretização das equações do modelo. As derivadas radiais de primeira ordem das equações são aproximadas por diferenças centrais, enquanto que para as condições de contorno utilizam-se diferenças progressivas e regressivas.

$i = 1$ (Condição de Contorno 1)

$$u_i = \frac{R_0}{R_i} \quad (4.1)$$

$$\Theta_m(u_i, t) = \Theta_{\text{int}} \quad (4.2)$$

Para $i = 2$ até $N-1$ (Equações de Balanço de Energia do Mandril)

$$u_i = \frac{R_0}{R_i} + (i-1) \cdot \Delta u \quad (4.3)$$

$$\frac{d\Theta_m(u_i, t)}{dt} = \frac{\lambda_m}{u_i} \cdot \left[\frac{\Theta_m(u_{i+1}, t) - \Theta_m(u_{i-1}, t)}{2\Delta u} + u_i \cdot \frac{\Theta_m(u_{i+1}, t) - 2\Theta_m(u_i, t) + \Theta_m(u_{i-1}, t)}{(\Delta u)^2} \right] \quad (4.4)$$

Para $i = N$ e $j = 1$ (condições de Contorno 2 e 3)

$$u_i = 1 \quad (4.5)$$

$$r_j = \frac{Ri}{Re} \quad (4.6)$$

$$\Theta(r_j, t) = \Theta_m(u_i, t) \quad (4.7)$$

$$\frac{\Theta(r_{j+1}, t) - \Theta(r_j, t)}{\Delta r} = \gamma \cdot \frac{\Theta_m(u_i, t) - \Theta_m(u_{i-1}, t)}{\Delta u} \quad (4.7)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = Da \cdot \psi[\alpha(r_j, t), \Theta(r_j, t)] \quad (4.8)$$

Para $j = 2, N-1$

$$r_j = \frac{Ri}{Re} + (j-1) \cdot \Delta r \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\Theta(r_j, t)}{dt} = \frac{\lambda}{r_j} \cdot \left[\frac{\Theta(r_{j+1}, t) - \Theta(r_{j-1}, t)}{2\Delta r} + r_j \cdot \frac{\Theta(r_{j+1}, t) - 2\Theta(r_j, t) + \Theta(r_{j-1}, t))}{(\Delta r)^2} \right] \\ + B \cdot Da \cdot \psi[\alpha(r_j, t), \Theta(r_j, t)] \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = Da \cdot \psi[\alpha(r_j, t), \Theta(r_j, t)] \quad (4.11)$$

Para $j = N$. Condição de Contorno 4

$$\frac{\Theta(r_j, t) - \Theta(r_{j-1}, t)}{\Delta r} = -Nu \cdot [\Theta(r_j, t) - \Theta_{\text{inf}}] \quad (4.12)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = Da \cdot \psi[\alpha(r_j, t), \Theta(r_j, t)] \quad (4.13)$$

Esse sistema de equações (Equações 4.1 a 4.13) foi integrado no tempo para obtenção dos perfis temporais de temperatura e de grau de cura no compósito. Para essa integração foi utilizada a sub-rotina DASSL de Petzold (1989).

O perfil externo de temperatura (ciclo de cura) é do tipo apresentado pela Figura 4.2. No interior do mandril (cavidade oca) considerou-se uma temperatura constante.

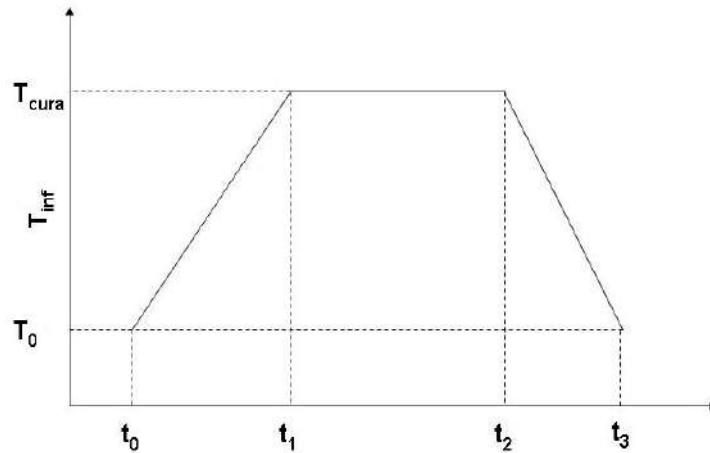


Figura 4.2. Ciclo de cura utilizado na simulação do modelo.

As Tabelas 4.1 a 4.4 apresentam as propriedades físicas, os parâmetros cinéticos, os parâmetros geométricos e os parâmetros do ciclo de cura apresentado na Figura 4.2. Os dados apresentados na Tabela foram retirados do trabalho de Calius, Lee e Springer (1990) e utilizados na simulação para a validação do modelo.

Tabela 4.1. Propriedades Físicas da Fibra, da Resina e do Mandril

Propriedade	Símbolo [dimensão]	Fibra de Vidro S- Glass	Resina. Fiberite 976	Mandril de Alumínio
Massa Específica	ρ [kg m ⁻³]	2491	1578	2768
Capacidade Calorífica	Cp [kJ/kg.°C]	0,7120	1,0048	1,2979
Condutividade Térmica	K [kW/m.°C]	3,03 10 ⁻³	2,5788x10 ⁻³	167,54x10 ⁻³

Tabela 4.2. Parâmetros Cinéticos da Equação da Taxa de Cura de Calius et al. (1990)

Parâmetro	Símbolo [dimensão]	Valor
Constante dos Gases	R_g [kJ kgmol ⁻¹ K ⁻¹]	8,314
Energia de Ativação 1	E_1 [kJ kgmol ⁻¹]	6,25 x 10 ⁴
Energia de Ativação 2	E_2 [kJ kgmol ⁻¹]	5,68 x 10 ⁴
Fator Pré Exponencial 1	A_1 [s ⁻¹]	4,4 x 10 ³
Fator Pré Exponencial 2	A_2 [s ⁻¹]	7,5 x 10 ³
Expoente da Eq. Cinética	m []	1,03
Expoente da Eq. Cinética	n []	1,22

Tabela 4.3. Parâmetros Geométricos para cilindro F4 de Calius, Lee e Springer (1990)

Parâmetro	Símbolo [dimensão]	Valor
Raio interno do Mandril	R_0 [cm]	2,54
Raio Externo do Mandril	R_i [cm]	3,81
Raio externo do conjunto	R_e [cm]	6,67

Tabela 4.4. Parâmetros do Ciclo de Cura

Parâmetro	Valor
t0 [h]	0
t1 [h]	4,8
t2 [h]	7,6
t3 [h]	12,0
T ₀ [K]	298,15
T _c [K]	449,82

A Tabela 4.5 mostra os parâmetros cinéticos estimados por Pagano *et al* (2008)^b, para a resina Epóxi DER, que também foram utilizados para a validação do modelo com os dados obtidos do experimento, o qual foi realizado com esta resina e com fibras de vidro.

A Tabela 4.6 mostra os parâmetros do ciclo de cura utilizado na experiência.

Tabela 4.5. Parâmetros Cinéticos da Equação da Taxa de Cura por Pagano (2008)^b

Parâmetro	Símbolo [dimensão]	Valor
Constante dos Gases	R_g [kJ Kg ⁻¹ mol ⁻¹ K ⁻¹]	8,314
Energia de Ativação 1	E_1 [kJ Kg ⁻¹ mol ⁻¹]	$5,4094 \times 10^4$
Energia de Ativação 2	E_2 [kJ Kg ⁻¹ mol ⁻¹]	$6,8323 \times 10^4$
Fator Pré Exponencial 1	A_1 [s ⁻¹]	$183,33 \times 10^3$
Fator Pré Exponencial 2	A_2 [s ⁻¹]	$60833,33 \times 10^3$
Expoente da Eq. Cinética	m []	0,87
Expoente da Eq. Cinética	n []	1,57

Tabela 4.6. Parâmetros do Ciclo de Cura utilizado na experiência

Parâmetro	Valor
t0 [h]	0
t1 [h]	0.5
t2 [h]	3.5
t3 [h]	0
T ₀ [K]	303,15
T _c [K]	353.15

4.3 Otimização do Ciclo de Cura

A otimização do processo apresentada neste trabalho consiste em minimizar uma função objetivo econômica que é integrada ao modelo matemático do ciclo de cura do processo de Enrolamento Filamentar. O valor dessa função calculado pela DASSL no tempo final da simulação do modelo será minimizado utilizando-se o algoritmo modificado do Enxame de Partículas (*Particle Swarm*)

As equações 4.14 e 4.15 descrita no trabalho de Pagano *et al* (2008)^a são integradas ao sistema de equações diferenciais do modelo .O valor no tempo final da função F calculado pela DASSL é a função objetivo a ser minimizada no processo, dada pela Equação 4.16. Esta é uma função do tipo custo. Nesta equação Pe e Pp são os preços da energia consumida e da resina utilizada por unidade de tempo e os termos que

o multiplicam esses parâmetros são a taxa de energia e de material consumidos durante o processo. A condição inicial indica o gasto com o material no processo, correspondendo, portanto, a um custo fixo do processo.

$$\frac{dF}{dt} = 2\pi RL \left[k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_e} \right] Pe \quad (4.14)$$

$$F(0) = \pi(Re^2 - Ri^2)\rho L / \tau \cdot Pp \quad (4.15)$$

$$Fobj = F \Big|_{t=final} \quad (4.16)$$

Para o adimensionamento dessas equações, as seguintes variáveis adimensionais forma definidas

$$t = \frac{t}{\tau} \quad r = \frac{r}{Re} \quad \theta = \frac{(T - T_0)}{T_0}$$

$$F = \frac{F}{2\pi L k \tau T_0 Pe} \quad \eta = \frac{(Re^2 - Ri^2)\rho Pp}{2k \tau T_0 Pe}$$

Com a definição dessas variáveis, a função a ser minimizada torna-se:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=1} \quad (4.17)$$

$$F(0) = \eta \quad (4.18)$$

$$Fobj = F \Big|_{t=final} \quad (4.19)$$

A restrição é imposta ao sistema através de uma função de penalidade, a qual atribui um valor à função objetivo (uma penalização) toda vez que a restrição não é satisfeita. Dessa forma, para conseguir minimizar a função objetivo, o algoritmo deve primeiro anular essa atribuição, o que se consegue satisfazendo a restrição. Neste trabalho a penalização é inserida de acordo com a seguinte Equação:

$$Fobj^* = Fobj + \sum_i h \cdot (\alpha_d - \alpha_i)^2 \quad (4.20)$$

Nesta equação, α_d é o grau de cura desejado, α_i é o grau de cura ao longo de cada posição radial calculado durante a otimização, h é uma constante, $Fobj$ é a função objetivo e $Fobj^*$ a função objetivo sujeita à restrição.

A estratégia de otimização consiste, portanto, em minimizar esta função objetivo, utilizando-se o Algoritmo modificado (versão de Biscaia Jr. et al., 2004) do Enxame de Partículas para a obtenção de um novo ciclo de cura com parâmetros otimizados. A estratégia pode ser sintetizada de acordo com o seguinte fluxograma.

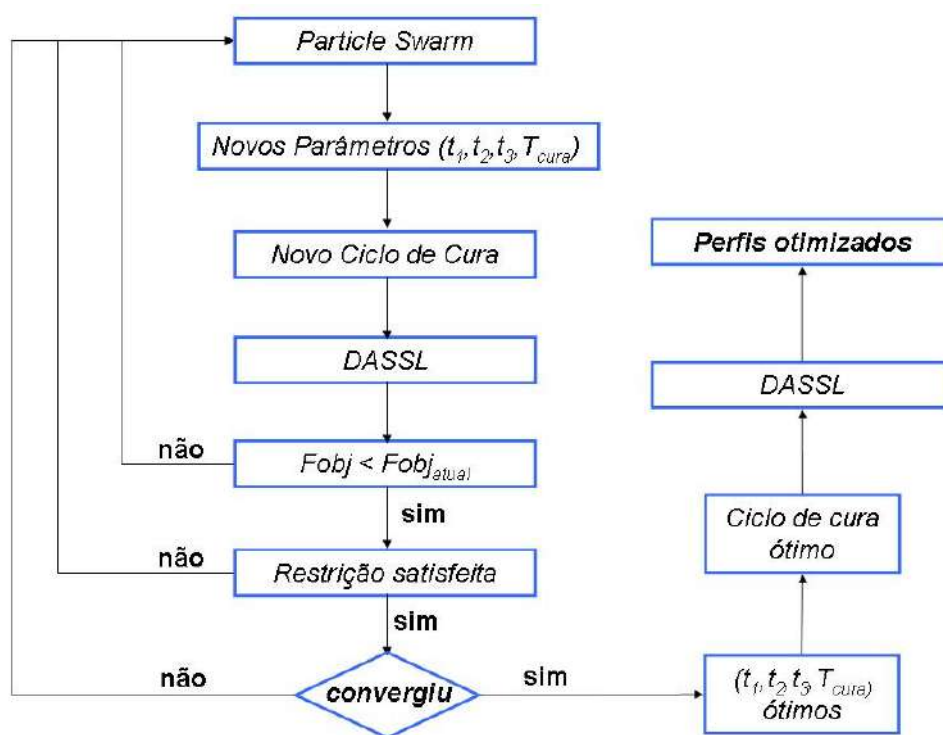


Figura 4.5. Fluxograma esquemático do algoritmo de otimização utilizado

O fluxograma da Figura 4.5 mostra a otimização do processo feito pelo algoritmo do Enxame de Partículas. Neste processo, o algoritmo sorteia aleatoriamente valores para os parâmetros t_1 , t_2 , t_3 , T_{cura} que fornecem então o ciclo de cura do processo para esses parâmetros. Esse ciclo de cura é utilizado no modelo matemático com a função objetivo econômica integrada. A sub-rotina DASSL calcula o valor dessa função

que é enviado para dentro do algoritmo do enxame. Este, por sua vez faz, realiza os cálculos e direciona a o processo no sentido de minimizar a Função Objetivo ao longo de suas iterações até que o critério de convergência seja atingido, respeitando a restrição a que o sistema está submetido. (reestruturar a figura, colocar qual o critério para convergir).

A Função objetivo, descrita pela Equação 4.19 mede a diferença entre a energia gerada pela reação e a energia fornecia ao sistema, correspondendo numericamente ao valor da diferença entre as áreas sob o perfil de temperatura simulado e a área do trapézio do ciclo de cura. Assim, dependendo das condições numéricas utilizadas na simulação e da restrição imposta ao sistema, ciclos de cura longos com valores pequenos, e por vezes mínimos, da função objetivo podem ser obtidos, como será mostrado. Como o custo do processo é determinado apenas pelo fornecimento de energia ao sistema, este pode então, não ser minimizado efetivamente.

Logo, a utilização de uma função objetivo que fornece apenas o custo de fornecimento de energia pode ser mais vantajosa. Propõem-se, neste trabalho, minimizar apenas este custo de acordo com a Equação 4.18.

$$F_{obj} = \frac{T_{cura} - T_0}{2} (t_2 + t_3 - t_1 - t_0) \cdot fator \quad (4.21)$$

A Equação 4.18 é uma equação algébrica que mede a área do trapézio correspondente ao ciclo de cura da Figura 4.5. O fator da Equação 4.18 é um valor de ajuste aos critérios da máquina que fornece energia. Este número, entretanto não interfere na obtenção dos perfis otimizados.

O problema de otimização se resume neste caso, em determinar a área mínima do paralelogramo que satisfaça a restrição imposta ao sistema.

4.3 Procedimento Experimental

O procedimento experimental realizado é idêntico à descrição do processo feita na segunda seção do Capítulo 2. Assim, as fibras são “puxadas” de carretéis e são previamente banhadas na resina antes de começarem a ser enroladas no mandril. O processo estudado aqui é o processo de cura a quente. Assim, não há fornecimento de energia durante o enrolamento, sendo esta fornecida pela estufa, para onde o tubo é levado após o enrolamento do sistema resina/fibra. A temperatura da estufa é controlada, de modo que se obtenha o ciclo de cura desejado para o processo.

As Figuras 4.6 a 4.11 a seguir mostram o ambiente do laboratório, assim como os equipamentos utilizados no processo. Para a medição da temperatura foi utilizado um termômetro de infravermelho, que permite medir a temperatura de superfícies à distâncias razoáveis. Para isso, uma pequena abertura da estufa foi feita para realizar essa medição em vários instantes de tempo. As medições foram feitas rapidamente para não permitir variações bruscas na temperatura interna da estufa.



Figura 4.11. Plataforma móvel onde as fibras são previamente banhadas na resina

A Figura 4.11 mostra a plataforma móvel onde as fibras são banhadas na resina. Esta plataforma se movimenta na direção horizontal com velocidade definida, que junto com a velocidade de rotação do mandril determina a orientação das fibras no tubo, assim como descrito no capítulo 2.



Figura 4.12. Visão geral do equipamento de Enrolamento Filamentar.



Figura 4.13. Painel de controle



Figura 4.14. Plataforma móvel do laboratório



Figura 4.15. Estufa para cura do tubo compósito



Figura 4.16. Forma de medição da temperatura no tubo. Pequena abertura da estufa em vários instantes para evitar variação brusca da temperatura interna.

Capítulo 5

Resultados

Este capítulo apresenta os principais resultados deste trabalho. Na primeira seção deste capítulo apresenta-se a validação do modelo a partir de dados experimentais obtidos do artigo de Calius, Lee e Springer (1990) e da experiência realizada.

Em seguida apresenta-se um estudo a respeito das variações radiais dos perfis além de uma análise de sensibilidade a alguns parâmetros numéricos e do modelo.

Na terceira seção, são apresentados os resultados da simulação e com o modelo híbrido. Apresentam-se previamente os detalhes do treinamento das redes neuronais empregadas para cálculo da taxa cinética de reação da resina.

A otimização do ciclo de cura do processo é, por fim, realizada na quarta seção, seguindo o algoritmo proposto pela Figura 4.5.

5.1 Validação do Modelo

Todas as simulações, nesta e nas outras seções, foram realizadas para predição do comportamento térmico do compósito durante o ciclo de cura do sistema resina-fibra. Assim, foram obtidos os perfis temporais de temperatura e de grau de cura no compósito os quais foram validados com os dados experimentais citados anteriormente.

As propriedades físicas, os parâmetros cinéticos, assim como os parâmetros geométricos e do ciclo de cura estão apresentados nas Tabelas 4.1 a 4.6 do capítulo anterior.

A Tabela 5.1 mostra ainda outros parâmetros numéricos e do modelo utilizados durante a simulação.

Tabela 5.1. Parâmetros do modelo e numéricos utilizados na simulação.

Parâmetro	Símbolo [dimensão]	Valor
Número de Reynolds	Re	0,4
Numero de Prandtl	Pr	0,707
Numero de Nusselt	Nu	0,662
Fração mássica de resina	ϕ_R	0,2
Numero divisões Radiais	$Ndiv$	6
Passo radial no mandril	du	0,011
Passo radial no compósito	dr	0,021
Constante de tempo	τ [s]	3600

O número de Nusselt foi calculado a partir da Equação 3.37 considerando um ambiente externo com baixa velocidade do ar, ou seja, número de Reynolds baixo e à temperatura de cura 176 °C para a validação com o ciclo de Calius, Lee e Springer (1990) e temperatura de 80 °C com o ciclo do experimento realizado.

As Figuras 5.1 e 5.2 mostram os perfis de temperatura e de grau de cura obtidos no compósito, assim como os dados experimentais extraídos do artigo de Calius *et al* (1990) e o ciclo de cura adotado por esses autores.

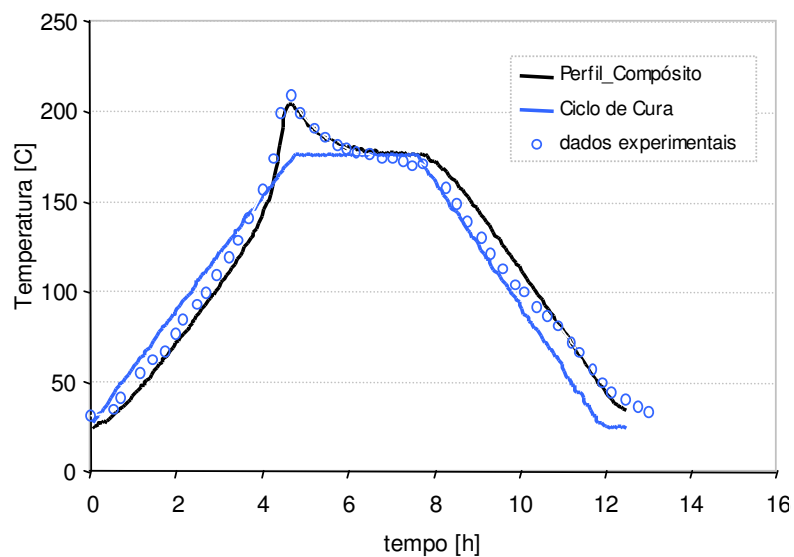


Figura 5.1. Comparação entre o Perfil Simulado e os dados experimentais

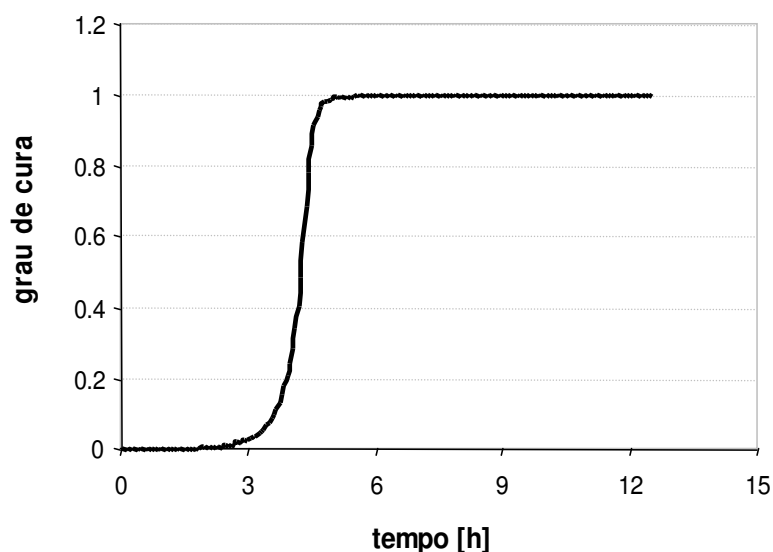


Figura 5.2. Perfil temporal de cura no compósito

Observa-se, pela análise das Figuras 5.1 e 5.2, que em aproximadamente 6 horas de submissão do sistema ao ciclo de cura proposto, a resina já está totalmente curada. Isso ocorre ainda durante a fase elevação da temperatura do sistema. Dessa forma, há um aquecimento desnecessário até aproximadamente 8 horas, quando a estufa é desligada, sendo que essa diminuição da temperatura leva ainda cerca de 4 horas. Esse fato, atenta para a possibilidade de realizar a otimização do ciclo de cura do processo, de modo a diminuir o tempo e a temperatura máxima de cura do sistema.

A análise da Figura 5.1 mostra, por outro lado, uma excelente concordância entre o resultado experimental e o perfil de temperatura obtido pela simulação, o que valida, a priori, o modelo adotado.

Para confirmação da validade do modelo, um novo conjunto de dados experimentais obtidos no experimento de Enrolamento Filamentar com a resina Epóxi é utilizado para a comparação.

As Figuras 5.3 e 5.4 apresentam os resultados da simulação, com os dados cinéticos da Tabela 4.5 e propriedades físicas da resina Epóxi, e os resultados experimentais obtidos do processo.

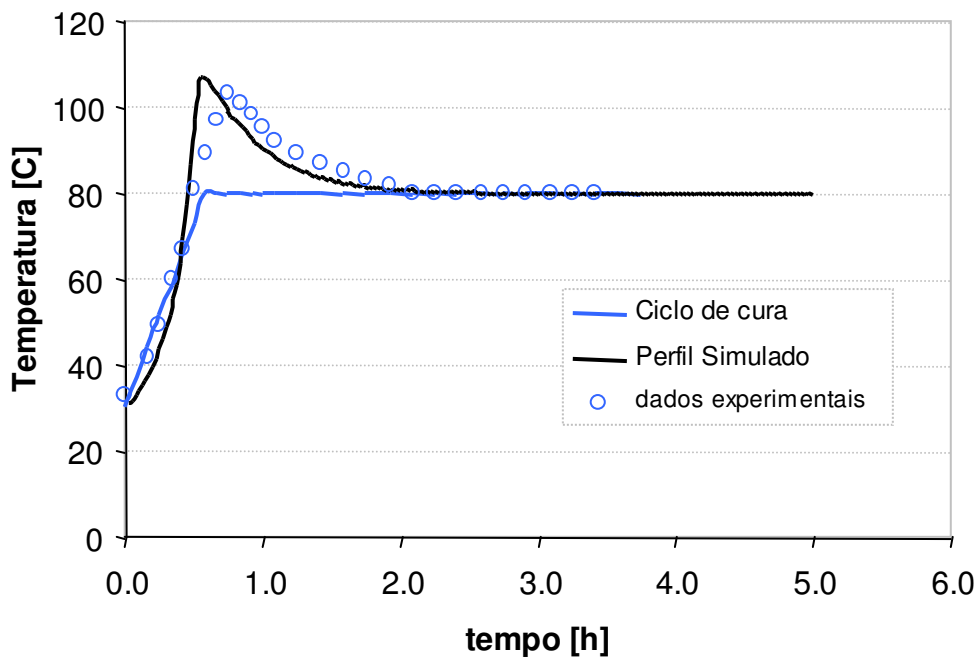


Figura 5.3. Comparação entre Perfil de Temperatura Simulado e dados Experimentais

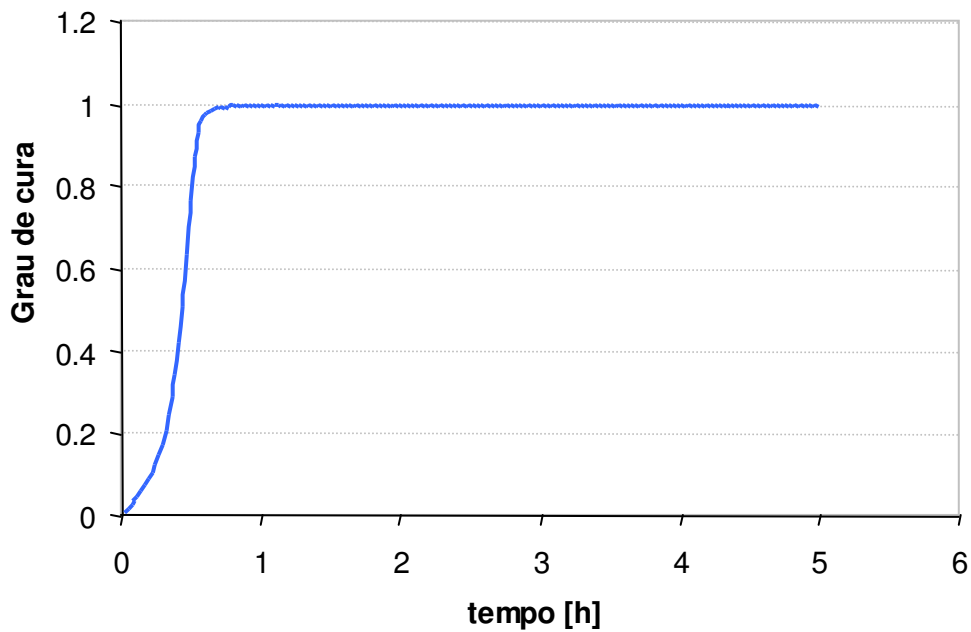


Figura 5.4. Perfil simulado do grau de cura

Observa-se novamente, a excelente concordância com os resultados experimentais, confirmando a validade do modelo. O ciclo de cura da Figura 5.3 utilizado não apresenta a etapa de queda de temperatura como o da Figura 5.1 pois a experiência realizada faz uma pós cura a um temperatura mais elevada. Como nessa

etapa não deve mais haver reação, visto que a resina já esta quase totalmente curada, esses pontos experimentais não foram avaliados.

5.2 Analise de sensibilidade do modelo

Duas avaliações para sensibilidade do modelo foram realizadas nesta seção. Uma análise a um parâmetro numérico e a um do modelo. O primeiro está relacionado ao número de pontos de discretização do domínio radial que foram considerados na simulação e o segundo, ao número de Nusselt, que foi estimado a partir da correlação empírica dada pela Equação 3.37.

A Figura 5.5 mostra o gráfico da variação da resposta do modelo quando diferentes números de pontos de discretização são utilizados. Na Figura 5.6 uma ampliação da escala é realizada para enfatizar as regiões com as maiores diferenças observadas.

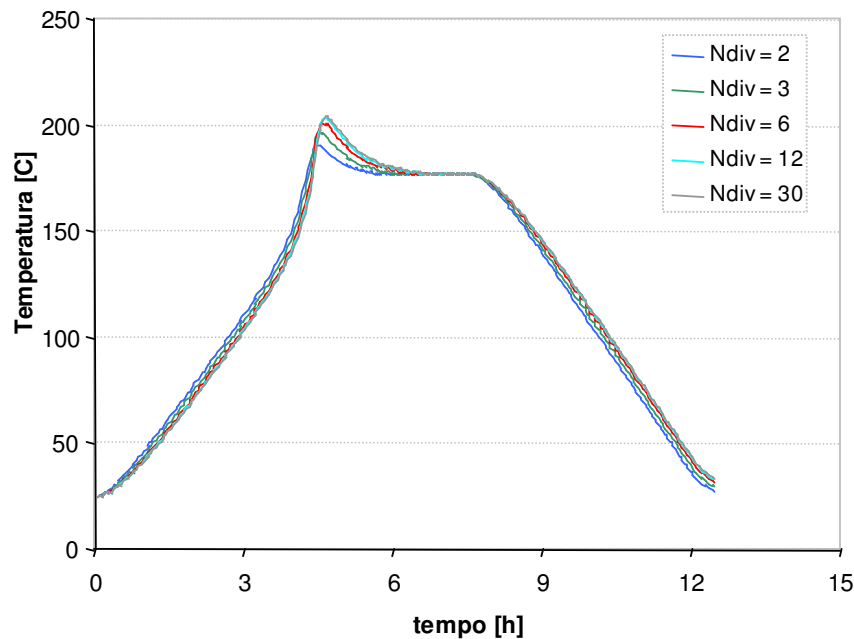


Figura 5.5. Variação dos perfis com o número de pontos de discretização.

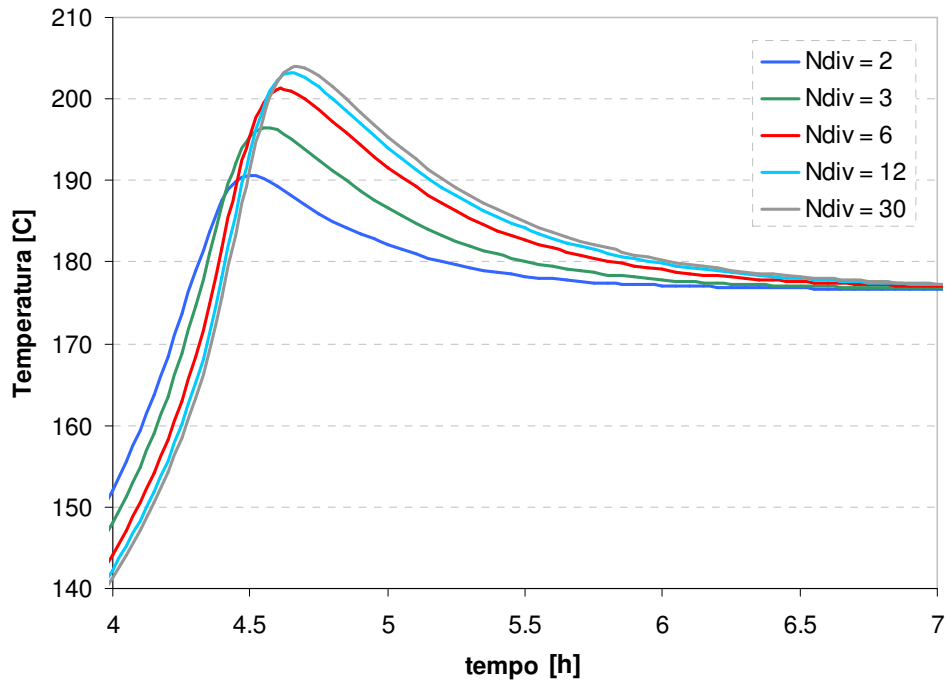


Figura 5.6. Amplificação da região com as maiores diferenças.

A Tabela 5.2 mostra os erros médios e máximos obtidos entre os perfis com os diversos valores de $Ndiv$. Os erros médios são definidos como o desvio relativo entre a média aritmética das temperaturas e o valor da média aritmética com $Ndiv$ igual a 30, enquanto que os erros máximos são definidos como o desvio relativo entre os maiores valores de temperatura obtidos nos perfis, também em relação ao obtido com $Ndiv$ igual a 30. As Equações 5.1 e 5.2 mostram como os erros definidos acima foram calculados.

$$E_{m\u00e9dio} \equiv \frac{\sum_{i=1}^N T_j^i - \sum_{i=1}^N T_{30}^i}{\sum_{i=1}^N T_{30}^i} \times 100 \quad (5.1)$$

$$E_{max} \equiv \frac{Tmax_j - Tmax_{30}}{Tmax_{30}} \times 100 \quad (5.2)$$

Em que T_j^i é o valor da temperatura do ponto i no perfil com $Ndiv$ igual a j , T_{30}^i é o valor da temperatura do ponto i no perfil com $Ndiv$ igual a 30 e N é o número total de pontos dos perfis. Na Equação 5.2 $Tmax_j$ é o maior valor da temperatura no perfil com $Ndiv$ igual a j e $Tmax_{30}$ o maior valor no perfil com $Ndiv$ igual a 30

Tabela 5.2. Erros médios e máximos obtidos entre os perfis

Ndiv	Temperatura Média [°C]	Temperatura Máxima [°C]	Erro Médio	Erro Máximo
2	117.34	190.66	1.20 %	6.42 %
3	117.9	196.42	0.73 %	3.60 %
6	118.43	201.08	0.28 %	1.31 %
12	118.66	203.17	0.08 %	0.28 %
30	118.76	203.75	—	—

Observa-se que, a partir de $Ndiv$ igual a 3 não se observa diferença significativa entre os perfis de temperatura, o que é refletido pelos baixos erros médios e máximos calculados. Dessa forma, foram utilizados nas simulações 6 pontos de discretização radial, o qual garante a solução do modelo sem grandes desvios com relação à solução com mais pontos de discretização, e não aumenta, sensivelmente, o custo computacional.

A Figura 5.7 mostra a sensibilidade dos perfis ao número de Nusselt. Observa-se a grande sensibilidade do perfil de temperatura do compósito a esse número. Para os valores mais baixos do número de Nusselt, particularmente o valor de 0,2 observa-se maiores temperaturas no compósito, resultado da baixa transferência de calor para o ambiente. Para maiores valores observa-se a aproximação dos perfis ao perfil de ciclo de cura do sistema, ou seja, a temperatura do compósito passa a variar de acordo com a temperatura externa imposta.

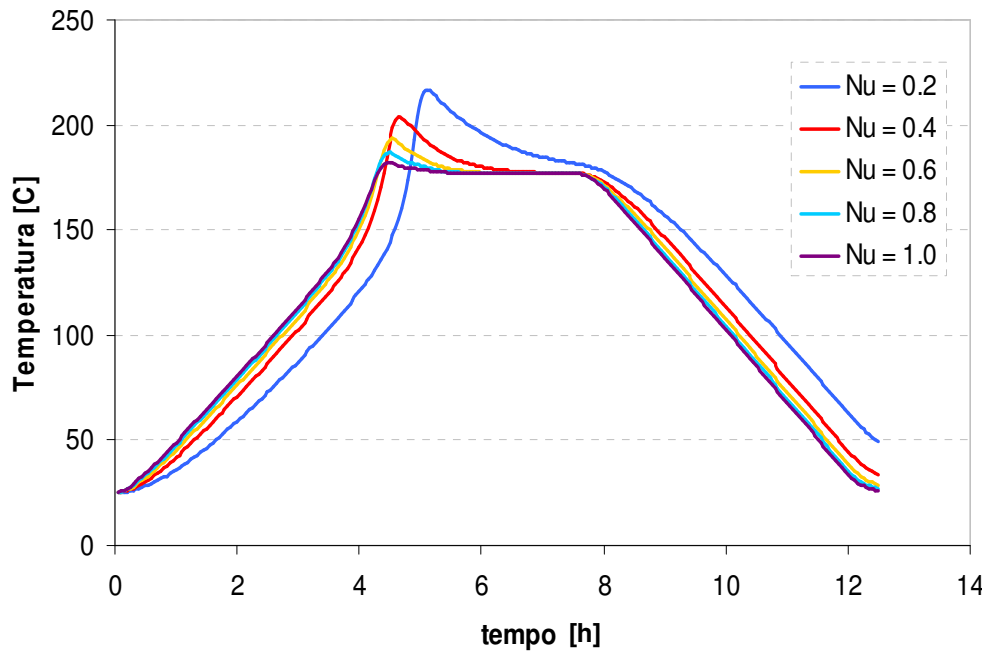
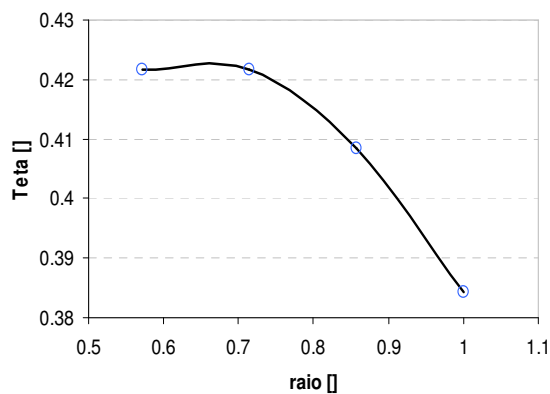


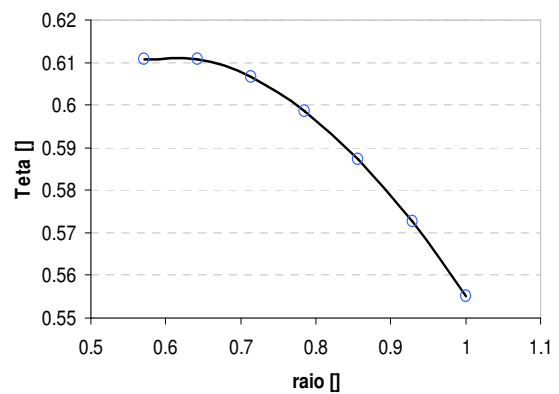
Figura 5.7. Sensibilidade do perfil de temperatura ao número de Nusselt

5.2.2 Variação Radial dos Perfis

A Figura 5.8 mostra os gráficos dos perfis radiais de temperatura, simulado com diversos valores de N_{div} , no tempo final de simulação do processo. Na Figura 5.9 os mesmos perfis são plotados no mesmo gráfico para comparação das diferenças observadas na Figura anterior.



(a)



(b)

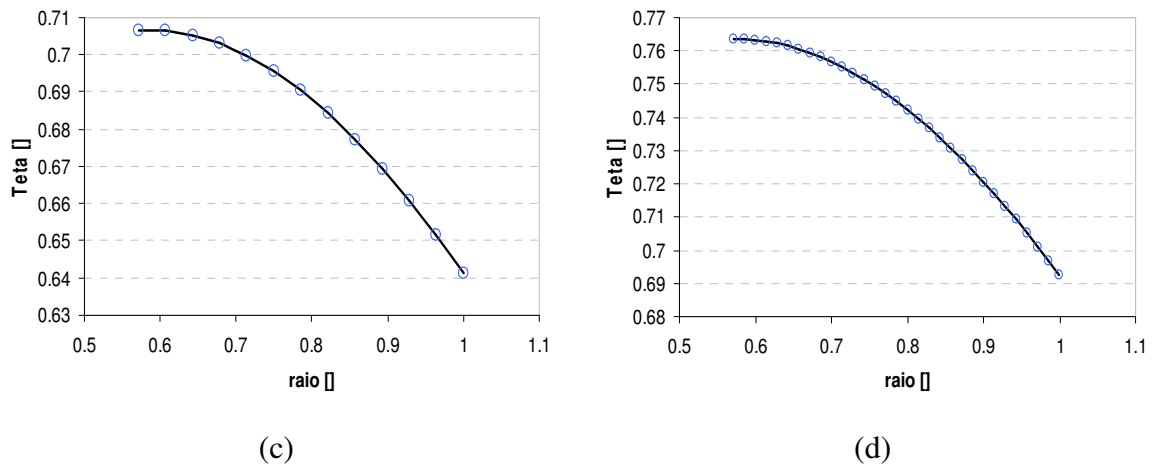


Figura 5.8. Perfis radiais de temperatura no compósito no tempo final de simulação. (a) Ndiv = 3. (b) Ndiv = 6. (c) Ndiv = 12. (d) Ndiv = 30

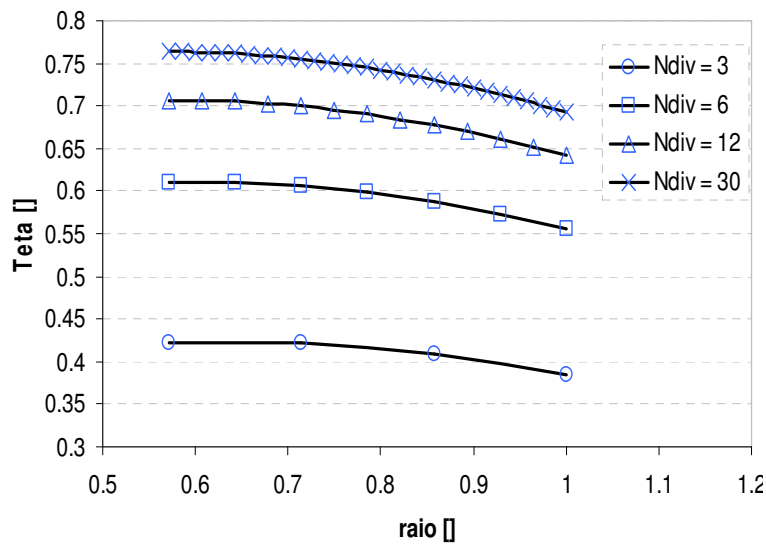


Figura 5.9. Comparação entre perfis radiais de temperatura.

Os perfis são aparentemente parabólicos. Entretanto, essa variação é perceptível apenas na escala reduzida para a qual os gráficos foram construídos (figura 5.10). Para os gráficos com a temperatura em Celsius percebe-se que a variação de temperatura é extremamente pequena, ou seja, a temperatura já é praticamente constante ao longo do compósito no tempo final do processo, o que era esperado, visto que a pequena espessura do tubo torna sua resistência condutiva muito baixa. A Figura 5.9 mostra ainda a diferença entre os valores finais para os vários valores de ponto de discretização.

Na medida em que se aumenta o número de pontos, essa diferença torna-se, entretanto, cada vez menor, devido ao refino da malha utilizada.

A Figura 5.10 mostra, por exemplo, o perfil radial com a temperatura em Celsius para o caso com N_{div} igual a 30, na qual se observa uma variação de apenas 0,80 °C entre as superfícies interna e externa do compósito aproximadamente.

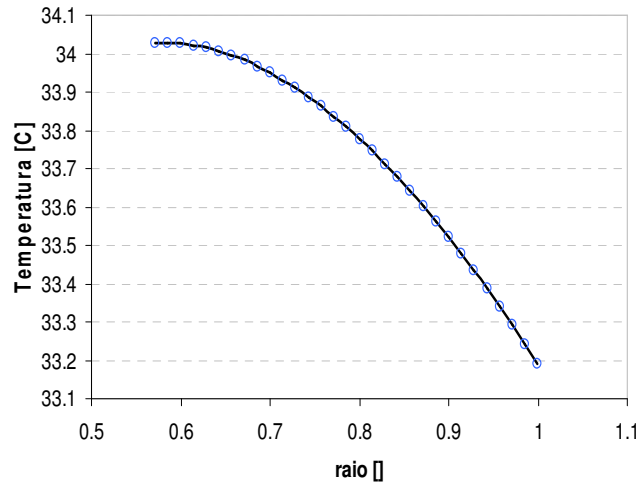


Figura 5.10. Perfis radiais de temperatura no compósito com escala em Celsius.

5.3 Simulação com o modelo híbrido

Nesta seção são apresentados os resultados com a taxa descrita por uma Rede Neuronal. O treinamento da rede foi feito, assim como a estimação dos parâmetros do trabalho de Pagano *et al* (2008)^b, a partir de dados cinéticos isotérmicos para a resina Epóxi DER 331 como já descrito anteriormente.

5.2.1 Resultados do Treinamento das Redes

A Figura 5.11 mostra os dados experimentais para a taxa cinética de cura variando com o grau de cura para diferentes temperaturas.

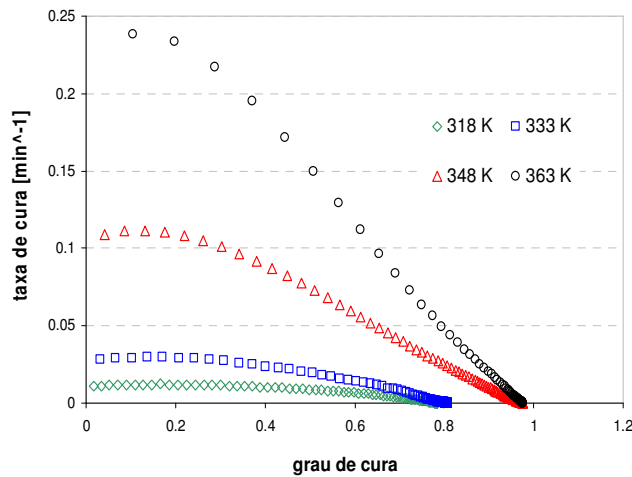


Figura 5.11. Dados experimentais para diferentes temperaturas.

Os parâmetros cinéticos estimados por Pagano *et al* (2008)^b estão apresentados na Tabela 4.5. A Figura 5.12 mostra a taxa cinética estimada pelo modelo autocatalítico com esses parâmetros, confrontada com os dados experimentais.

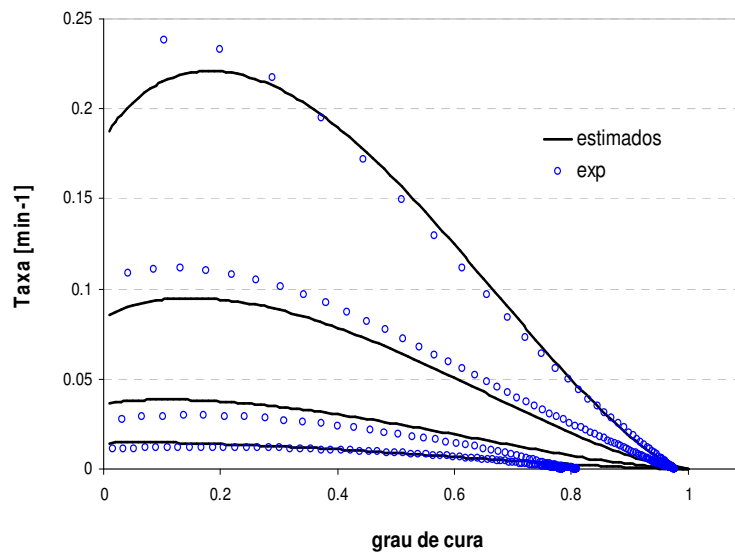


Figura 5.12. Taxa prevista pelo modelo autocatalítico

O treinamento das redes foi feito no software STATISTICA 7.0 utilizando-se o toolbox STATISTICA NEURAL NETWORKS. Foram realizados treinamentos de redes MLP com dois neurônios na camada de entrada, correspondendo à entrada dos dados de temperatura e de grau de cura e um neurônio na camada de saída, fornecendo a

taxa prevista. Todos os treinamentos foram realizados considerando apenas uma camada escondida que, para os dados em questão, foi suficiente para fornecer uma resposta com alta correlação entre dados previstos e os experimentais.

A Tabela 5.3 mostra os principais parâmetros utilizados no treinamento de uma rede MLP com oito neurônios na camada escondida. Essa topologia de rede foi escolhida entre as dez melhores redes obtidas em um treinamento prévio no módulo de treinamento inteligente do STATISTICA (*intelligent problem solver*).

Tabela 5.3. Parâmetros utilizados no treinamento das redes MLP 2:8:1

Parâmetros	Valor
Taxa de aprendizagem	0,05
Número de Épocas fase 1	500
Número de Épocas fase 2	1500
Max/SD	0,2
Min/Mean	0,01

O conjunto de dados experimentais apresenta cerca de 500 dados que foram disponibilizados para o treinamento na proporção de 2:3 entre dados de treinamento e de seleção. A Tabela 5.4 mostra os principais resultados do treinamento da rede para o conjunto de dados.

As Figuras 5.13 e 5.14 mostram os gráficos da taxa predita pela rede confrontada com a taxa real observada e a variação da taxa prevista pela rede com o grau de cura confrontada com os dados experimentais.

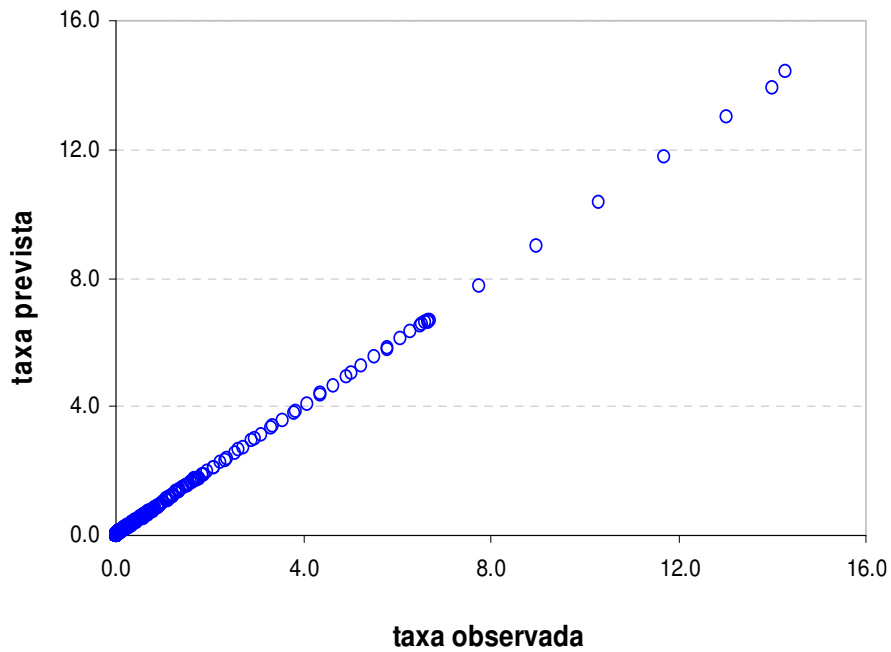


Figura 5.13. Taxa prevista. vs. Taxa real observada para dados experimentais

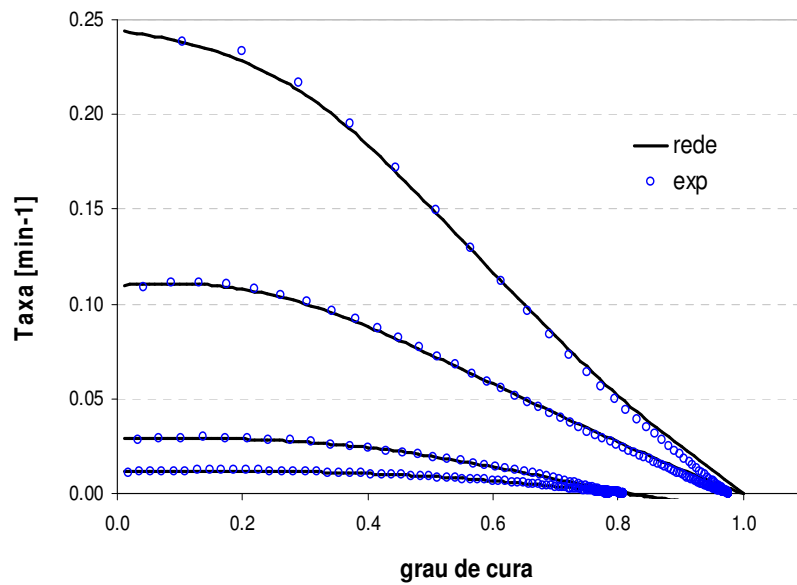


Figura 5.14. Taxa prevista pela Rede MLP 2:8:1 para treinamento com dados experimentais

As Figuras 5.13 e 5.14 mostram a excelente previsão da taxa de cura pela rede neuronal, com correlação extremamente elevada assim como mostrado também na Tabela 5.3.

Enfim, a Figura 5.15 confronta os gráficos da variação da taxa de cura com o grau de cura prevista pela rede e pelo modelo autocatalítico.

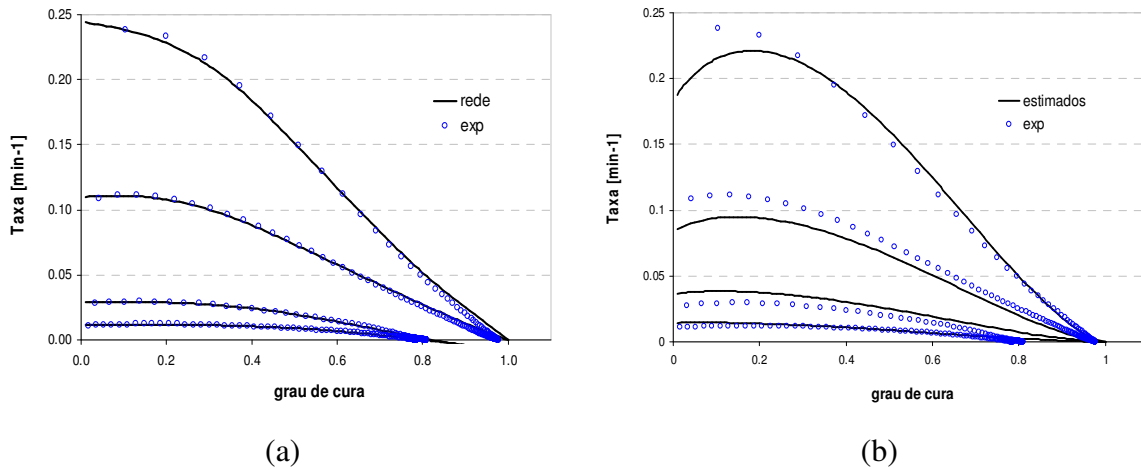


Figura 5.15. Variação da taxa cinética de cura com o grau de cura. (a) Previsão com rede Neuronal. (b) Previsão com modelo autocatalítico

Observa-se que tanto a taxa prevista pela rede, como a pelo modelo autocatalítico estão em excelente acordo com os dados experimentais. Isso mostra o grande poder da rede neuronal em descrever fenômenos que apresentam um elevado grau de não linearidade como é o caso da taxa cinética acima.

Duas limitações inerentes às redes neuronais devem, entretanto, ser destacadas. A primeira está associada à sua capacidade de extrapolação. Embora ela seja capaz de prever com extrema exatidão os dados experimentais dentro da faixa de treinamento, ela pode ser muito ineficiente para realizar extrapolações, o que a torna pouco abrangente e bastante dependente de dados experimentais, o que nem sempre está disponível. O segundo está associado ao grande número de parâmetros gerados no treinamento. Embora o treinamento seja rápido, a grande quantidade de parâmetros gerados pode aumentar o custo computacional de uma simulação onde a rede for utilizada para prever o valor de alguma variável.

5.2.2 Resultados da Simulação do Processo

As Figuras 5.16 e 5.17 mostram os perfis de temperatura e de grau de cura obtidos com a taxa cinética prevista pelo modelo determinístico com os parâmetros de Pagano *et al* (2008)^b dados na Tabela 4.5 e com a taxa cinética calculada pela rede neuronal.

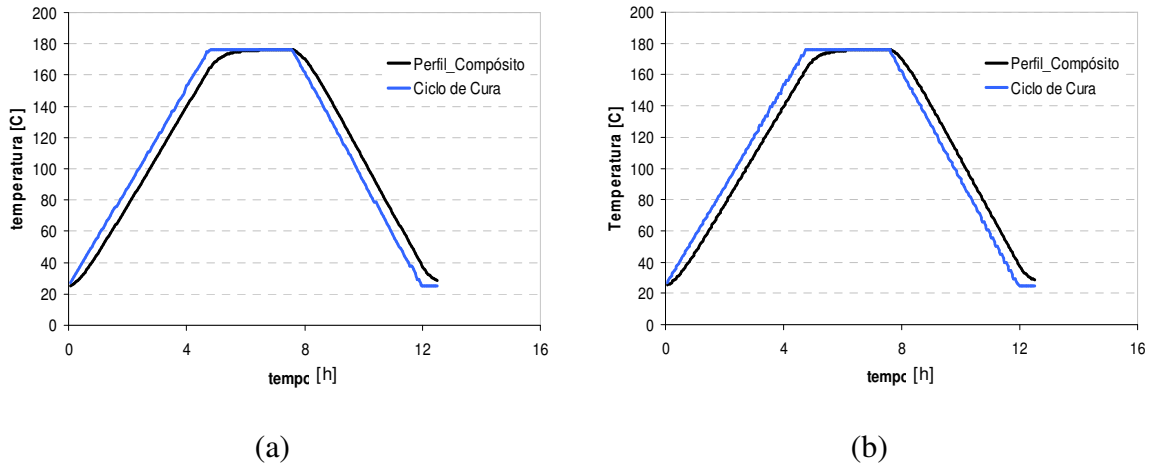


Figura 5.16. Perfis de Temperatura no Compósito na superfície externa do Compósito. (a) Taxa Prevista com o modelo autocatalítico. (b) Taxa Prevista pela Rede Neuronal

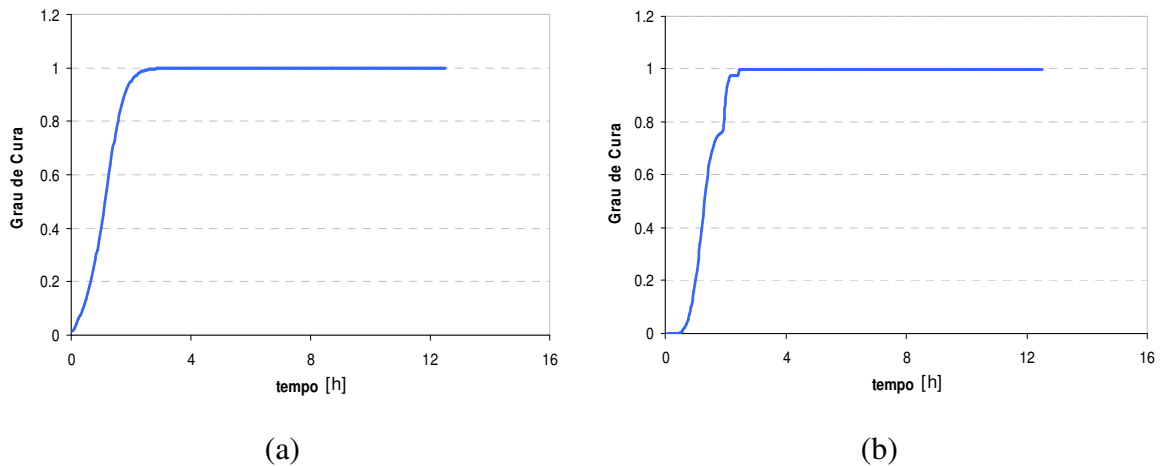


Figura 5.17. Perfis de Grau de Cura no Compósito na superfície externa do Compósito. (a) Taxa Prevista com o modelo autocatalítico. (b) Taxa Prevista pela Rede Neuronal

Observa-se que, a despeito de uma pequena diferença obtida entre os perfis de grau de cura no modelo com a taxa cinética prevista pela rede neuronal, os perfis obtidos são idênticos, o que mostra que o modelo híbrido proposto pode ser aplicado

com segurança para simular o processo. Observa-se também que, assim como nos resultados da simulação do processo anterior (Figuras 5.1 e 5.2), o ciclo de cura utilizado pode ser otimizado, visto que a conversão máxima da resina é obtida em torno de três horas de processo, havendo, portanto aquecimento desnecessário do sistema.

As Figuras 5.18 e 5.19 mostram os resultados da simulação com o modelo autocatalítico e com o modelo híbrido para um novo ciclo de cura empregado. Este ciclo foi utilizado intuitivamente, visto que os resultados anteriores mostram a efetiva possibilidade de otimização do ciclo de cura.

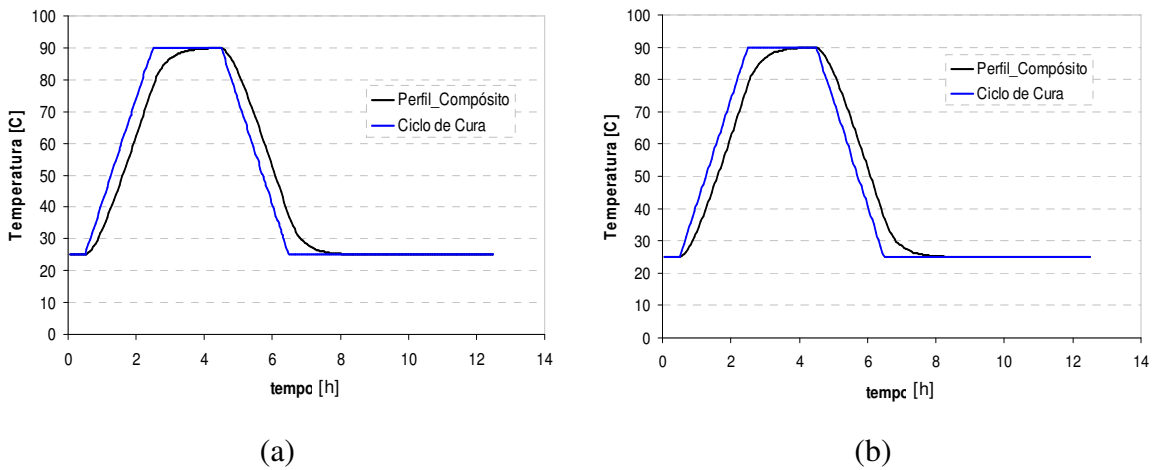


Figura 5.18. Perfis de temperatura na superfície do compósito para o novo ciclo de cura.

(a) Modelo Autocatalítico. (b) Modelo Híbrido

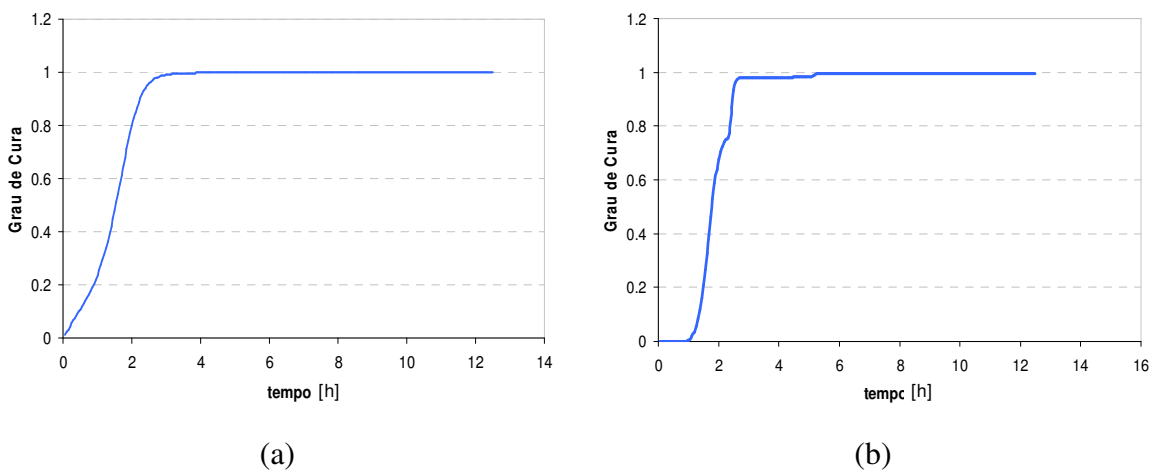


Figura 5.19. Perfis de grau de cura na superfície do compósito para o novo ciclo de cura.

(a) Modelo Autocatalítico. (b) Modelo Híbrido

Nestes resultados, tanto o tempo total de submissão do sistema ao ciclo de cura quanto à temperatura máxima de cura foram reduzidos e o sistema atingiu conversão máxima ainda em torno de três horas, enquanto o aquecimento se manteve por cerca de seis horas. Constata-se, portanto, que a otimização do ciclo de cura do sistema pode ser efetivamente realizada a fim de se reduzir os custos do processo.

5.3 Otimização do Ciclo de Cura

A otimização do ciclo de cura é realizada com intuito de diminuir o custo do processo, visto que o ciclo de cura utilizado anteriormente ineficiente, submetendo o sistema a um tempo longo de processamento, o que se constatou ser desnecessário. Essa otimização é feita, como descrito no capítulo anterior, através da minimização de uma função objetivo econômica de acordo com o algoritmo exemplificado pelo fluxograma da Figura 4.5.

A seção seguinte apresenta brevemente os resultados de alguns testes realizados com o algoritmo modificado do enxame de partículas (PSO) na minimização de alguns problemas padrões de otimização, com intuito de demonstrar a eficiência deste método. Em seguida, os resultados da otimização do ciclo de cura do processo são apresentados.

5.3.1 Otimização do Processo

Para otimização do ciclo de cura do processo de Enrolamento Filamentar foi realizado o procedimento descrito pelo fluxograma da Figura 4.5, para determinação dos parâmetros do ciclo que minimizam a função objetivo proposta. A função é mínima para os menores valores de temperatura e, portanto, o valor mínimo corresponde a uma conversão nula, o que obviamente não é desejado. Dessa forma o grau de cura mínimo desejado é inserido como uma restrição na função o objetivo através de uma função de penalidade.

As Figuras 5.22 e 5.23 mostram a comparação entre os resultados obtidos com o ciclo de cura otimizado e com o ciclo utilizado no problema de Calius, Lee e Springer (1990), correspondente à Figura 5.1

Com esse novo ciclo de cura, a conversão máxima do processo é obtida em torno de três horas de processo, enquanto que no processo original (Figura 5.2) o tempo era de 6 horas. Além disso, observa-se uma redução significativa no tempo total de submissão do sistema ao ciclo de cura, mais do que três vezes menor do que no processo original.

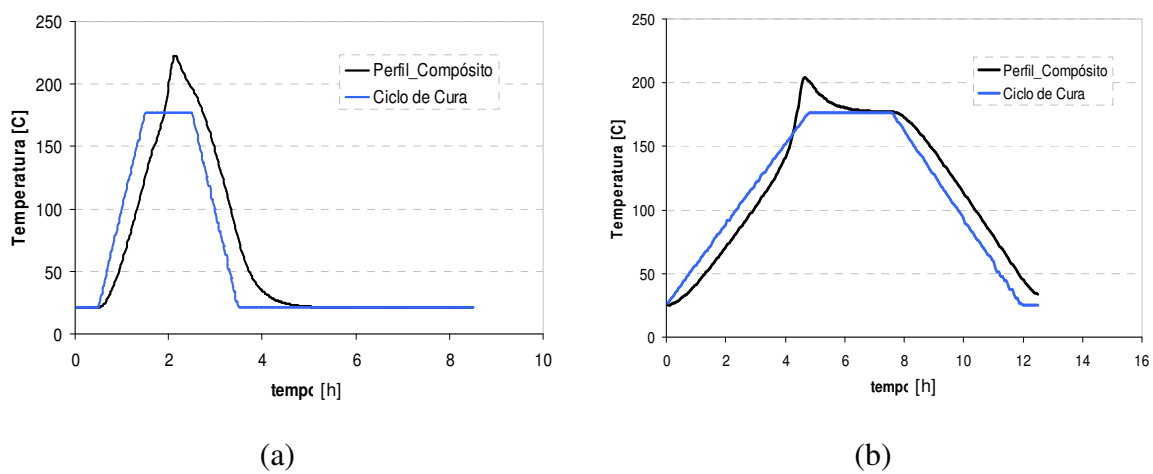


Figura 5.22. Comparação entre perfis otimizados e não otimizados do problema de Calius, Lee e Springer. (a) Perfil de temperatura otimizado. (b) Perfil não otimizado

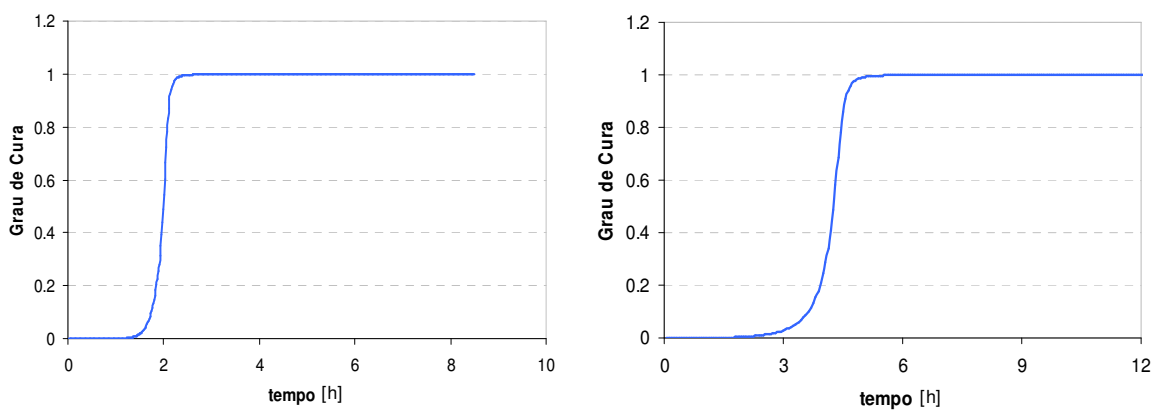


Figura 5.23. Comparação entre perfis otimizados e não otimizados do problema de Calius, Lee e Springer. (a) Perfil de grau de cura otimizado. (b) Perfil de grau de cura não otimizado

O valor da Função Objetivo utilizada nas simulações anteriores corresponde, como descrito no capítulo anterior, ao custo da diferença entre a energia fornecida ao sistema e a energia gerada pela reação, visto que considera o fluxo líquido de energia pela superfície do compósito. Não corresponde, portanto, ao custo total de energia utilizado efetivamente, podendo ser interpretada numericamente como a diferença entre as áreas sob o perfil de temperatura simulado e a área do paralelogramo do ciclo de cura utilizado. A Figura 5.24 mostra a região cujo valor numérico da sua área corresponde ao valor da Função Objetivo calculada, sendo esta a diferença das áreas onde a área da esquerda corresponde ao calor fornecido ao sistema e a área da direita corresponde ao calor gerado da reação de cura.

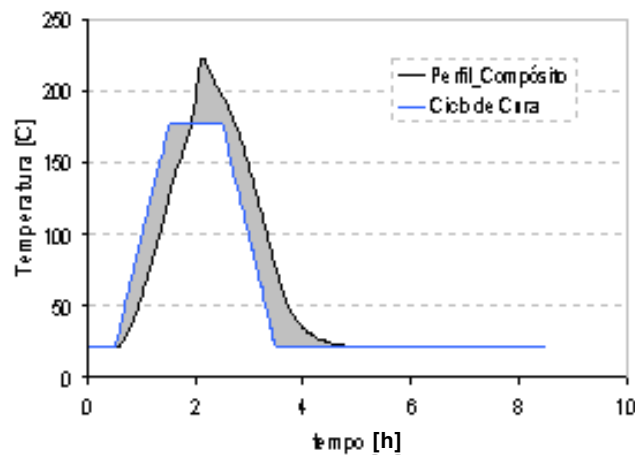


Figura 5.24. Área da região com valor correspondente ao valor da Função Objetivo

A Figura 5.25 mostra os resultados com ciclo de cura otimizado considerando o modelo híbrido. Observa-se a significativa redução no tempo total de cura, o que significa redução no custo total do processo.

Com este novo ciclo de cura, o sistema atinge a conversão total em aproximadamente duas horas de processamento e a submissão do sistema ao ciclo de cura não chega a quatro horas.

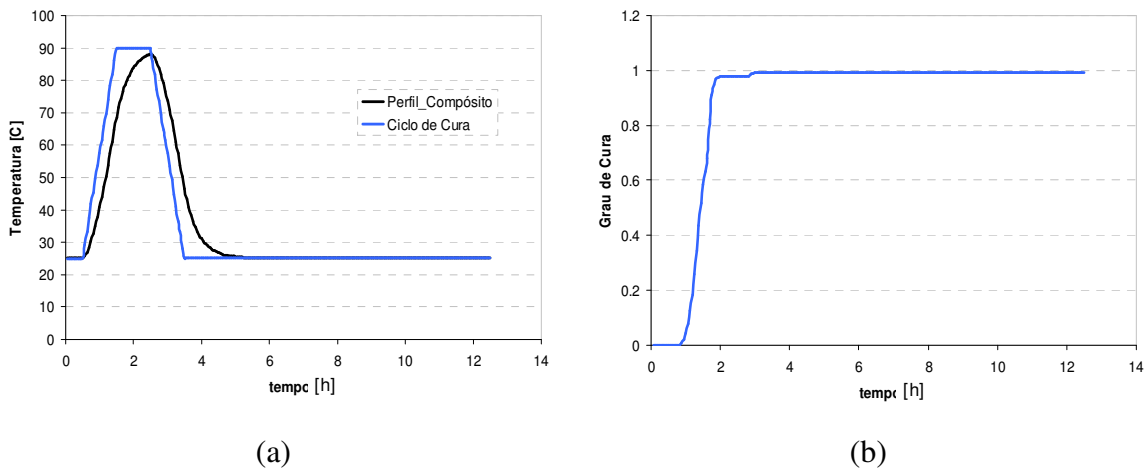


Figura 5.25. Perfis temporais otimizados obtidos com o modelo híbrido. (a) Perfil de Temperatura e Ciclo de Cura. (b) Perfil de Grau de Cura

Os ciclos otimizados apresentados foram obtidos, entretanto, para um intervalo específico dos parâmetros. Considerando faixas mais amplas de variação, outros ciclos, com o valor final da função objetivo mais baixo poderiam ser alcançados. Entretanto, como destacado anteriormente, a função objetivo proposta mede a diferença líquida entre energia fornecida ao processo e energia gerada pela reação. Assim, apesar de menores valores da função objetivo alcançados, ciclos mais longos podem ser obtidos, o que corresponde a um custo efetivo maior do processo devido ao maior gasto de energia.

Outro fato que deve ser destacado está relacionado à restrição imposta à função objetivo. Se uma condição muito drástica é assumida, ou seja, se uma restrição com o valor do grau de cura igual a 1 é utilizada (valor máximo) maiores ciclos de cura são obtidos para que o sistema consiga satisfazer a essa restrição. Sabendo disso, foi utilizada nas simulações uma restrição de 99 % de conversão, o que já é extremamente alto.

Uma maneira mais simples de otimizar o ciclo de cura do processo é utilizar outra função objetivo, que leva em conta apenas o custo de fornecimento de energia e de matéria para o sistema. O problema seria então, encontrar o ciclo de cura que minimize esta função sujeita a restrição do grau de cura. Neste caso, a única dificuldade para a minimização seria a satisfazer a restrição imposta. Uma função objetivo, bastante

simples, que pode ser usada neste caso é a que fornece a área sob o gráfico do grau de cura, segundo a Equação 4.21, sugerida no capítulo anterior.

As Figuras 5.26 a 5.31 a seguir mostram as comparações entre os perfis otimizados, utilizando a nova função objetivo proposta, e os perfis não otimizados do problema de Calius, Lee e Springer (1990), do problema com modelo determinístico e parâmetros de Pagano *et al* (2008)^b e do problema com o modelo híbrido. Observa-se, em todos os casos uma redução ainda maior no tempo de submissão do sistema ao ciclo de cura, do que com os resultados obtidos anteriormente.

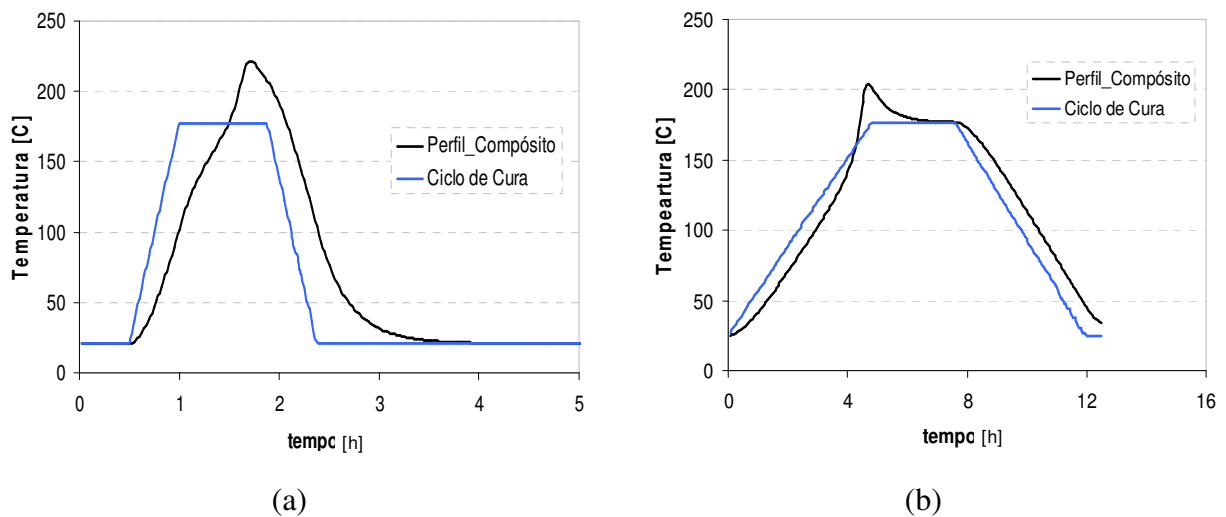
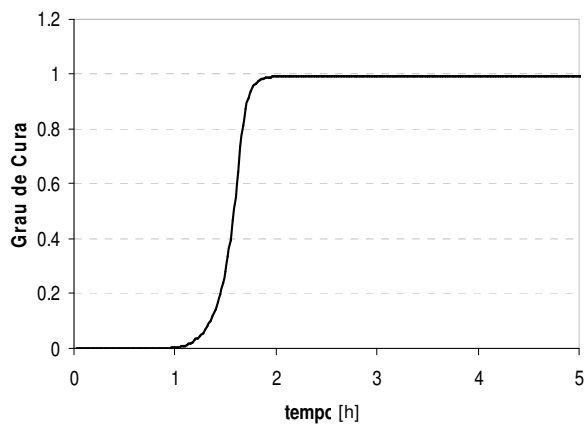
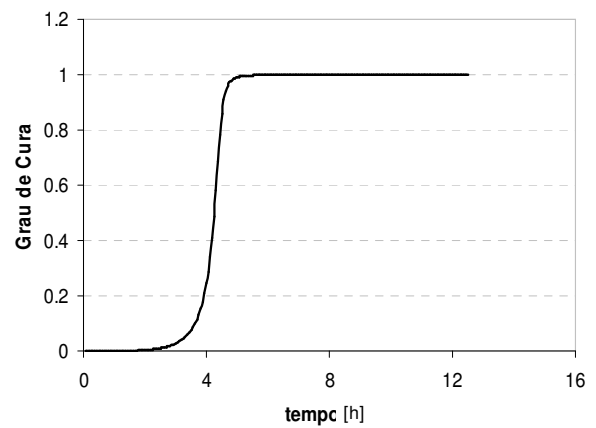


Figura 5.26. Perfis de temperatura com ciclos de cura otimizados e não otimizados do Problema de Calius, Lee e Springer (1990). (a) Perfil Otimizado. (b) Perfil original

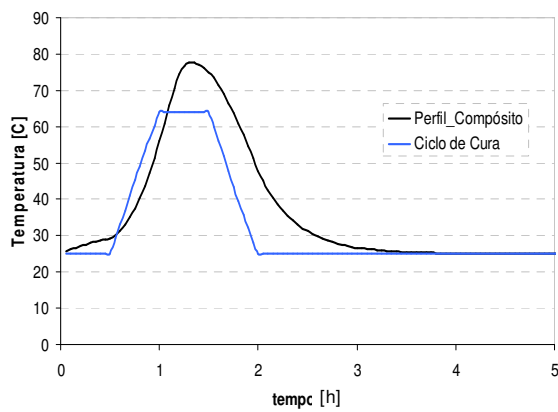


(a)

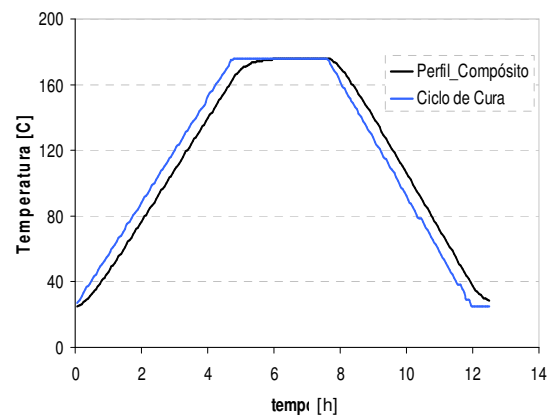


(b)

Figura 5.27. Perfis de grau de cura com ciclo de cura otimizado e não otimizado do problema de Calius, Lee e Springer(1990). (a) Perfil Otimizado. (b) Perfil original

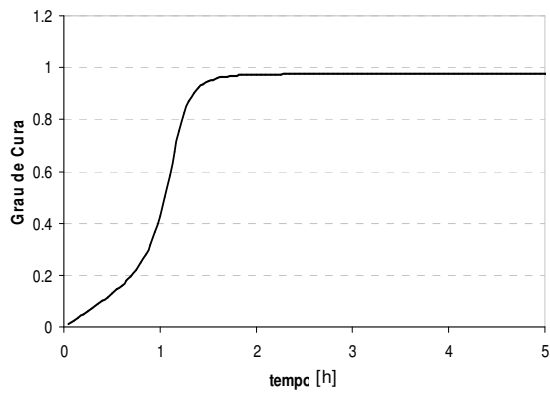


(a)

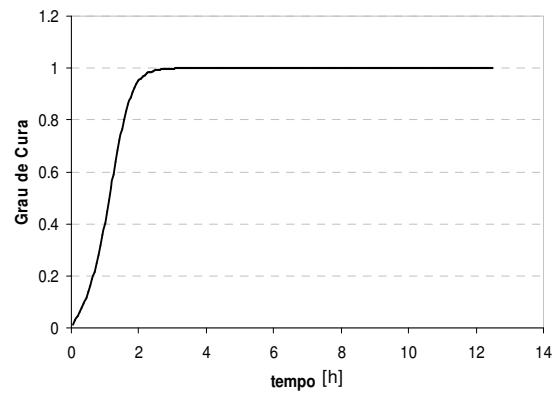


(b)

Figura 5.28 Perfis de temperatura com ciclos de cura otimizados e não otimizados do problema com parâmetros estimados. (a) Ciclo otimizado. (b) Ciclo não otimizado

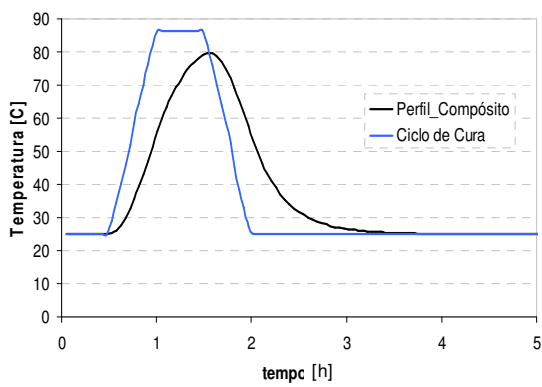


(a)

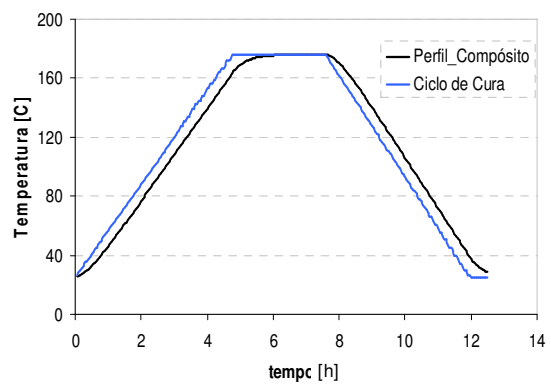


(b)

Figura 5.29. Perfis de grau de cura com ciclos de cura otimizados e não otimizados do problema com parâmetros estimados. (a) Ciclo otimizado. (b) Ciclo não otimizado

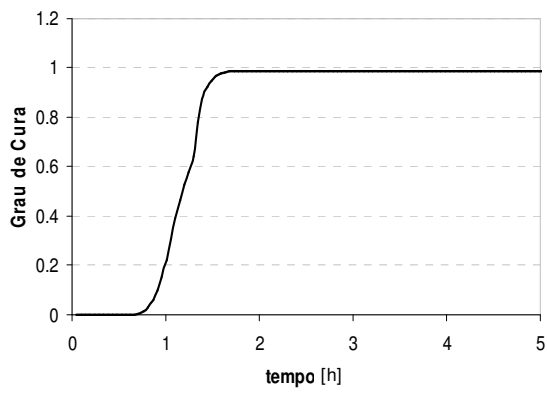


(a)

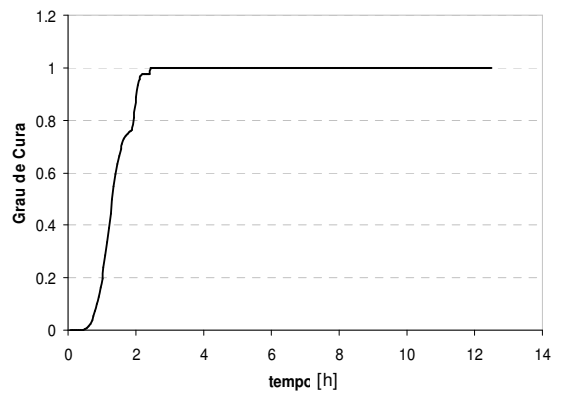


(b)

Figura 5.30. Perfis de temperatura com ciclos de cura otimizado e não otimizado do problema com o modelo híbrido (a) Perfil Otimizado. (b) Perfil original



(a)



(b)

Figura 5.31. Perfis de grau de cura com ciclos de cura otimizado e não otimizado do problema com o modelo híbrido. (a) Perfil Otimizado. (b) Perfil original

Capítulo 6

Conclusões

O método das linhas junto com a técnica das diferenças finitas e a sub-rotina DASSL foi utilizado com sucesso para resolver os modelos propostos para o ciclo de cura do processo de Enrolamento Filamentar. A excelente concordância dos resultados simulados com os resultados experimentais obtidos do artigo de Calius, Lee e Springer (1990) e com dados experimentais próprios mostra a aplicabilidade do modelo para simulação deste processo e a eficiência do método de resolução proposto para resolver as equações resultantes do mesmo.

O modelo com a taxa cinética da reação estimada pelo modelo autocatalítico foi, portanto, validado com os dados descritos acima e utilizado para validar uma outra abordagem, o modelo híbrido, no qual a taxa cinética foi prevista por uma rede neuronal. A concordância entre os resultados obtidos mostra que esta técnica matemática pode ser utilizada com confiança como uma ferramenta alternativa para descrição desta taxa, quando dados experimentais estiverem disponíveis.

Observou-se também que, apesar da validação do modelo, o ciclo de cura utilizado era ineficiente, visto que, submete o sistema a um longo tempo e a uma alta temperatura de processamento. Dessa forma, a otimização do ciclo de cura foi realizada, segundo o algoritmo proposto, de maneira a levar o sistema a uma conversão máxima com um menor tempo e uma menor temperatura de processamento, minimizando, de acordo com as funções objetivos utilizadas, o custo do processo.

Uma nova função objetivo foi proposta e integrada com sucesso ao sistema de equações do modelo para o procedimento de otimização, fornecendo ciclos de cura com tempo total de processamento cerca de seis vezes menor do que o ciclo original e satisfazendo também a restrição de cura mínima desejada, a qual foi imposta ao sistema como uma penalidade.

Referencias Bibliográficas

Albuquerque, Renata Jorge de. *Desenvolvimento de material compósito para reforço de dutos de aço*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Materiais. COPPE/UFRJ. 130 p., 2005

Arumugan, M. S; Rao, M.V.C. *On the improved performances of the particle swarm optimization algorithms with adaptatives parameters, croos-over operators and root mean square variants for computing optimal control of s class of hybrid systems* Applied Soft Computing, v. 8, p. 324-336, 2008

Biscaia Jr., E.C.; Schwaab, M.; Pinto, J.C.. *Um novo enfoque do método do enxame de partículas*. Anais NanoBio 2004, Rio de Janeiro, 2004.

Calado, V. M. A.; Advani, S. G. Thermoset Cure Kinetics And Rheology. In: Raju S. Dave; Alfred C. Loos. (Org.). *Processing of Continuous Fiber Reinforced Composites*. 01 ed. Estados Unidos: Hanser Publishers. v. 1, p. 32-107, 2000.

Calius. E. P.; Lee, S.; Springer, G. S. *Filament Winding Cylinders: II. Validation of the Process Model*. Journal of Composite Materials. v. 24. Dec. 1990.

Clerc, M. *The swarm and the queen: toward a deterministic and adaptive particle swarm optimization.*, in Proc. ICEC'99, Washington, DC, p. 1951–1957, 1999.

Contant, S.; Lona, L. M. F., Calado, V. M. A. *Predição do comportamento térmico de tubos compósitos através de redes neuronais*. Associação Brasileira de Polímeros. São Carlos, v.14 n. 5 p. 295-300, 2004

De Souza Jr. *Redes Neuronais Artificiais na Engenharia Química*. Apostila do Curso de Redes Neuronais. Rio de Janeiro, 2001

De Souza Jr. *Redes Neurais com STATISTICA*. Curso de treinamento para a versão 6 do software. Escola de Química. Rio de Janeiro.

Han, C. D., Lee, D. S., Chin, H. B. *Development of a Mathematical Model for the Pultrusion Process*. Polymer Engineering and Science, v. 26, n. 6, mar. 1986.

Kennedy, J., Eberhart, R. C. *Swarm Intelligence*. 1st ed., Morgan Kaufmann Publishing, 2001.

Lee, S.; Springer, G. S. *Filament Winding Cylinders: I. Process Model*. Journal of Composite Materials. v. 24. Dec. 1990.

Moraes, A. O. S.; Pagano, R. L.; Biscaia Jr., E. C.; Calado, V. M. A.. *Estudo de um Algoritmo Modificado do Enxame de Partículas*. Anais do XVII Congresso Brasileiro em Engenharia Química 2008, Recife, 2008

Pagano, R. L.; De Souza Jr., M. B.; Calado, V. M. A.; Biscaia Jr., E. C. *Otimização do Processo de Enrolamento Filamentar utilizando um modelo híbrido*. XVII Congresso Brasileiro de Engenharia Química. Recife. Set. 2008(a)

Pagano, R. L.; Calado, V. M. A.; Tavares, F. W.; Biscaia Jr., E. C. *Cure Kinetic parameter estimation of thermosetting resins with isothermal data by using particle swarm optimization*. European Polymer Journal, jun. 2008(b)

Petzold, L. R., DASSL code, version 1989, Computing and Mathematics Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, L316, PO Box 808, Livermore, CA 94559, 1989.

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

Santos, L. S.. *Modelagem e Simulação do Processo de Pultrusão*. Dissertação de Projeto de Final de Curso. EQ/UFRJ. 120 p., Rio de Janeiro, 2007

Schwaab, M.. *Avaliação de algoritmos Heurísticos de Otimização em Problemas de Estimação de Parâmetros*. Dissertação de Mestrado em Engenharia Química. PEQ/COPPE/UFRJ. 149 p., 2005

Zhao, L.; Mantell, S. C.; Cohen, D.; McPeak, R.. *Finite element modeling of the filament winding process*. Composite Structures 52. p. 499 – 510. 2001

Apêndice

Apêndice A – Solução de Sistema Dinâmico de 2ª Ordem Subamortecido

O algoritmo modificado do Enxame de Partícula apresentados no capítulo 2 resulta de considerar o movimento de cada partícula do enxame de acordo como um sistema de 2ª ordem subamortecido análogo ao sistema massa+mola+amortecedor. A solução desse sistema fornece as Equações 2.35 e 2.36 para atualização da posição e velocidade de cada partícula e é apresentada a seguir.

O sistema de segunda ordem considerado para o movimento das partículas é descrito pela Equação A.1

$$\frac{d^2 \mathbf{y}_i}{dt^2} + 2\xi_i \frac{d\mathbf{y}_i}{dt} + q\mathbf{y}_i = 0 \quad (\text{A.1})$$

Sujeita às seguintes condições iniciais:

$$\mathbf{y}_i(t_k) = \mathbf{y}_i^k = \mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k \quad (\text{c.i.1})$$

$$\frac{d\mathbf{y}_i}{dt} = \mathbf{v}_i^k \quad (\text{c.i.2})$$

Em que \mathbf{y}_i é um vetor de variáveis de desvio de \mathbf{x}_i , de acordo com a Equação A.2.

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_i - \mathbf{X}_i^k \quad (\text{A.2})$$

A Equação A.1 corresponde a uma Equação Diferencial Linear de 2ª ordem com coeficientes constantes. Como tal, sua solução analítica existe e pode ser determinada.

Essa solução é feita fixando-se o valor de \mathbf{X}_i^k no início do intervalo e sorteando o valor de ξ_i apenas uma vez em t_i .

Aplicando-se a Transformada de Laplace à Equação A.1, obtém-se a Equação A.3.

$$(s^2 + 2\xi_i s + q) \cdot L(\mathbf{y}_i^{k+1}) - s\mathbf{y}_i^k - 2\xi_i \mathbf{y}_i^k - \mathbf{v}_i^k = 0 \quad (\text{A.3})$$

A solução da Equação A.3 fornece a posição da partícula na iteração (tempo discreto) $k+1$, em termos da posição e velocidade da partícula na iteração anterior. Esta solução é obtida aplicando-se a transformada inversa à Equação A.3, o que resulta na Equação A.4

$$\mathbf{y}_i^{k+1} = L^{-1} \left[\frac{s\mathbf{y}_i^k}{(s^2 + 2\xi_i s + q)} + \frac{2\xi_i \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k}{(s^2 + 2\xi_i s + q)} \right] \quad (\text{A.4})$$

Essa transformada inversa pode ser resolvida, resultando na Equação para posição da partícula. Para tal, o argumento dentro do operador pode ser manipulado algebricamente de modo a evidenciar as formas para as quais as Transformadas de Laplace são facilmente determinadas. Assim as seguintes manipulações são realizadas:

$$s^2 + 2\xi_i s + q = (s - r_1) \cdot (s - r_2) \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{s\mathbf{y}_i^k}{(s^2 + 2\xi_i s + q)} = \frac{A}{(s - r_1)} + \frac{B}{(s - r_2)} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{2\xi_i \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k}{(s^2 + 2\xi_i s + q)} = \frac{C}{(s - r_1)} + \frac{D}{(s - r_2)} \quad (\text{A.7})$$

As Equações A.6 e A.7 dão origem aos seguintes sistemas de Equações:

$$A + B = \mathbf{y}_i^k \quad (\text{A.8})$$

$$Ar_2 + Br_1 = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$C + D = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$-C \cdot r_2 - D \cdot r_1 = 2\xi_i \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k \quad (\text{A.11})$$

Resolvendo esses sistemas obtêm-se as constantes A, B, C e D

$$A = -\frac{r_1 \mathbf{y}_i^k}{(r_2 - r_1)} \quad B = \frac{r_2 \mathbf{y}_i^k}{(r_2 - r_1)} \quad C = -\frac{2\xi_i \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k}{(r_2 - r_1)} \quad D = \frac{2\xi_i \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k}{(r_2 - r_1)}$$

Logo, a Equação A.4 torna-se:

$$\mathbf{y}_i^{k+1} = L^{-1} \left[\frac{A+C}{(s-r_1)} + \frac{B+D}{(s-r_2)} \right] \quad (\text{A.12})$$

A solução da Equação A.12 é obtida facilmente a partir do uso de tabelas onde as Transformadas de Laplace já estão determinadas. Para a Equação A.12 a solução é dada pela seguinte Equação

$$\mathbf{y}_i^{k+1} = (A+C) \cdot \exp(r_1 t) + (B+D) \cdot \exp(r_2 t) \quad (\text{A.13})$$

Substituindo os valores das constantes, a Equação A.13 torna-se

$$\mathbf{y}_i^{k+1} = \left(\frac{2\xi_i \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k}{r_2 - r_1} \right) \cdot [\exp(r_2 t) - \exp(r_1 t)] + \frac{\mathbf{y}_i^k}{r_2 - r_1} \cdot [r_2 \exp(r_2 t) - r_1 \exp(r_1 t)] \quad (\text{A.14})$$

A Equação A.14 representa a solução do sistema de 2ª ordem considerado. Entretanto, dependendo dos valores dos parâmetros de amortecimento ξ_i e do ganho estático q , três comportamentos distintos são possíveis para essa Equação: um comportamento oscilatório com amplitude decrescente, que acontece quando os valores do parâmetro

tornam as raízes r_1 e r_2 da Equação A.5 em um par de complexos conjugados, um comportamento oscilatório com amplitude constante, equivalente as raízes complexas conjugadas com parte real nula e o comportamento não-oscilatório, quando as raízes são reais.

O comportamento de interesse neste caso é o regime oscilatório, que também é o mais complexo dos três. As Equações A.15 e A.16 fornecem as raízes da Equação A.5.

$$r_1 = -\xi_i - (\xi_i^2 - q)^{1/2} \quad (\text{A.15})$$

$$r_2 = -\xi_i + (\xi_i^2 - q)^{1/2} \quad (\text{A.16})$$

Dividindo essas Equações pela raiz de q , obtêm-se as Equações A.19 e A.18

$$\frac{r_1}{\sqrt{q}} = -\xi'_i - (\xi_i'^2 - 1)^{1/2} \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{r_2}{\sqrt{q}} = -\xi'_i + (\xi_i'^2 - 1)^{1/2} \quad (\text{A.18})$$

Em que:

$$\xi'_i \equiv \frac{\xi_i}{\sqrt{q}} \Rightarrow$$

Se ξ'_i for menor do que 1, então o regime oscilatório é obtido, como será mostrado adiante. Dessa forma as Equações A.17 e A.18 tornam-se:

$$\frac{r_1}{\sqrt{q}} = -\xi'_i - i \cdot \omega \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{r_2}{\sqrt{q}} = -\xi'_i + i \cdot \omega$$

Em que:

$$\omega \equiv \left(1 - \xi_i'^2\right)^{1/2}$$

A subtração das raízes $r_2 - r_1$ fornece a seguinte Equação:

$$r_2 - r_1 = 2i\omega \cdot \sqrt{q} \quad (\text{A.20})$$

O regime oscilatório é evidenciado pelo uso da Equação de Euler.

Equação de Euler

$$e^{ix} = \cos(x) + i\text{sen}(x)$$

Assim, as exponenciais da Equação A.14 tornam-se:

$$\exp(r_1 t) = \exp[-q^{1/2}(\xi_i' + i\omega)t] = \exp(-q^{1/2}\xi_i' t) \cdot [\cos(q^{1/2}\omega t) - i\text{sen}(q^{1/2}\omega t)] \quad (\text{A.21})$$

$$\exp(r_2 t) = \exp[-q^{1/2}(\xi_i' + i\omega)t] = \exp(-q^{1/2}\xi_i' t) \cdot [\cos(q^{1/2}\omega t) + i\text{sen}(q^{1/2}\omega t)] \quad (\text{A.22})$$

Logo, a Equação A.14 fica:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_i^{k+1} = & \exp(-q^{1/2}\xi_i' t) \cdot \left\{ \left(\frac{2\xi_i' \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^k}{2i\omega\sqrt{q}} \right) \cdot [2i\text{sen}(q^{1/2}\omega t)] + \right. \\ & \left. \frac{\mathbf{y}_i^k \sqrt{q}}{2i\omega\sqrt{q}} \cdot [-2i\xi_i' \text{sen}(q^{1/2}\omega t) + 2i\omega \cos(q^{1/2}\omega t)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Definindo:

$$t' = t\sqrt{q} \qquad \mathbf{v}_i^{k'} = \frac{\mathbf{v}_i^k}{\sqrt{q}}$$

Substituindo ξ_i' por $\xi_i' \cdot \sqrt{q}$ e agrupando os termos de seno e cosseno, a Equação A.23 torna-se:

$$\mathbf{y}_i^{k+1} = \exp(-\xi_i' t') \cdot \left\{ \mathbf{y}_i^k \cos(\omega t') + \left(\xi_i' \mathbf{y}_i^k + \mathbf{v}_i^{k'} \right) \frac{\text{sen}(\omega t')}{\omega} \right\} \quad (\text{A.24})$$

A forma final para a posição da partícula dada pela Equação 2.35 é obtida pela substituição da Equação A.2, onde o desvio é retirado da Equação A.24.

Assim, as formas finais para atualização da posição e velocidade das partículas são dadas pelas Equações A.25 e A.26.

$$\mathbf{x}_i^{k+1} = \mathbf{X}_i^k + \exp(-\xi_i' t') \cdot \left\{ (\mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k) \cdot \cos(\omega t') + [(\mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k) \cdot \xi_i' + \mathbf{v}_i^k] \frac{\text{sen}(\omega t')}{\omega} \right\} \quad (\text{A.25})$$

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = \exp(-\xi_i' t') \cdot \left\{ \mathbf{v}_i^{k'} \cos(\omega t') - [\xi_i' \mathbf{v}_i^{k'} + (\mathbf{x}_i^k - \mathbf{X}_i^k) \cdot (\xi_i'^2 + \omega^2)] \cdot \frac{\text{sen}(\omega t')}{\omega} \right\} \quad (\text{A.26})$$

Onde a Equação para a velocidade (A.26) foi obtida através da derivada em relação ao tempo da Equação A.25

Apêndice B – Aplicação do PSO modificado à otimização de funções padrão

Os resultados da aplicação do PSO à três problemas padrões de otimização são apresentados nesta seção: A maximização da Função Alpina e a minimização das Funções Levy e Rosenbrook. Essas funções foram utilizadas para avaliar o desempenho do algoritmo modificado na otimização de funções multinodais e multidimensionais. As Equações 5.3, 5.4 e 5.5 descrevem a Função Alpina, a Função Levy e a Função de Rosenbrook respectivamente.

$$f(x, y) = (\sqrt{x \cdot y}) \cdot \text{sen}(x) \cdot \text{sen}(y) \quad (5.3)$$

$$f(x, y) = (x + 1,42513)^2 + (y + 0,80032)^2 + \sum_{i=1}^5 \{i \cos[(i+1)x + 1]\} \cdot \sum_{j=1}^5 \{j \cos[(i+1)y + 1]\} \quad (5.4)$$

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n-1} \left[100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right] \quad (5.5)$$

A Função Alpina, dada pela Equação 5.3, apresenta no intervalo $[0,10]^2$ vários mínimos e máximos locais e um máximo global localizado no ponto $x = y = 7,917$ onde a função apresenta o valor de 7,8856. A Figura 5.20 mostra o gráfico desta função no intervalo considerado.

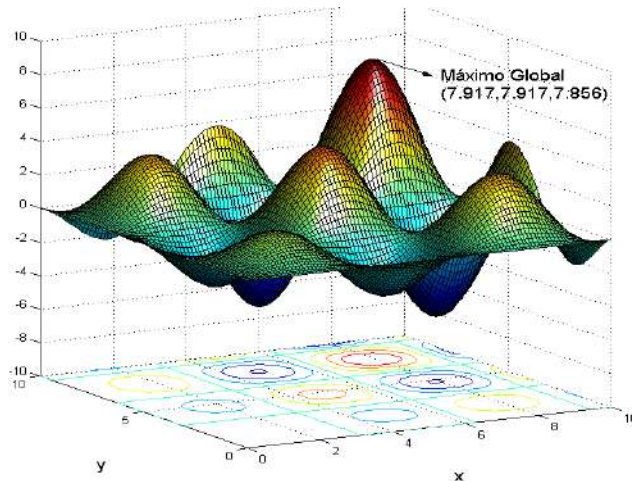


Figura 5.20. Gráfico Tridimensional da Função Alpina

A Função de Levy apresenta no intervalo de $[-10, 10]^2$ 760 mínimos locais e um mínimo global localizado no ponto $[-1,3068, -1,4248]$ onde a função vale $-176,14$. A Figura 5.21 mostra o gráfico desta função no intervalo $[-2;2] \times [-3;3]$.

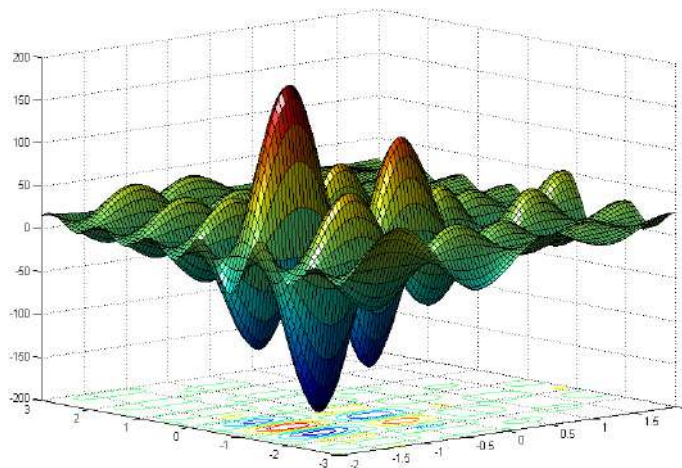


Figura 5.21. Gráfico Tridimensional da Função Levy

O teste de minimização da Função de Rosenbrook foi feito com dez dimensões da mesma. Esta função apresenta um mínimo global no ponto $x_i = 1$ para $i = 1, \dots, n$. O grande número de dimensões consideradas leva a uma grande dificuldade em se minimizar esta função. Dessa forma, foi considerado que o algoritmo obteve sucesso, todas as vezes que encontrou valores da função objetivo menores do que 10.

A Tabela 5.5 resume os resultados da otimização destes três problemas pelo PSO modificado (versão de Biscaia Jr., 2004).

Tabela 5.5. Resumo dos resultados da aplicação do PSO modificado aos problemas de otimização

	<i>m</i>	<i>n</i>	<i>Numero de corrida</i>	<i>Média das Iterações</i>	<i>Percentual de Sucesso</i>
Função Alpina	100	30	1000	118	> 99 %
Função Levy	100	30	1000	130	> 99 %
Função de Rosenbrook	500	50	1000	510	> 98 %

Na Tabela 5.5 *m* é o numero mínimo de iterações do procedimento e *n* é o número de partículas utilizadas. O número de corridas corresponde ao número de vezes que a função foi otimizada e o percentual de sucessos fornece o percentual das corridas que resultaram em sucesso do algoritmo na otimização. Percebe-se, que o algoritmo foi extremamente eficiente na otimização destas funções, encontrando o ótimo global em quase 100 % das corridas para a Função Alpina e Levy e obtendo sucesso, de acordo com o critério adotado, em mais de 98 % das corridas com a função de Rosenbrook.

Resultados mais detalhados a respeito do PSO modificado são apresentados em Moraes *et al* (2008) onde são apresentados todos os detalhes dos testes realizados acima, assim como uma aplicação do algoritmo a um problema de otimização com restrição.