

ANEXO A

ARQUIVOS DE DADOS

A.1 Arquivo *INFO.PRE*

Este arquivo é utilizado como arquivo de entrada de dados para o programa gerador de domínios, que não foi desenvolvido nesta tese. Um exemplo do arquivo *INFO.PRE* é fornecido a seguir.

```

Este arquivo contem dados de entrada para o gerador de dominios.

***** PARAMETROS *****

37          numero de parametros
1.0         diametro dos cilindros
0.05        concentracao
0
20.0        numero desejado de dominios
81.0        numero do comeco da serie dos dominios
32.0        numero de cilindros por celula
1.0         semente para o gerador de numeros randomicos
0.03        parametro para e-smoothing (suavizacao do Voronoi)
0.08        h0 - espacamento default da malha
0.0         dimensao do hipercubo
1.0         iocomm - controle de i/o
2.0         irangen - tipo do gerador de numeros randomicos
0
2.0         mb - min. numero de nos entre dois cilindros
2.0         nr - nivel de refino da malha
0
1.E-2       epsilon para iteracao interna (GC paralelo)
5.e-5       epsilon para iteracao externa (GC paralelo)
1.0         iocomm - controle de i/o (saida)
1.0         order - maior grau das funcoes interpolantes (FEM)
3.0         m - numero de nos por elemento finito
0
0.17        h - espacamento da malha de background (VT)
0.16        rho - espacamento de fronteira (VT)
1.0         tipo de malha (VT)
2.0         parametro de suavizacao (VT)
0
0.00        iop - desenho da malha (Hecht)
0.25        puis - taxa de mudanca da malha (Hecht)
0.75        coef - teste de parada para a malha (Hecht)
0
1.00        condutividade termica da matriz
5.00        condutividade termica dos cilindros
0
0.08        alpha - Dist. min. entre cils. (Criterio para NIP)
0.20        beta - Metade da dist. entre arestas de um NIP
0.00        indicador do tipo de limite (0 - inferior, 1 - superior)

```

```
***** PARAMETROS LOGICOS *****  
  
11      numero de parametros logicos  
F      ifhex - celula hexagonal (nao quadrada) com um cilindro  
F      ifpage1 - impressao do dominio antes do e-smoothing  
F      ifpage2 - impressao do dominio depois do e-smoothing  
T      ifpage3 - impressao do diagrama de Voronoi  
F      ifnum - impressao do numero do cilindro no seu centro  
F      ifploop - impressao do dominio dentro do loop  
F      sem efeito  
T      regul - suavizacao da malha (Hecht)  
T      ifprint - impressao da malha (saida)  
T      ifheat - problema de transferencia de calor (saida)  
F      ifflow - problema de escoamento de Stokes (saida)
```

Os parâmetros de entrada do programa gerador de domínios, relevantes para esta tese, são definidos a seguir:

- **diâmetro dos cilindros:** escolhido igual à unidade; neste programa, todos os demais parâmetros de entrada de dimensão de comprimento são normalizados em relação a este parâmetro;
- **concentração:** é a relação entre o volume de fibras e o volume total da célula periódica (ou do meio poroso);
- **número desejado de domínios:** indica para quantos domínios se deseja calcular a permeabilidade longitudinal, ou seja, o tamanho da amostra; todos os domínios considerados terão os mesmos parâmetros, exceto o posicionamento dos cilindros, governado por um gerador de números randômicos;
- **número do começo da série dos domínios:** indica o domínio inicial a ser gerado; fornecendo o valor N a este parâmetro, o primeiro domínio gerado será igual ao N -ésimo domínio da série quando o número do começo é 1;
- **número de cilindros por célula:** indica o número de fibras existentes na célula periódica;
- **semente para o gerador de números randômicos:** é o valor inicial para o gerador de números randômicos, necessário para a geração de domínios diferentes; se for usada a mesma semente, o gerador de números randômicos fornecerá sempre a mesma seqüência de valores;

- **parâmetro para suavização do Voronoi:** define a eliminação de arestas “muito pequenas”, do tamanho de h_o ou menores;
- **espaçamento predefinido da malha (h_o):** é utilizado na Equação (4.1) e determina, juntamente com o nível global de refino da malha, o espaçamento entre dois nós consecutivos no contorno de cada lajota e de cada cilindro da célula;
- **controle de entrada/saída:** indicador de apresentação das etapas da geração de domínios em vídeo; se for 1, as etapas são apresentadas, se for 0, nada é apresentado;
- **tipo do gerador de números randômicos:** no programa, existem três geradores de números randômicos; o gerador utilizado nos cálculos apresentados nesta tese é o de número 2;
- **mínimo número de nós entre dois cilindros (m):** é utilizado na Equação (4.1) e determina o mínimo número de nós existentes entre dois cilindros; nesta tese, em todos os casos executados foi utilizado o valor de $m = 2$;
- **nível de refino da malha (n_r):** é utilizado na Equação (4.1) e determina, juntamente com o espaçamento predefinido da malha, o espaçamento entre dois nós consecutivos no contorno de cada lajota e de cada cilindro da célula;
- **tolerância para iteração externa:** tolerância de convergência para o método dos gradientes conjugados, t ;
- **controle de entrada/saída (saída):** indicador de apresentação das etapas da geração de malhas e cálculo da permeabilidade em vídeo; se for 1, as etapas são apresentadas, se for 0, nada é apresentado;
- **maior grau das funções interpolantes:** define o grau das funções de interpolação dos elementos utilizados no método dos elementos finitos; nesta tese foram utilizados elementos de primeira ordem, tendo-se fornecido o valor 1;
- **número de nós por elemento finito:** indica se os elementos utilizados têm 3 nós (no caso de elementos de primeira ordem), 6 (no caso de elementos de

segunda ordem) ou mais; para elementos de primeira ordem, deve ser fornecido o valor 3;

- **taxa de mudança da malha:** controla a taxa de alteração do tamanho dos elementos da malha durante a geração de vértices interiores; um bom valor é 0,25, utilizado nesta tese; o valor 0,1 fornece mais vértices;
- **teste de parada para a malha:** coeficiente de teste de parada para a geração de vértices interiores; um bom valor é 0,75, utilizado nesta tese;
- **distância mínima entre cilindros, a_c :** se a distância entre cilindros for menor que a_c , a região de estreito será eliminada;
- **metade da distância entre arestas de um NIP, b :** define o tamanho da união entre fibras (no caso de limite inferior) ou do corte de fibras (no caso de limite superior) na eliminação de regiões de estreito (ver Figura 3.3);
- **indicador do tipo de limite:** define se a eliminação de regiões de estreito se dará através da união das fibras (“lower bound”) ou através do corte das mesmas (“upper bound”);
- **célula hexagonal (não quadrada) com um cilindro:** só tem efeito no caso de haver um único cilindro na célula; se for “T” (verdadeiro), será obtido um arranjo triangular, sendo a célula unitária um hexágono, se for “F” (false), a célula considerada será um quadrado, levando a um arranjo quadrado;
- **impressão do domínio antes do e-smoothing:** indica se o domínio será impresso antes da suavização do Voronoi;
- **impressão do domínio depois do e-smoothing:** indica se o domínio será impresso depois da suavização do Voronoi;
- **impressão do Diagrama de Voronoi:** indica se o Diagrama de Voronoi será impresso;
- **impressão do número do cilindro no seu centro:** indica se será impresso o número do cilindro em seu centro; só tem valor se o Diagrama de Voronoi for impresso;
- **impressão do domínio dentro do loop:** indica se todos os domínios serão impressos, no caso de haver mais de um domínio;

- **suavização da malha:** se for “T” (verdadeiro), a malha será suavizada, ou seja, os triângulos serão ajustados para que sejam o mais próximo possível de um triângulo equilátero quanto for possível;
- **impressão da malha (saída):** indicador da impressão da malha final;

A.2 Arquivo INFO.REA

As informações que descrevem os domínios gerados são armazenadas no arquivo INFO.REA, que será utilizado como entrada para o programa principal desenvolvido nesta tese, que gera a malha de triângulos e calcula a permeabilidade longitudinal do meio poroso. Um exemplo do arquivo INFO.REA é fornecido a seguir.

```

***** PARAMETROS *****

      37          numero de parametros
.1000000E+01     numero de malhas
.1000000E+01     numero do comeco da serie das malhas
.1000000E+01     diametro dos cilindros
.1000000E+00     concentracao
.5604991E+01     tamanho da celula
.8000000E-01     h0 - espacamento default da malha
.2000000E+01     mb - min. numero de nos entre dois cilindros
.2000000E+01     nr - nivel de refino da malha
.0000000E+00     sem efeito
.1000000E+01     iocomm - controle de i/o
.0000000E+00
.0000000E+00
.0000000E+00
.0000000E+00
.0000000E+00
.0000000E+00
.0000000E+00
.0000000E+00
.1000000E-01     epsilon para iteracao interna (GC paralelo)
.5000000E-04     epsilon para iteracao externa (GC paralelo)
.1000000E+01     order - maior grau das funcoes interpolantes (FEM)
.3000000E+01     m - numero de nos por elemento finito
.0000000E+00
.1700000E+00     h - espacamento da malha de background (VT)
.1600000E+00     rho - espacamento de fronteira (VT)
.1000000E+01     tipo de malha (VT)
.2000000E+01     parametro de suavizacao (VT)
.0000000E+00
.0000000E+00     iop - desenho da malha (Hecht)
.2500000E+00     puis - taxa de mudanca da malha (Hecht)
.7500000E+00     coef - teste de parada para a malha (Hecht)
.0000000E+00
.1000000E+01     condutividade termica da matriz
.5000000E+01     condutividade termica dos cilindros
.0000000E+00
.8000000E-01     alpha - Dist. min. entre dois cils. (Critério para NIP)
.2000000E+00     beta - Metade da dist. entre arestas de um NIP
.0000000E+00     lowup - 0 (Lower bound), 1 (Upper bound)

***** PARAMETROS LOGICOS *****

      11          numero de parametros logicos
      F          sem efeito
      F          sem efeito
      F          sem efeito
      F          sem efeito

```

```

F          sem efeito
F          sem efeito
F          sem efeito
T          regul - suavizacao da malha (Hecht)
T          ifprint - impressao da malha
T          ifheat - problema de transferencia de calor
F          ifflow - problema de escoamento de Stokes

1 GOOD 1 ***** DOMINIO # 1 *****

***** DADOS DOS PROCESSADORES *****

1  Processador # 1
3  numero de linhas abaixo para esse processador
4 12 numero de lajotas (locais)/arestas globais
1  2  3  4
1  2  3  4  5  6  7  8  9  10  11  12

***** GEOMETRIA *****

Dados Globais Copiados
4  8 12 numero total de lajotas, vertices globais, e arestas globais
.30E+00 .15E+00 dist. min. cil.-cil., dist. min. cil.-ar.

1 Lajota # 1
4 numero total de vertices/arestas locais
coordenadas x e y, mapeamentos local -> global
3.992914 2.378820 1 1
3.475754 2.243631 2 2
2.245101 -3.906558E-01 3 3
5.095409 -8.677685E-01 4 4
3.673602999506118 1.126576287000945 x e y do centro do cilindro
0 numero de segmentos na sup. do cilindro

2 Lajota # 2
8 numero total de vertices/arestas locais
coordenadas x e y, mapeamentos local -> global
5.815362 4.382467 5 5
3.992914 2.378820 1 4
5.095409 -8.677685E-01 4 6
5.815362 -1.222524 5 7
5.949917 -1.222524 6 8
6.623393 -5.790596E-01 7 9
6.502629 3.204200 8 10
5.949917 4.382467 6 7
5.008745802505900 1.579971651558020 x e y do centro do cilindro
0 numero de segmentos na sup. do cilindro

3 Lajota # 3
4 numero total de vertices/arestas locais
coordenadas x e y, mapeamentos local -> global
1.018401 -5.790603E-01 7 11
2.245101 -3.906558E-01 3 2
3.475754 2.243631 2 12
8.976383E-01 3.204201 8 9
2.492067055610592 1.678551749957675 x e y do centro do cilindro
0 numero de segmentos na sup. do cilindro

4 Lajota # 4
8 numero total de vertices/arestas locais
coordenadas x e y, mapeamentos local -> global
3.449265E-01 4.382467 6 10
8.976383E-01 3.204201 8 12
3.475754 2.243631 2 1
3.992914 2.378820 1 5
5.815362 4.382467 5 6
5.095409 4.737223 4 3
2.245101 5.214335 3 11
1.018401 5.025931 7 8
3.101639219474296 3.314609867362968 x e y do centro do cilindro
0 numero de segmentos na sup. do cilindro

1 Aresta Global # 1
16 2 1 3 1 4

```

	1	0	0	0			
	3.673603		1.126576		6.307776E-01		9.671368E-01
2	Aresta Global #	2					
	104	2		2	2	1	3
	1	0	0	0			
	2.492067		1.678552		1.520547E-01		9.923027E-01
3	Aresta Global #	3					
	80	2		3	6	1	4
	1	0	1	0			
	3.673603		1.126576		1.232248		9.929349E-01
4	Aresta Global #	4					
	113	2		4	2	1	2
	1	0	0	0			
	5.008746		1.579972		2.050123E-01		1.001589
5	Aresta Global #	5					
	76	2		1	4	2	4
	2	0	0	0			
	5.008746		1.579972		7.889942E-01		9.936759E-01
6	Aresta Global #	6					
	21	2		3	5	2	4
	2	0	1	0			
	5.008746		1.579972		1.657352		9.794015E-01
7	Aresta Global #	7					
	3	2		4	8	2	2
	2	0	1	0			
	5.008746		1.579972		2.302495		8.961377E-01
8	Aresta Global #	8					
	24	2		5	8	2	4
	2	-1	1	0			
	8.706630		-2.290381		2.176470		9.961238E-01
9	Aresta Global #	9					
	105	2		6	4	2	3
	2	-1	0	0			
	5.008746		1.579972		1.044942		9.999986E-01
10	Aresta Global #	10					
	34	2		7	1	2	4
	2	-1	0	0			
	5.008746		1.579972		1.542260		1.002783
11	Aresta Global #	11					
	33	2		1	7	3	4
	3	0	1	0			
	2.492067		1.678552		1.507735		9.919962E-01
12	Aresta Global #	12					
	86	2		3	2	3	4
	3	0	0	0			
	2.492067		1.678552		3.729635E-01		9.939327E-01

Este arquivo repete aqueles parâmetros fornecidos no arquivo INFO.PRE necessários para a geração da malha e solução numérica, além de fornecer as descrições geométricas e topológicas completas de cada domínio, como por exemplo as coordenadas dos vértices de cada lajota, coordenadas dos centros dos cilindros e dados de cada aresta que compõe a célula periódica.