

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**MODELAGEM E PROJETO COMPUTACIONAL DE MATERIAIS MICRO-POROSOS
COM DISTRIBUIÇÃO ALEATÓRIA UTILIZANDO UMA FORMULAÇÃO DE
ELEMENTOS DE CONTORNO**

por

Federico Carlos Buroni

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Junho de 2006

**MODELAGEM E PROJETO COMPUTACIONAL DE MATERIAIS MICRO-POROSOS
COM DISTRIBUIÇÃO ALEATÓRIA UTILIZANDO UMA FORMULAÇÃO DE
ELEMENTOS DE CONTORNO**

por

Federico Carlos Buroni
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Mecânica dos Sólidos

Orientador: Prof. Dr. Rogério José Marczak

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Samir Maghous

Prof. Dr. Eduardo Bittencourt

Prof. Dr. Guillermo Juan Creus

Prof. Dr. Flávio José Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 30 de Junho de 2006.

*Aos meus pais
Beatriz e Carlos*

RESUMO

Este trabalho apresenta uma *Formulação de Elementos de Contorno* para a modelagem em duas dimensões de microestruturas multi-fase que contêm furos e inclusões cilíndricas de raio variável, baseada nos trabalhos de Henry & Banerjee, 1991 e Banerjee & Henry, 1992 para sólidos tridimensionais. Na presente formulação, a inomogeneidade não é discretizada da forma convencional, com vistas a um método computacionalmente mais eficiente. Na implementação numérica são considerados materiais micro-porosos com distribuição aleatória. Cada micro-poro é modelado como um furo cilíndrico utilizando um único *elemento de furo* o qual interpola as variáveis físicas com funções de forma de base trigonométrica. Neste trabalho são propostas funções de forma para elementos de furo com graus de liberdade adicionais ao elemento proposto originalmente por Henry & Banerjee, 1991, obtendo-se elementos de 4, 5 e 6 nós. A integração dos núcleos singulares no elemento de furo é realizada pelo método direto, resultando um elemento regularizado. Essa integração é analisada em detalhes através de diversos experimentos numéricos, e sua eficiência é comprovada. Vários exemplos são estudados para ilustrar o desempenho do método. A formulação é utilizada para resolver o problema elástico de um *Elemento de Volume Representativo* (EVR) e aplicar a Teoria de Campos Médios para encontrar propriedades efetivas de materiais micro-porosos com matriz homogênea e isotrópica. Expressões para avaliar propriedades efetivas sob hipótese de Estado Plano de Tensões (EPT) e Estado Plano de Deformações (EPD) para materiais isotrópicos e transversalmente isotrópicos são desenvolvidas. Como exemplo de aplicação é modelado um material com propriedades e distribuição estatística de furos tomadas da microestrutura de um *ferro fundido nodular ferrítico* e considerando a hipótese de EPT. Neste exemplo é obtida a quantidade de inomogeneidades que é preciso modelar para considerar um EVR. Mostra-se que a formulação é eficiente e especialmente adequada para estimar propriedades efetivas em materiais micro-porosos. Adicionalmente, desenvolve-se também um procedimento geral para o projeto computacional de materiais compostos micro-heterogêneos com propriedades elásticas de acordo com os requerimentos pré-especificados. Esse procedimento combina *Algoritmos Genéticos* (AG) e o *Método de Busca Direta* (MBD) com a formulação de Elementos de Contorno desenvolvida. Visando acelerar o AG uma estratégia para aproximar o valor da função objetivo é proposta e implementada. A eficiência e capacidade da ferramenta desenvolvida são ilustradas mediante a solução de um problema inverso. Os resultados obtidos mostram importantes melhorias no tempo computacional, em comparação com a implementação do AG convencional, sem grandes perdas na precisão.

ABSTRACT

“Computational Modeling and Design of Random Micro-porous Materials Using a Boundary Element Formulation”

In this work a *Boundary Element Formulation* for modeling two-dimensional multi-phase microstructure containing cylindrical holes and inclusions of variable radii is presented. The formulation is based on the works of Henry & Banerjee, 1991 and Banerjee & Henry, 1992 for three-dimensional solids. In the proposed approach it is not necessary to discretize the inhomogeneity like in conventional boundary methods, leading to a computationally more efficient method. In the numerical implementation, random micro-porous materials are considered. Each micro-pore is modeled as a cylindrical hole using a single *hole element* which use trigonometric shape function to interpolate physical unknowns. In addition, the original elements proposed by Henry & Banerjee, 1991 are further developed, and higher order elements of 4, 5 and 6 nodes are introduced. The integration of singular kernels of the hole element is accomplished by the direct method, resulting a regularized element. The integration results are analyzed in detail through various numerical experiments, and its efficiency is proved. Several examples are studied in order to illustrate the performance of the method. The formulation is used to solve the elastic problem in a *Representative Volume Element (RVE)* and the Theory of Mean Fields is applied in order to obtain effective properties of random micro-porous materials with homogeneous and isotropic matrix. Expressions for the evaluation of effective properties over Plane Stress and Strain Plane hypothesis for isotropic and transversally isotropic materials are developed. As an application example, a material with the same properties and microstructure distribution of the *austempered ductile iron* is modeled considering the Plane Stress hypothesis. In this example the quantity of inhomogeneities necessary for the model to deliver a RVE is obtained. It is demonstrated that the formulation is efficient and specially adapted for effective property estimation in micro-porous materials. Additionally, a general procedure to perform the computational design of micro-heterogeneous composite materials with pre-specified elastic properties requirements is developed. It combines the use of *Genetic Algorithms (GA)* and the *Direct Search Method* along with the proposed boundary element formulation. To accelerate the GA a strategy for approximation of the objective function is proposed and implemented. The performance and capabilities of the devised tool are illustrated by solving an inverse problem. The results obtained show important savings in computing time in comparison to the standard GA, with only minor accuracy degradation.

RESUMEN

“Modelado y Diseño Computacional de Materiales Micro-porosos con Distribución Aleatoria Utilizando una Formulación de Elementos de Contorno”

En este trabajo se presenta una *Formulación de Elementos de Contorno* para el modelado en dos dimensiones de microestructuras multifase que contienen agujeros e inclusiones cilíndricas de radio variable, basándose en los trabajos de Henry & Banerjee, 1991 y Banerjee & Henry, 1992 para sólidos tridimensionales. En esta formulación, la inhomogeneidad no es discretizada en la forma convencional, buscando un método más eficiente computacionalmente. En la implementación numérica son considerados materiales micro-porosos con distribución aleatoria. Cada micro-poro es modelado como un agujero cilíndrico utilizando un único *elemento de agujero*, el cual interpola las variables físicas con funciones de forma de base trigonométrica. En este trabajo son propuestas funciones de forma para elementos de agujero con grados de libertad adicionales al elemento propuesto originalmente por Henry & Banerjee, 1991, obteniéndose elementos de 4, 5 e 6 nodos. La integración de los núcleos singulares en el elemento de agujero se realiza por el método directo, resultando un elemento regularizado. Esta integración es analizada en detalle a través de diversos experimentos numéricos, y su eficiencia es comprobada. Varios ejemplos son estudiados para ilustrar el desempeño del método. La formulación es utilizada para resolver el problema elástico de un *Elemento de Volumen Representativo* (EVR) y aplicar la Teoría de Campos Promedios para encontrar propiedades efectivas de materiales micro-porosos con matriz homogénea e isotrópica. Expresiones para evaluar propiedades efectivas sobre la hipótesis de Estado Plano de Tensiones (EPT) y Estado Plano de Deformaciones (EPD) para materiales isotrópicos e isotrópicos transversales son desarrolladas. Como ejemplo de aplicación se modela un material con propiedades y distribución estadística de agujeros tomadas de la microestructura de *hierro fundido nodular ferrítico*, considerando a hipótesis de EPT. En este ejemplo se obtiene la cantidad de inhomogeneidades que es preciso modelar para considerar un EVR. Se muestra que la formulación es eficiente y especialmente adecuada para estimar propiedades efectivas de materiales micro-porosos. Adicionalmente, también se desarrolla un procedimiento general para el diseño de materiales compuestos micro-heterogéneos con propiedades elásticas de acuerdo con requerimientos pre-especificados. Este procedimiento combina *Algoritmos Genéticos* (AG) y el Método de Búsqueda Directa con la Formulación de Elementos de Contorno desarrollada. Buscando acelerar el AG una estrategia para aproximar el valor de la función objetivo es propuesta e implementada. La eficiencia y capacidad de la herramienta desarrollada es ilustrada mediante la solución de un problema

inverso. Los resultados obtenidos muestran importantes mejoras en el tiempo computacional en comparación con la implementación del AG convencional, sin grandes pérdidas en la precisión.

INDICE

1.	INTRODUÇÃO	1
1.1.	Introdução	1
1.2.	Revisão bibliográfica	3
1.3.	Objetivos do trabalho	5
1.4.	Descrição do trabalho.....	7
2.	REVISÃO DAS EQUAÇÕES DE ELASTICIDADE E MICRO-MECÂNICA	8
2.1.	Introdução	8
2.2.	Lema de Cauchy.....	8
2.3.	Equilíbrio	9
2.4.	Relação deformação-deslocamento.....	9
2.5.	Lei constitutiva.....	10
2.6.	Elasticidade plana	11
2.7.	O problema de valores de contorno no EVR	15
2.8.	Soluções fundamentais da elasticidade	15
2.9.	Mapeamento micro-macroescala.....	17
2.9.1.	Mapeamento de deformação, tensão e trabalho	17
2.10.	Propriedades efetivas de materiais micro-heterogêneos	18
2.10.1.	Teste computacional do material.....	20
2.10.2.	Teorema da deformação média	22
2.10.3.	Teorema da tensão média	23
2.10.4.	Satisfação da condição de energia de Hill.....	24
3.	MODELAGEM NUMÉRICA DO MATERIAL	26
3.1.	Introdução	26
3.2.	Equação integral de contorno para elastoestática.....	26
3.3.	Formulação integral de contorno para matriz com furos	27
3.4.	Formulação integral de contorno para matriz com inclusões.....	30
3.5.	Discretização das integrais de contorno.....	32
3.6.	Solução do sistema de equações	39
3.7.	Avaliação numérica das matrizes de coeficientes	41
3.7.1.	Integração direta das integrais fortemente singulares do elemento de furo.....	43
3.8.	Experimentos numéricos com a integração do elemento de furo.....	47
3.9.	Exemplos de verificação	53
3.10.	Considerações sobre os resultados obtidos com o elemento de furo	58
4.	IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL.....	60
4.1.	Introdução	60
4.2.	Elementos de ordem superior.....	60
4.3.	Interação entre furos	65
4.4.	Propriedades efetivas de materiais micro-porosos em duas dimensões	69
4.4.1.	EPT, EPD e propriedades efetivas no plano.....	72
4.5.	Propriedades efetivas do ADI	76

4.6.	Determinação do EVR do ADI	78
4.7.	Análise dos resultados obtidos na simulação do ADI	82
5.	PROJETO DE MATERIAIS COM ALGORÍTMOS NÃO DETERMINISTICOS	84
5.1.	Introdução	84
5.2.	Algoritmos genéticos	85
5.3.	Método de busca direta	86
5.4.	Implementação	87
5.5.	Exemplo de aplicação	88
5.6.	Algoritmo genético com avaliação aproximada da função objetivo	92
5.7.	Exemplo de aplicação do AG com modelo aproximado	94
5.8.	Considerações finais	95
6.	CONCLUSÕES	97
6.1.	Sugestões para continuidade do trabalho	99
	REFERÊNCIAS BLIOGRÁFICAS	101
	APÊNDICE A	
	BANDAS SOBRE O ERRO NA ANÁLISE EVR LINEAR.....	109

LISTA DE SÍMBOLOS

Caracteres romanos

a, b	Deslocamento dos nós dos extremos no elemento descontínuo.	
b_i	Força de corpo na direção i .	$\left[\frac{N}{m^3} \right]$
C_{ijklm}	Tensor de elasticidade.	
C_{ijklm}^*	Tensor de elasticidade efetivo.	
C_{mon}^*	Tensor de elasticidade efetivo para materiais com simetria monoclinica.	
$c_{\alpha\beta}$	Matriz de constantes elásticas	
$c_{\alpha\beta}^*$	Matriz de constantes elásticas efetiva.	
c_{mon}^*	Matriz de constantes elásticas efetiva para materiais com simetria monoclinica.	
$C_{isoTranv}^{EPD}$	Matriz de constantes elásticas isotrópica transversal sob EPD.	
$C_{isoTranv}^{EPT}$	Matriz de constantes elásticas isotrópica transversal sob EPT.	
C_{iso}^{EPD}	Matriz de constantes elásticas isotrópica sob EPD.	
C_i	Coefficientes das soluções fundamentais da elasticidade.	
C_{ij}	Matriz de coeficientes que depende da geometria do contorno.	
d	Distância entre centros de furos ou nódulos.	$[mm]$
D	Diâmetro do furo.	$[mm]$
$e_j(\xi)$	Vetor força aplicada no ponto ξ na direção j .	
E	Módulo de Young.	$[GPa]$
E^*	Módulo de Young efetivo.	$[GPa]$
E_{ij}	Matriz de constantes elásticas em duas dimensões.	$[GPa]$
$\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_{ij}$	Vetor ou matriz simétrica constante.	
F_{-1}, F_{-2}	Expansões assintóticas de Laurent de um tensor em torno do ponto singular.	
$[F], [G]$	Matrizes de coeficientes do método dos elementos de contorno.	
$[F^{ij}], [G^{ij}]$	Matrizes de coeficientes quando se faz colocação em um ponto do contorno i e integra-se o contorno j .	
I_{ij}	Integral singular genérica.	
J	Jacobiano da transformação.	
K	Número de pontos de integração utilizados por quadraturas.	

$K_{ij}(x, \xi)$	Núcleo singular genérico.	
$\mathbf{K}(\eta, p)$	Núcleo singular genérico no espaço normalizado.	
l	Dimensão lateral de uma placa quadrada.	[mm]
\mathcal{L}_{ij}	Matriz simétrica constante.	
M_i	Funções de forma do elemento de furo ou inclusão.	
n_i	Versor normal na direção i .	
p	Imagem do ponto fonte no espaço normalizado.	
[Q]	Matriz que modifica a matriz de funções de forma quadráticas.	
r	Distância do ponto fonte ao ponto campo.	
R	Raio do furo ou inclusão.	[mm]
S_{ijkl}	Tensor de complacência.	
S_{ijkl}^*	Tensor de complacência.	
S_{ij}	Matriz de complacência	
$S_{isoTranv}^{EPT}$	Matriz de complacência isotrópica transversal sob EPT.	
$S_{isoTranv}^{EPD}$	Matriz de complacência isotrópica transversal sob EPD.	
S_{iso}^{EPD}	Matriz de complacência isotrópica sob EPD.	
t_i^n	Vetor tração na direção i referido à normal n .	[MPa]
\bar{t}_i	Vetor tração prescrito no contorno Γ_t .	[MPa]
t_i	Versor tangencial.	
T_i^β	Tração do nó β na direção i .	[MPa]
u_i	Deslocamento na direção i .	[mm]
\bar{u}_i	Deslocamento prescrito na direção i no contorno Γ_u .	[mm]
u_i^\ominus	Deslocamento relativo na interface matriz - inclusão, na direção i .	[mm]
u_i^f	Deslocamento na direção i , no contorno do furo.	[mm]
U_i^β	Deslocamento do nó β na direção i .	[mm]
w_i	Peso utilizado na integração por quadratura para o ponto i .	
x_i	Sistema de coordenadas cartesiano global.	
x	Ponto campo.	
y_i	Vetor do ponto fonte ao ponto campo.	

z_i	Vetor posição do sistema de referência local \hat{x}_i com respeito ao sistema global x_i .
AG	Algoritmo Genético.
ADI	Ferro Fundido Nodular Ferrítico (Austempered Ductile Iron).
EVR	Elemento de Volume Representativo.
EPT	Estado Plano de Tensões.
EPD	Estado Plano de Deformações.
MEC	Método dos Elementos de Contorno.
MEF	Método dos Elementos Finitos.
MBD	Método de Busca Direta.
NE	Número de elementos no contorno exterior da matriz.
NNO	Número de nós no contorno exterior da matriz do material.
NNF	Número de nós no contorno dos furos.
NNP	Número de nós no contorno das partículas.

Caracteres gregos

Λ_{AG}	Vetor solução do algoritmo genético.	
Λ_{MBD}^i	Vetor inicial do método de busca direta.	
Λ_{MBD}^f	Vetor solução do método de busca direta.	
β	Parâmetro de carga constante.	
σ_i	Vetor de tensões.	[MPa]
σ_{ij}	Tensor de tensões. Tensão na direção j referido à normal i . Micro-campo de tensão.	[MPa]
$\tilde{\sigma}_{ij}$	Flutuação microscópica do campo de tensões.	[MPa]
σ_{ij}^M	Tensão de tensões macroscópico.	[MPa]
ε_{ij}	Tensor de deformações infinitesimais. Micro-campo de deformação.	
$\tilde{\varepsilon}_{ij}$	Flutuação microscópica do campo de deformações.	
ε_{ij}^M	Tensor de deformações infinitesimais macroscópico.	
ω_{ij}	Tensor de rotações infinitesimais.	
ω_E, ω_v	Fatores de peso utilizados na função objetivo.	
μ	Módulo de cisalhamento.	[GPa]

δ	Medida de erro.	
$\Delta_m(x, \xi)$	Função delta de Kronecker.	
γ_i	Vetor de deformações.	
ξ_o	Ponto fonte no domínio Ω .	
ξ	Ponto fonte no contorno Γ ou no domínio Ω .	
λ	Parâmetro constante utilizado no mapeamento do elemento de furo.	
Ω	Domínio do problema.	
Ω_m	Parcela do domínio da matriz do material.	
Ω_p	Parcela do domínio da partícula ou inclusão do material.	
$ \Omega $	Volume da amostra de material.	$[mm^3]$
Γ	Contorno do problema.	
Γ_o	Parcela do contorno exterior da matriz material.	
Γ_m	Contorno da matriz do material.	
Γ_p	Contorno das partículas ou inclusões.	
Γ_t	Parcela do contorno sobre a qual são prescritas as tensões.	
Γ_u	Parcela do contorno sobre a qual são prescritos os deslocamentos.	
Γ_1	Parcela do contorno exterior da matriz de material Γ_o sobre a qual são prescritos deslocamentos.	
Γ_2	Parcela do contorno exterior da matriz de material Γ_o sobre a qual são prescritas trações.	
ν	Coefficiente de Poisson.	
ν^*	Coefficiente de Poisson efetivo.	
$\bar{\nu}$	Coefficiente de Poisson utilizado nas soluções fundamentais para a hipótese de EPT.	
ϕ	Fração de volume.	
ϕ_i	Funções de forma do elemento quadrático.	
$\bar{\phi}_i$	Funções de forma modificadas do elemento quadrático.	
θ	Variável angular.	$[\text{rad}]$
η	Espaço normalizado.	
Π	Função objetivo.	

Símbolos e operadores matemáticos

$[\cdot]$	Vetor linha.
$\{\cdot\}$	Vetor coluna.
$(\cdot)^{-1}$	Matriz inversa.
\cdot^T	Matriz transposta.
$\hat{\cdot}$	Valor relativo ao sistema de coordenadas \hat{x}_i .
\cup	União de conjuntos.
\cap	Interseção de conjuntos.
δ_{ij}	Operador delta de Kronecker.
$\langle \cdot \rangle_{\Omega} \stackrel{def}{=} \frac{1}{ \Omega } \int_{\Omega} \cdot d\Omega$	Operador média espacial.
$\cdot_{,j} = \frac{\partial \cdot}{\partial x_j}$	Operador derivada com respeito à variável x_j .
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{b} = A_{ij} b_k$	Operador produto diádico entre um tensor e um vetor.
$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij}$	Operador produto aberto entre dois tensores (contração).

Sub-índices e super-índices

\cdot^*	Propriedade efetiva.
\cdot_D	Propriedade desejada.
i, j	Índices variam de 1 a 3.

INDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 – (a) malha de elementos finitos de uma micro-estrutura. (b) malha de elementos de contorno.....	2
Figura 1.2 – (a) Microestrutura discretizada com elementos quadráticos descontínuos utilizando o MEC convencional. (b) Microestrutura modelada com elementos de furo desenvolvidos neste trabalho.....	6
Figura 2.1 - Componentes do estado tensional em três planos ortogonais em um sistema de referência x_i	9
Figura 2.2 – (a) Ponto material P e a vizinhança material infinitesimal, é dizer, o macro-elemento. (b) Possível microestrutura de um EVR para a vizinhança do ponto material P.....	19
Figura 2.3 - Nomenclatura de domínios e contornos utilizados no teorema de deformação media.....	22
Figura 3.1 - Sistema de referência local e global.....	28
Figura 3.2 – Mapeamento do elemento quadrático descontínuo ao espaço normalizado η . Indicam-se os nós geométricos e nós físicos.....	33
Figura 3.3 - Funções de forma circulares dos furos e inclusões.	34
Figura 3.4 – Mapeamento do elemento de furo ao espaço normalizado η com $\lambda = 0$ e com $\lambda = \frac{1}{3}\pi$	46
Figura 3.5 - Comportamento de $F_{12}M_1J$ no espaço normalizado η quando a colocação é feita nas coordenadas $\widehat{\xi}_1 = R$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$	48
Figura 3.6 - Comportamento de $F_{21}M_1J$ no espaço normalizado η quando a colocação é feita nas coordenadas $\widehat{\xi}_1 = R$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$	48
Figura 3.7 - Integrando $F_{12}M_1J$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$	50
Figura 3.8 - Integrando $F_{22}M_1J$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$	51
Figura 3.9 - Integrando $F_{21}M_3J$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$	52
Figura 3.10 - Esquema do problema de uma placa quadrada com um furo centrado no meio. Carregamento uniforme na direção x_1 sobre a face AB e simplesmente apoiada nas faces CD e DA.....	53
Figura 3.11 - Configuração deformada da placa com furo de relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme na direção x_1 sobre o contorno AB. Elemento de furo (esquerda) e furo discretizado com 16 elementos quadráticos (direita).....	54
Figura 3.12 - Deslocamentos no contorno AB no caso de uma placa de relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. Resultados do MEC com o furo discretizado com 16 elementos e o elemento de furo.....	54

Figura 3.13 - Deslocamentos no contorno CB no caso de uma placa de relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. Resultados do MEC com o furo discretizado com 16 elementos e o elemento de furo.	55
Figura 3.14 - Deslocamentos no contorno do furo no caso de uma placa de relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. Resultados do MEC com o furo discretizado com 16 elementos e o elemento de furo.	55
Figura 3.15 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_1 da aresta AB em função da relação D/l	56
Figura 3.16 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_2 da aresta BC em função da relação D/l	56
Figura 3.17 - Configuração deformada da placa com furo com relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme na direção do eixo x_2 sobre o contorno BC e com condição de engaste no contorno DA (esquerda); e carregamento uniforme na direção do eixo x_1 sobre o contorno AB e condição de engaste no contorno CD.	57
Figura 3.18 – Convergência nos deslocamentos no contorno da placa com o número de pontos de Gauss utilizados para integrar o elemento do contorno da placa. O elemento de furo é integrado com 64 pontos de Gauss em todos os casos.	57
Figura 3.19 - Convergência nos deslocamentos no contorno da placa com o número de pontos de Gauss utilizados para integrar o elemento de furo. Os elementos do contorno da placa são integrados com 32 pontos de Gauss em todos os casos.	58
Figura 3.20 – Configuração deformada da placa com furo com relação $D/l=0,6$. O furo é discretizado com o MEC convencional com 16 elementos quadráticos descontínuos.	59
Figura 4.1 - Funções de forma circulares para interpolar geometria e deslocamentos no elemento de furo de quatro nós.	62
Figura 4.2 - Funções de forma circulares para interpolar geometria e deslocamentos no elemento de furo de cinco nós.	62
Figura 4.3 - Funções de forma circulares para interpolar geometria e deslocamentos no elemento de furo de seis nós.	62
Figura 4.4 – Configurações deformadas no exemplo da placa com relação $D/l=0,6$. (a) Com furo discretizado com 16 elementos quadráticos. (b) elemento de furo com 3 nós. (c) elemento de furo com 4 nós. (d) elemento de furo com 5 nós. (e) elemento de furo com 6 nós.	63
Figura 4.5 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_1 da aresta AB em função da relação D/l . δ é definido como o deslocamento máximo obtido com o elemento de furo sobre o deslocamento máximo com o furo discretizado com 16 elementos quadráticos.	64
Figura 4.6 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_2 da aresta BC em função da relação D/l . δ é definido como o deslocamento mínimo obtido com o elemento de furo sobre o deslocamento mínimo com o furo discretizado com 16 elementos quadráticos.	65
Figura 4.7 - Esquema do problema de uma placa quadrada com dois furos centrados no meio. Carregamento uniforme na direção x_1 sobre a face AB e simplesmente apoiada nas faces CD e DA.	65
Figura 4.8 - Esquema dos parâmetros definidos para a interação entre dois furos.	66

Figura 4.9 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,25$.	66
Figura 4.10 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,285$.	67
Figura 4.11 - Deslocamentos no contorno do furo da direita no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,285$.	67
Figura 4.12 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,375$.	68
Figura 4.13 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,44$.	68
Figura 4.14 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com compressão uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,44$.	69
Figura 4.15 - Modelo de material micro-poroso indicando o sistema de referencia. O desenho corresponde a 140 micro-poros com uma fração de volume de 7,7% e uma relação media entre o raio do poro e o comprimento entre centros de poros mais próximos de 0,25.	70
Figura 4.16 – Distribuição das trações na direção x_1 no contorno de uma microestrutura com 12 furos e fração de volume de 7,7%.	71
Figura 4.17 - Distribuição das trações na direção x_2 no contorno de uma microestrutura com 12 furos e fração de volume de 7,7%.	71
Figura 4.18 – Configuração deformada de uma microestrutura com 12 furos e fração de volume de 7,7%. Condição de contorno de deslocamento linear.	72
Figura 4.19 - Micrografia de ADI. 150 nódulos/mm ²	77
Figura 4.20 - Esquema de diversos tamanhos de amostras da microestrutura.	78
Figura 4.21 - Modulo de Young efetivo do material [GPa] para 50 microestructuras com 25 nódulos distribuídas em forma aleatória em cada caso. Indicam-se os valores máximos, mínimos, médio e desvio padrão.	79
Figura 4.22 - Histograma do modulo de Young efetivo [GPa] para 50 microestructuras com 25 nódulos distribuídas em forma aleatória em cada caso.	79
Figura 4.23 - Curva de convergência do EVR. Valores do modulo de Young efetivo para amostras com distintas distribuições aleatórias dos nódulos e contendo um número de nódulos que vá aumentando.	80
Figura 4.24 - Coeficiente de Poisson efetivo do material resultante para 50 microestructuras com 25 nódulos distribuídos em forma aleatória em cada caso. Indicam-se os valores máximos, mínimos, médios e desvio padrão.	81
Figura 4.25 - Histograma do coeficiente de Poisson para 50 microestructuras com 25 nódulos distribuídos em forma aleatória em cada caso.	81
Figura 4.26 - Curva de convergência de EVR para valores do coeficiente de Poisson efetivo para amostras com distintas distribuições aleatórias dos nódulos e contendo um número de nódulos que vá aumentando.	82
Figura 5.1 - Esquema da função fobjetivo.m	88

Figura 5.2 - Convergência do AG. Os triângulos correspondem aos valores médios da função objetivo e os círculos ao melhor valor em cada geração.	90
Figura 5.3 – Valor da FO de cada um dos indivíduos na última geração.	90
Figura 5.4 - Convergência do MBD.....	91
Figura 5.5 - Diagrama do esquema de herança da FO.	93
Figura 5.6 - Diagrama de variáveis da função ga.m.....	93
Figura 5.7 - Esquema da função stepGA.m modificada.....	94
Figura 5.8 - Convergência do AG convencional e dos AG com as configurações aproximadas.....	95

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Relação entre as componentes do tensor de elasticidade e a matriz de constantes elásticas.	11
Tabela 3.1 - Resultados das integrais singulares do elemento de furo com o método de integração direta. A variável K refere-se ao número de pontos de Gauss – Legendre.	49
Tabela 3.2 - Resultados das integrais $\int_{-1}^{+1} F_{12} M_1 J d\eta$ para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha M corresponde à integração obtida com o programa Maple.	50
Tabela 3.3 - Resultados das integrais $\int_{-1}^{+1} F_{22} M_1 J d\eta$ para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha M corresponde à integração obtida com o programa Maple.	51
Tabela 3.4 - Resultados das integrais $\int_{-1}^{+1} F_{21} M_3 J d\eta$ para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha M corresponde à integração obtida com o programa Maple.	52
Tabela 4.1 - Resultados da análise estatística em micrografias de ADI do trabalho de Ortiz et al., 2001.	77
Tabela 4.2 - Resultados da avaliação computacional de microestruturas com diferentes distribuições aleatórias de micro-furos para o módulo de Young.	80
Tabela 4.3 - Resultados da avaliação computacional de microestruturas com diferentes distribuições aleatórias de nódulos para o coeficiente de Poisson.	82
Tabela 5.1 - Parâmetros de entrada para o AG.	90
Tabela 5.2 – Resultados dos AG convencionais e AG com as duas configurações aproximadas que são consideradas.	95

1. INTRODUÇÃO

1.1. Introdução

Os materiais industriais, assim como tudo na natureza, são heterogêneos quando observados de uma certa escala. A determinação de características macroscópicas de materiais heterogêneos é um problema essencial em muitas aplicações de engenharia e ciência. Estudar a relação entre fenômenos micro-estruturais e o comportamento macroscópico não só permite prever o comportamento de materiais que já existem, mas também fornece uma ferramenta para o projeto de micro-estruturas de materiais tal que o comportamento macroscópico resultante se ajuste com características desejadas. A simulação numérica direta de estruturas compostas por materiais micro-heterogêneos incorporando todos os detalhes da micro-estrutura resulta em um custo computacional muito por acima do disponível atualmente. Por esse motivo, são utilizados modelos de materiais homogeneizados ou regularizados onde o material é tratado como se fosse homogêneo na macro-escala com propriedades efetivas advindas do comportamento nas escalas inferiores. Existem muitas formas de se obter propriedades efetivas como, por exemplo, a Teoria Matemática de homogeneização, a qual é aplicada principalmente a materiais com estrutura interna periódica [Sanchez-Palencia E., 1981; Bakhvalov N. & Panasenko G., 1984], ou os métodos analíticos e semi-analíticos como bandas de Hashin-Shtrikman, o Método auto-consistente, ou o Método de Mori-Tanaka [Nemat-Nasser S. & Hori M., 1999]. Neste trabalho é utilizado um esquema de aproximação computacional juntamente com a Teoria de Campos Médios, também chamada de Teoria de Propriedades Efetivas ou Método de Análise EVR [Zohdi T. I., 2002, Hori M. & Nemat-Nasser S., 1999]. A idéia do método se baseia no fato das propriedades efetivas medidas em experimentos serem relações entre médias (no volume de amostra de material micro-estrutural) dos campos internos das variáveis envolvidas [Hori M. & Nemat-Nasser S., 1999]. Esta relação deve ser calculada sobre uma amostra representativa de material que incorpore uma quantidade suficiente de micro-heterogeneidades. Esta amostra é referida na literatura como *Elemento de Volume Representativo* (EVR). A propriedade efetiva é determinada sobre a base de uma análise estatística sobre uma série de EVRs submetidos à uma carga de prova. Para se calcular os campos internos das distintas variáveis é preciso resolver um problema de valores de contorno para a microestrutura. O caso de interesse de este trabalho é o das propriedades efetivas mecânicas elásticas lineares. Por isso, o problema de valores de contorno a ser resolvido é o *problema elástico* da Mecânica dos Sólidos.

Atualmente, na engenharia é comum o uso de métodos numéricos para a solução de equações diferenciais como o *Método dos Elementos Finitos* (MEF), o *Método dos Elementos de Contorno* (MEC) e o *Método das Diferenças Finitas*. A combinação de micro-mecânica e tais métodos numéricos fornece uma ferramenta poderosa para a modelagem do comportamento de materiais. Neste trabalho é utilizado o MEC para se resolver o problema elástico na micro-estrutura. A principal característica do MEC reside na redução, em se tratando de problemas lineares, de uma dimensão do problema, o que diminui drasticamente a quantidade de dados necessários para solução computacional do mesmo. Assim a discretização de microestruturas contendo heterogeneidades resulta simples e computacionalmente eficiente para ser modelada numericamente e implementada em um módulo de otimização. Em contrapartida, do MEC resultam geralmente matrizes cheias e não-simétricas, impedindo ou dificultando o uso de estratégias de solução desenvolvidas para o MEF. É importante destacar também que em problemas de mecânica dos sólidos em regime linear, o MEC permite obter uma muito alta resolução dos campos de tensões e deslocamentos quando comparado com o MEF. Adicionalmente, por um procedimento simples, as médias no volume das variáveis envolvidas podem ser levadas ao contorno, precisando unicamente dos dados sobre o contorno da matriz do material. Essa característica do Método de Campos Médios faz do MEC um procedimento mais que conveniente para este tipo de problemas. A Figura 1.1 mostra uma micro-estrutura discretizada com elementos finitos e uma com elementos de contorno onde se visualiza claramente a diminuição de variáveis nodais a ser processadas no MEC com respeito ao MEF.

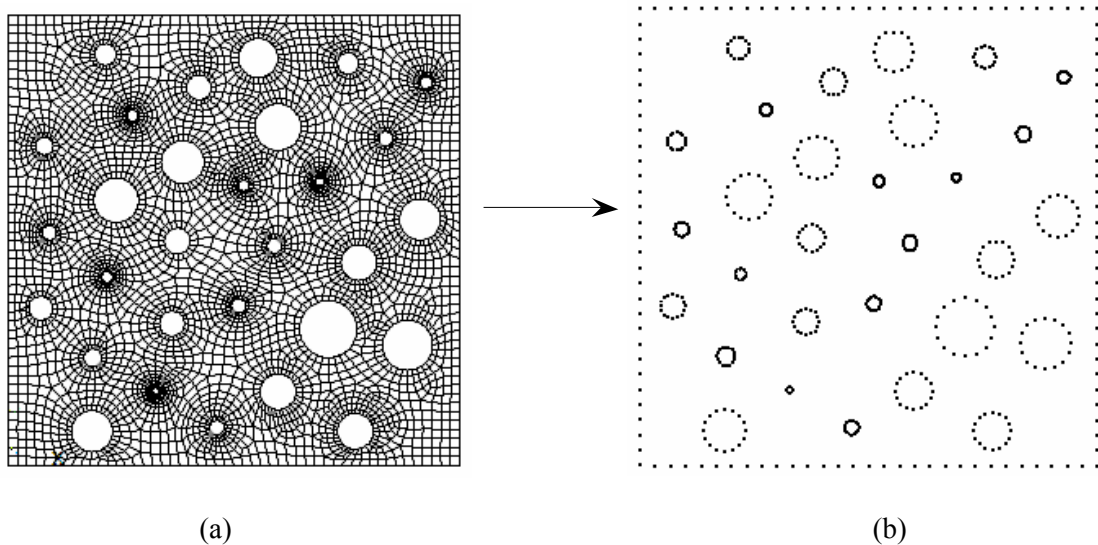


Figura 1.1 – (a) malha de elementos finitos de uma micro-estrutura. (b) malha de elementos de contorno.

O desenvolvimento de novos materiais de alto desempenho (resistência à vida a fadiga, alta tenacidade, resistência ao desgaste, etc.) é um fator muito importante no progresso industrial. Um grande número de produtos de uso cotidiano e alto impacto social, que vão desde a indústria de embalagens até a automotiva, passando pela alimentícia, cosmética, agro-têxtil, construção, tubulações, eletrodomésticos, indumentária de segurança, próteses e dispositivos biomédicos, fármacos, etc. aproveitam os mais recentes avanços da engenharia e da ciência dos materiais. Desta forma, a otimização das propriedades dos materiais se converte em tarefa prioritária e estratégica que justifica o desenvolvimento de técnicas numéricas eficientes de modelagem de materiais. A chave do êxito de muitos materiais modernos está no comportamento “sob medida” para sua aplicação. Isto se consegue, fundamentalmente, a partir da manipulação de sua micro-estrutura. A filosofia básica na construção de tais materiais é selecionar combinações de materiais das fases para produzir as propriedades macroscópicas ou efetivas desejadas. No intento de reduzir o custo com procedimentos experimentais, já é possível se fazer predições do comportamento de novos materiais usando simulações numéricas, acelerando o desenvolvimento de materiais. Na região Sul-americana, os alcances e potencialidades destas tecnologias foram recentemente apresentados e discutidos durante o US-South America Workshop on Mechanics and Advanced Materials Research and Education realizado no Rio de Janeiro em Agosto de 2004. Neste encontro ficou demonstrado o incipiente desenvolvimento destas tecnologias na região sul-americana e a necessidade de impulsionar seu avanço e inserção no meio científico e produtivo. Dentro desse contexto, neste trabalho é estudado um algoritmo não determinístico para o projeto de materiais que é utilizado junto com a ferramenta numérica desenvolvida para a modelagem do material. Esse algoritmo é implementado para o projeto de materiais microporosos com comportamento linear, mas pode ser facilmente estendido a materiais compostos multi-fase em três dimensões com topologias complexas das inhomogeneidades e leis de comportamento não-linear.

1.2. Revisão bibliográfica

A análise de materiais, mesmo os linearmente elásticos com deformações infinitesimais, é ainda um problema aberto [Zohdi T. I., 2002]. O aumento da capacidade de processamento dos computadores nos últimos anos já possibilita que modernos métodos numéricos possam ter um papel mais significativo na análise e modelagem de estruturas heterogêneas, incluindo o regime não-linear.

A utilização de métodos numéricos para o estudo de fenômenos micro-estruturais vem sendo desenvolvida durante as últimas três décadas resultando no estabelecimento de um novo campo de estudo denominado *Computational Material Science*. O MEC já demonstrou ser mais preciso e eficiente em termos de custo computacional que outros métodos, para muitos problemas lineares de Mecânica dos Sólidos. Em particular, em problemas de micro-mecânica, o MEC pode fazer previsões mais eficientes [Q-S. Yang & Qin Q-H., 2004] devido ao esquema de média no volume dos campos internos das variáveis requerer informações unicamente do contorno da microestrutura. No trabalho de Q-S. Yang & Qin Q-H., 2004 exemplos numéricos mostram que para se obter propriedades efetivas de materiais compostos com inclusões rígidas circulares os resultados do MEC concordam com aqueles obtidos com o MEF, embora o primeiro exija uma quantidade de graus de liberdade drasticamente inferior. No trabalho de Yao et al., 2004 Também é mostrado que o MEC é mais adequado que o MEF em simulações em duas dimensões de compostos com inclusões. Nos últimos anos o MEC vem sendo utilizado cada vez mais para a modelagem de micro-mecânica de materiais compostos. No trabalho de Hu N. et al., 2000 o MEC é escolhido para realizar simulações numéricas e estudar a precisão e confiabilidade de métodos teóricos utilizados para prever propriedades mecânicas de lâminas contendo furos circulares. Nesse trabalho é analisada também a interação entre furos de lâminas com distribuição normal de furos. Um novo MEC para resolver problemas de corpos planos elásticos que envolvem furos e trincas é apresentado por Wang Y. B. & Chau K.T., 2001. Essa formulação de elementos de contorno expressa a variável como uma função complexa. Em Dong C. Y. et al., 2002 e Dong C. Y. et al., 2003 é tratado o problema da inclusão de formas arbitrárias em domínios finitos ou infinitos de materiais anisotrópicos. No trabalho de Knight et al., 2003 o MEC é implementado junto com a técnica *Embedded cell* para caracterizar materiais compostos a nível micro-mecânico. Nesse trabalho, é analisado o efeito das propriedades dos micro-constituintes e a distribuição espacial das inclusões sobre as tensões dentro do material compósito. Para a análise de tensões em materiais elásticos infinitos contendo inclusões, Dong & Lee, 2004 utilizam um MEC sem malha (*Boundary Point Method*) método de ponto de contorno. Em Mackerle, 2002 são apresentadas referências a artigos, conferências, teses e dissertações que utilizam MEF e MEC para a análise de compostos de matriz metálica publicados no período de 1997-2000.

Um esquema alternativo ao apresentado nesta dissertação é o sugerido no trabalho de Mogilevskaya S. G. & Crouch S.L., 2001 para inclusões, Wang J. et al., 2003a para furos e Wang J., 2001; Wang J., et al., 2003b para trincas. A formulação é baseada na solução numérica de uma equação integral de contorno complexa na qual os parâmetros do contorno são expressos em função de séries de Fourier no caso de inomogeneidades circulares, e em polinômios de Chebyshev no caso de trincas. A quantidade de termos na série de Fourier é determinada com um algoritmo iterativo com base em uma estimativa de erro. Todas as integrais envolvidas são integradas analiticamente. Esse esquema é estendido em Wang J., 2005a para incorporar um algoritmo de solução de problemas em grande escala chamado *fast multipole*. Nos últimos anos, esse grupo de pesquisa da *University of Minnesota* tem investido esforços na modelagem de interfaces utilizando essa formulação [Mogilevskaya S. G. & Crouch S.L., 2002; Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L., 2004; Wang J. et al., 2005b]. Atualmente estão trabalhando em estender esses trabalhos a três dimensões, incorporar teorias do contínuo de segunda ordem para considerar efeito de escala e grandes gradientes de deformação, termo-elasticidade transiente, visco-elasticidade e modelar *functional graded materials* [Crouch S.L., 2004].

A utilização de Algoritmos Genéticos (AG) no de projeto de materiais micro-heterogêneos é proposta no trabalho de Zohdi, 2003. Nesse trabalho é aplicado um AG conjuntamente com uma versão p do MEF.

1.3. Objetivos do trabalho

O objetivo geral do presente trabalho é a modelagem e projeto em duas dimensões de materiais micro-porosos com distribuição aleatória pelo MEC. Visando uma formulação de elementos de contorno mais eficiente que no método convencional, a formulação de Henry & Banerjee, 1991 e Banerjee & Henry, 1992 para modelar sólidos tridimensionais com furos ou inclusões cilíndricos pode ser particularizada para duas dimensões e apresentada em uma forma mais geral. Com esta formulação é possível modelar o contorno da inomogeneidade simplesmente com um único elemento chamado *elemento de furo* ou *elemento de inclusão*. A Figura 1.2 mostra uma micro-estrutura discretizada com elementos de contorno convencionais e com o elemento proposto.

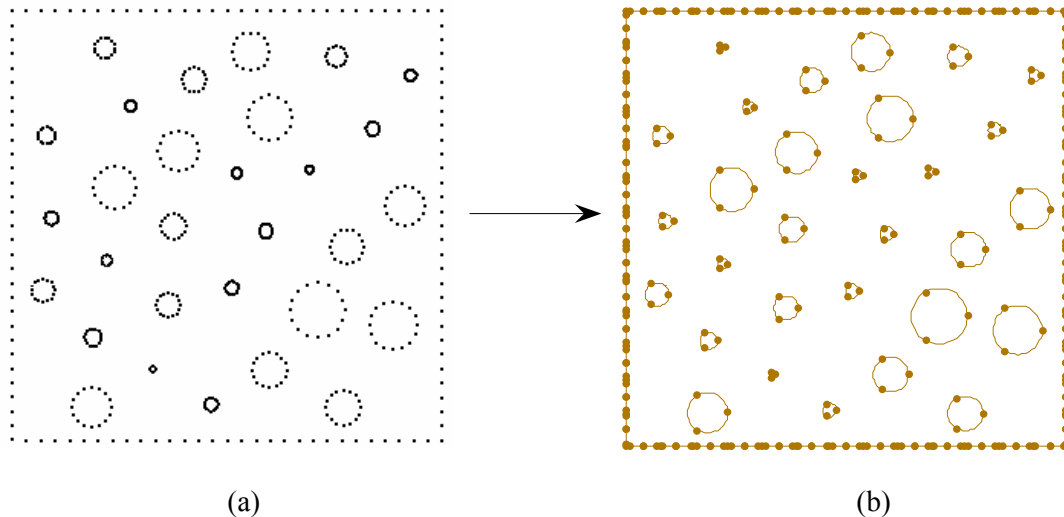


Figura 1.2 – (a) Microestrutura discretizada com elementos quadráticos descontínuos utilizando o MEC convencional. (b) Microestrutura modelada com elementos de furo desenvolvidos neste trabalho.

Os objetivos principais do presente trabalho ficam então assim definidos:

- Desenvolver uma formulação de elementos de contorno, que dispense a discretização da inhomogeneidade da forma convencional, para a modelagem de microestruturas multi-fase em duas dimensões contendo furos e inclusões cilíndricas de raio arbitrário.
- Propor e implementar um esquema de integração dos núcleos fortemente singulares resultantes da formulação do *elemento de furo*.
- Propor funções de forma de base trigonométrica para modelar os micro-campos no contorno das inhomogeneidades cilíndricas com maior precisão que com o elemento de três nós proposto por Henry & Banerjee, 1991.
- Implementar *elementos de furo de ordem superior* com graus de liberdade adicionais, utilizando essas funções propostas.
- Implementar a ferramenta numérica desenvolvida, na modelagem de materiais microporosos de distribuição aleatória para se obter propriedades mecânicas elásticas efetivas. Isso inclui a análise estatística da resposta efetiva e obtenção das expressões para o módulo de Young e o coeficiente de Poisson efetivos para as hipóteses de Estado Plano de Tensões (EPT) e Estado Plano de Deformações (EPD).
- Desenvolver e implementar um algoritmo para o projeto de materiais microheterogêneos combinando Algoritmos Genéticos (AG), o Método de Busca Direta (MBD) e o MEC.
- Propor e implementar um esquema de aproximação da função objetivo no AG visando acelerar o algoritmo.

1.4. Descrição do trabalho

Este trabalho está estruturado em 6 capítulos, o primeiro dos quais é a presente introdução. O Capítulo 2 consiste em uma revisão dos conceitos básicos mais importantes da Teoria da Elasticidade que serão utilizados durante o restante do trabalho. Também são apresentados conceitos básicos de micro-mecânica e da Teoria de Campos Médios para se obter propriedades mecânicas elásticas efetivas em materiais micro-heterogêneos a partir das propriedades e topologia dos micro-constituintes. A modelagem numérica da micro-estrutura do material é apresentada no Capítulo 3, onde uma formulação eficiente do MEC para a modelagem de furos e inclusões em uma matriz homogênea e isotrópica é desenvolvida. Especial atenção é dada à integração de núcleos fortemente singulares do elemento de furo proposto. Alguns resultados relativos à modelagem de furos são preliminarmente apresentados. No Capítulo 4 são propostos elementos de ordem superior, e seu desempenho é analisado. Logo após é estudada a interação entre furos com estes novos elementos. São desenvolvidas as expressões para obtenção de propriedades efetivas de materiais micro-porosos em duas dimensões com os modelos de EPT e de EPD. Como exemplo de aplicação da ferramenta numérica desenvolvida é realizada a análise EVR linear para um material em EPT com propriedades e distribuição de furos tomados da microestrutura de um ferro fundido nodular ferrítico. No Capítulo 5 é desenvolvido um algoritmo geral para o projeto de materiais, que combina algoritmos não-determinísticos com a formulação do MEC. Nesse capítulo é proposto e implementado um modelo aproximado de avaliação da função objetivo no AG. Como exemplo de aplicação é resolvido o problema inverso ao apresentado no Capítulo 4. Finalmente, o Capítulo 6 expõe as principais conclusões e sugere alguns tópicos e recomendações para a continuação do presente trabalho.

2. REVISÃO DAS EQUAÇÕES DE ELASTICIDADE E MICRO-MECÂNICA

2.1. Introdução

A teoria da elasticidade se enquadra na mecânica dos meios contínuos na qual a configuração de um sólido é descrita com um modelo matemático que associa a cada partícula material do sólido um ponto geométrico definido por suas coordenadas. Assim, o material consiste de pontos materiais e vizinhanças materiais. Ao mesmo tempo, a mecânica do contínuo assume que a distribuição de material, tensões e deformações dentro de uma vizinhança material infinitesimal de uma partícula típica (macro-elemento) pode ser considerada uniforme. Em micro-escalas, no entanto, a vizinhança material infinitesimal, em geral não é uniforme, consistindo de diversas micro-heterogeneidades. Portanto, os campos de tensões e deformações dentro do macro-elemento não são uniformes no nível da micro-escala. O principal objetivo da micro-mecânica é expressar de forma sistemática e rigorosa as *quantidades contínuas* associadas com uma vizinhança material infinitesimal em termos dos parâmetros que caracterizam a microestrutura e propriedades dos micro-constituintes da vizinhança do material. Neste Capítulo é apresentada uma revisão de conceitos básicos da Teoria da Elasticidade e alguns tópicos de micro-mecânica que serão utilizados no restante do trabalho. Nessa revisão, especial importância é dada à elasticidade anisotrópica em duas dimensões e teoremas da Teoria de Campos Médios utilizados para encontrar propriedades efetivas de materiais micro-heterogêneos.

2.2. Lema de Cauchy

Dos infinitos vetores tração associados aos infinitos planos que passam por um ponto de um corpo deformável, três deles que atuam em três planos perpendiculares é suficiente para definir univocamente o vetor tração associado a qualquer plano arbitrário que passe pelo ponto. Este lema tem a seguinte expressão matemática [Paris, 1998]:

$$t_i = \sigma_{ij} n_j \quad (2.1)$$

ou explicitamente:

$$\begin{Bmatrix} t_1^n \\ t_2^n \\ t_3^n \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{21} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{31} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{Bmatrix} \quad (2.2)$$

onde os três vetores associados aos os três planos perpendiculares (correspondentes aos eixos cartesianos x_i , ver Figura 2.1), são:

$$t^1 = \begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \end{Bmatrix}, \quad t^2 = \begin{Bmatrix} \sigma_{21} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{23} \end{Bmatrix}, \quad t^3 = \begin{Bmatrix} \sigma_{31} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{33} \end{Bmatrix} \quad (2.3)$$

Assim fica definido o tensor de tensões σ_{ij} o qual determina o estado tensional do ponto completamente.

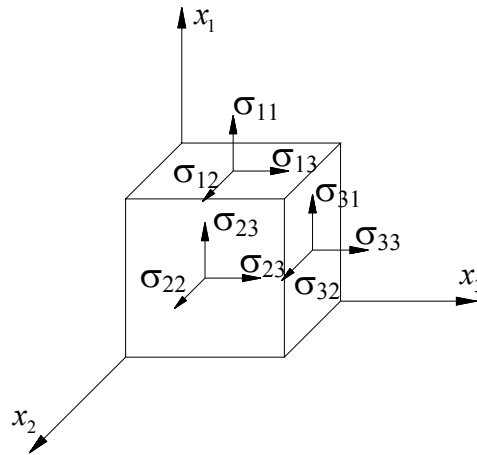


Figura 2.1 - Componentes do estado tensional em três planos ortogonais em um sistema de referência x_i .

2.3. Equilíbrio

Considera-se um elemento infinitesimal no corpo sólido Ω , a condição de equilíbrio de forças leva à denominada equação de equilíbrio [Paris, 1998]:

$$\sigma_{ij,j} + b_i = 0 \quad (2.4)$$

onde b_i são as forças de corpo. A condição de equilíbrio de momentos leva à simetria do tensor de tensões:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (2.5)$$

2.4. Relação deformação-deslocamento

Neste trabalho é considerada a hipótese de deformações infinitesimais de Cauchy. Portanto as relações deformação-deslocamento são [Malvern, 1969]:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (2.6)$$

onde ε_{ij} é um tensor de segunda ordem, simétrico denominado tensor de deformações infinitesimais. O tensor de segunda ordem anti-simétrico chamado tensor de rotação infinitesimal ω_{ij} é definido como:

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} - u_{j,i}) \quad (2.7)$$

O campo de deslocamentos pode ser expresso em função do tensor de pequenas deformações ε_{ij} e tensor de rotação infinitesimal ω_{ij} com a equação:

$$u_{i,j} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij} \quad (2.8)$$

2.5. Lei constitutiva

A lei de comportamento linear ou equação constitutiva linear de um material elástico é escrita em notação indicial como [Paris, 1998]:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2.9)$$

onde C_{ijkl} são as componentes do *tensor de constitutivo* de quarta ordem que relaciona o tensor de tensões com o tensor de deformações. O tensor de elasticidade satisfaz três simetrias:

$$C_{ijkl} = C_{jikl}, \quad C_{ijkl} = C_{ijlk}, \quad C_{ijkl} = C_{klij} \quad (2.10)$$

dadas pela simetria do tensor de tensões ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$), da simetria do tensor de deformações ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$) e do requerimento termodinâmico que trabalho nenhum deve ser feito por um material elástico em um ciclo de carga fechado, respectivamente. Levando-se em conta (2.10) o comportamento anisotrópico elástico linear mais geral fica caracterizado por 21 constantes elásticas independentes. Estas constantes são dependentes da estrutura interna do material.

A inversa das relações tensão-deformação (2.9) são as relações deformação-tensão:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (2.11)$$

onde S_{ijkl} é denominado *tensor de complacência* de quarta ordem o qual está relacionado com o tensor de elasticidade pela expressão:

$$S_{ijkl} C_{kmrs} = \frac{1}{2}(\delta_{ir} \delta_{js} + \delta_{is} \delta_{jr}) \quad (2.12)$$

onde δ_{ij} é o operador delta de Kronecker.

Na notação de Voigt (também chamada de Nye ou Voigt-Mandel) a relação (2.9) pode ser escrita como uma transformação linear em seis dimensões $\{\boldsymbol{\sigma}\} = [\mathbf{c}]\{\boldsymbol{\gamma}\}$ ou explicitamente:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.13)$$

onde ficam definidos os vetores de tensões σ_i e deformações γ_i e a matriz de constantes elásticas $c_{\alpha\beta}$. As relações entre as componentes do tensor de elasticidade C_{ijkl} e a matriz simétrica $c_{\alpha\beta}$ estão dadas na Tabela 2.1. Esta mudança de notação incorpora as duas primeiras simetrias de (2.10) e a terceira se manifesta na simetria da matriz de constantes elásticas. Salienta-se que na representação matricial de Voigt se perde o caráter tensorial da lei constitutiva [Cowin & Mehrabadi, 1992].

C_{ijkl}		km					
		11	22	33	23	13	12
ij	11	c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{14}	c_{15}	c_{16}
	22	c_{21}	c_{22}	c_{23}	c_{24}	c_{25}	c_{26}
	33	c_{31}	c_{32}	c_{33}	c_{34}	c_{35}	c_{36}
	23	c_{41}	c_{42}	c_{43}	c_{44}	c_{45}	c_{46}
	13	c_{51}	c_{52}	c_{53}	c_{54}	c_{55}	c_{56}
	12	c_{61}	c_{62}	c_{63}	c_{64}	c_{65}	c_{66}

Tabela 2.1 – Relação entre as componentes do tensor de elasticidade e a matriz de constantes elásticas.

Deve-se de notar que as relações na Tabela 2.1 não são as mesmas para o tensor de complacência e a sua redução à forma matricial devido ao fator 2 no vetor de deformações.

Agora em notação matricial a relação (2.12) é escrita como:

$$[\mathbf{s}][\mathbf{c}] = [\mathbf{c}][\mathbf{s}] = [\mathbf{I}] \quad (2.14)$$

ou

$$s_{ik}c_{kj} = c_{ik}s_{kj} = \delta_{ij} \quad (2.15)$$

que definem a *matriz de complacência* \mathbf{s} .

2.6. Elasticidade plana

A teoria da elasticidade em duas dimensões pode ser empregada para reduzir a complexidade de vários problemas em engenharia e permite testar formulações antes de estendê-las a três dimensões. Uma lei constitutiva em duas dimensões não é baseada somente no comportamento

do material, mas também do modelo físico, exemplificado pela diferença entre os modelos de *Estado Plano de Tensões* (EPT) e o *Estado Plano de Deformações* (EPD). O modelo de EPT implica que $\sigma_{3i} = 0$ e o de EPD que $\varepsilon_{3i} = 0$, quando o problema é reduzido ao plano x_1, x_2 .

Como o EPD ou o EPT correspondem a estados de deformação ou tensão especiais, as relações constitutivas (2.13) não mudam. Então, em notação matricial de Voigt para deformação plana tem-se [Nemat-Nasser & Hori, 1999]:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.16)$$

Note-se que as constantes elásticas c_{33} , c_{34} , c_{34} , c_{44} , c_{45} e c_{55} não participam do modelo de EPD, o que se faz evidente quando a lei constitutiva é decomposta para tensões *no plano* $[\sigma_{11} \ \sigma_{22} \ \sigma_{12}]$, e tensões *fora do plano* $[\sigma_{33} \ \sigma_{23} \ \sigma_{13}]$, neste caso tem-se, respectivamente [Nemat-Nasser & Hori, 1999]:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{26} \\ c_{16} & c_{26} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.17)$$

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{13} & c_{23} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{56} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.18)$$

Já para o EPT a lei constitutiva em três dimensões pode ser escrita como:

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{12} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{13} & s_{23} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{14} & s_{24} & s_{34} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{15} & s_{25} & s_{35} & s_{45} & s_{55} & s_{56} \\ s_{16} & s_{26} & s_{36} & s_{46} & s_{56} & s_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.19)$$

e descompondo em tensões *no plano* e tensões *fora do plano*, respectivamente [Nemat-Nasser & Hori, 1999]:

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{16} \\ s_{12} & s_{22} & s_{26} \\ s_{16} & s_{26} & s_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.20)$$

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{13} & s_{23} & s_{36} \\ s_{14} & s_{24} & s_{46} \\ s_{15} & s_{25} & s_{56} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.21)$$

As matrizes constitutivas em (2.17), (2.18), (2.20) e (2.21) devem ser positivas definidas e são válidas para qualquer simetria do material. Isto é, para se obter as expressões para EPT ou EPD de qualquer dos 8 tipos de simetria [Ting, 2003] é suficiente particularizar as mesmas com os c_{ij} ou s_{ij} correspondentes para três dimensões. Assim, a matriz de constantes elásticas para o EPD em um material com isotropia transversal em função do módulo de Young E e o coeficiente de Poisson ν é:

$$\mathbf{C}_{isoTranv}^{EPD} = \frac{E^2 E_3}{(1+\nu)\{(1-\nu)E_3 - 2\nu_3^2 E\}} \begin{bmatrix} \frac{1}{E} - \frac{\nu_3^2}{E_3} & \frac{\nu}{E} + \frac{\nu_3^2}{E_3} & 0 \\ \frac{\nu}{E} + \frac{\nu_3^2}{E_3} & \frac{1}{E} - \frac{\nu_3^2}{E_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\{(1-\nu)E_3 - 2\nu_3^2 E\}}{2EE_3} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

e a correspondente matriz de complacência:

$$\mathbf{S}_{isoTranv}^{EPD} = (\mathbf{C}_{isoTranv}^{EPD})^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} - \frac{\nu_3^2}{E_3} & -\frac{\nu}{E} - \frac{\nu_3^2}{E_3} & 0 \\ -\frac{\nu}{E} - \frac{\nu_3^2}{E_3} & \frac{1}{E} - \frac{\nu_3^2}{E_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

onde a ausência de sub-índices implica propriedades *no plano*, o E_3 é o modulo de Young na direção 3 e ν_3 é a deformação normal em qualquer direção no plano devida a uma tensão na direção x_3 . Para um material isotrópico transversal em EPT tem-se:

$$\mathbf{S}_{isoTranv}^{EPT} = \frac{1}{E} \begin{bmatrix} 1 & -\nu & 0 \\ -\nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1+\nu) \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

com a correspondente matriz de constantes elásticas:

$$\mathbf{C}_{isoTranv}^{EPT} = \left(\mathbf{S}_{isoTranv}^{EPT} \right)^{-1} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-\nu)}{2} \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Note-se que as matrizes (2.24) e (2.25) para EPT de um material com isotropia transversal são iguais às de isotropia, enquanto que para EPD as matrizes (2.22) e (2.23) para um material isotrópico transversal dependem das propriedades fora do plano. As matrizes \mathbf{C}_{iso}^{EPD} e \mathbf{S}_{iso}^{EPD} para um material isotrópico podem ser obtidas fazendo-se $E = E_3$ e $\nu = \nu_3$:

$$\mathbf{C}_{iso}^{EPD} = \frac{E}{(1-2\nu)(1+\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

$$\mathbf{S}_{iso}^{EPD} = \begin{bmatrix} \frac{1-\nu^2}{E} & -\frac{\nu(1+\nu)}{E} & 0 \\ -\frac{\nu(1+\nu)}{E} & \frac{1-\nu^2}{E} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

Os materiais elásticos devem satisfazer as condições de estabilidade de Drucker [Malvern, 1969]. Estas condições garantem que o tensor de elasticidade seja positivo definido, isto é, os autovalores devem ser positivos. Assim, define-se uma lei constitutiva geral para todos os modelos em duas dimensões como:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} \\ E_{12} & E_{22} & E_{23} \\ E_{16} & E_{23} & E_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \end{Bmatrix} \quad (2.28)$$

as seguintes relações expressam as condições de estabilidade para qualquer simetria [Pedersen, 1994]:

$$\begin{aligned} E_{11} &\geq 0; & E_{22} &\geq 0; & E_{33} &\geq 0 \\ E_{11}E_{22} - (E_{12})^2 &\geq 0 \\ E_{22}E_{33} - (E_{23})^2 &\geq 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$E_{11}E_{33} - (E_{13})^2 \geq 0$$

$$\det \mathbf{E} \geq 0$$

2.7. O problema de valores de contorno no EVR

Na Teoria de Campos Médios é preciso resolver um problema de valores de contorno do EVR. No caso de propriedades efetivas mecânicas elásticas trata-se do problema elástico correspondente.

A resolução do problema elástico consiste em conhecer os campos de deslocamentos, tensões e deformações em um corpo sólido submetido à ação de cargas exteriores com forças de corpo b_i , trações \bar{t}_i no contorno Γ_t e deslocamentos \bar{u}_i no contorno Γ_u . O problema elástico fica constituído então por um sistema de 15 equações diferenciais em derivadas parciais (as três equações de equilíbrio (2.4), as seis relações deformação-deslocamento (2.6) e as seis equações constitutivas (2.13)) com 15 incógnitas (as seis componentes de tensões, as seis componentes de deformações e os três deslocamentos). A manipulação das equações (2.4), (2.6) e (2.9) permite uma formulação mais simples do problema. Assim, as equações de equilíbrio em termos do campo de deslocamentos, conhecidas como equações de Navier, são:

$$C_{ijkl}u_{k,jl} + b_i = 0 \quad (2.30)$$

A equação (2.30) representa um sistema de equações diferenciais acopladas com três incógnitas: o campo de deslocamentos. E representam a condição necessária e suficiente a ser satisfeita pelo campo de deslocamentos para ser uma solução válida do problema elástico, levando-se em conta que o mesmo deve satisfazer as condições de contorno.

2.8. Soluções fundamentais da elasticidade

As soluções fundamentais utilizadas na equação integral de contorno para elastoestática são tensores que descrevem deslocamentos e trações generalizadas que correspondem à um problema fundamental. Comumente o problema fundamental corresponde a um domínio infinito submetido a uma excitação unitária concentrada paralela às direções coordenadas, mas podem ser considerados casos distintos dependendo das condições de contorno e do domínio do problema. O deslocamento em qualquer ponto x (chamado *ponto campo*) do sólido infinito para uma força $e_j(\xi)$ aplicada no ponto ξ (chamado *ponto fonte*) é dado pela expressão [Banerjee, 1994]:

$$u_i(x) = G_{ij}(x, \xi) e_j(\xi) \quad (2.31)$$

quando se conhece o tensor $G_{km}(x, \xi)$ definido como o deslocamento na direção k no ponto x devido a uma força concentrada unitária na direção m no ponto ξ . Isto corresponde à solução u_i da equação de equilíbrio de Navier (2.30) quando a força de corpo b_i é substituída por [Weinberger et al., 2005]:

$$b_i = \delta_{im} \Delta_m(x, \xi) \quad (2.32)$$

onde $\Delta_m(x, \xi)$ é a função *delta de Dirac*. Da mesma forma, a solução fundamental para o campo de trações $t_i(x)$ em um ponto de superfície com normal $n_j(x)$ é calculada com a expressão:

$$t_i(x) = \sigma_{ij}(x) n_j(x) = F_{ik}(x, \xi) e_k(\xi) \quad (2.33)$$

As soluções fundamentais da elasticidade linear isotrópica para um domínio infinito foram deduzidas por Lord Kelvin, 1948 e são conhecidas como soluções de Kelvin. As soluções de Kelvin em EPD são:

$$G_{ij}(x, \xi) = C_1 \left[C_2 \delta_{ij} \ln r - \frac{(x_i - \xi_i)(x_j - \xi_j)}{r^2} \right] \quad (2.34)$$

para deslocamentos, e:

$$F_{ik}(x, \xi) = \frac{C_3}{r^2} \left\{ C_4 [n_k(x_i - \xi_i) - n_i(x_k - \xi_k)] + \left[C_4 \delta_{ik} + \frac{2(x_i - \xi_i)(x_k - \xi_k)}{r^2} \right] (x_j - \xi_j) n_j \right\} \quad (2.35)$$

para trações, sendo:

$$r^2 = (x_i - \xi_i)(x_i - \xi_i) \quad (2.36)$$

$$C_1 = -\frac{1}{8\pi\mu(1-\nu)} \quad (2.37)$$

$$C_2 = 3 - 4\nu \quad (2.38)$$

$$C_3 = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} \quad (2.39)$$

$$C_4 = 1 - 2\nu \quad (2.40)$$

e onde μ é o módulo de cisalhamento. As soluções correspondentes ao problema de tensão plana podem ser obtidas de aquelas para deformação plana de acima usando o coeficiente de Poisson $\bar{\nu} = \nu/(1+\nu)$.

2.9. Mapeamento micro-macroescala

Em um esquema micro-mecânico os campos de tensão e deformação no material micro-heterogêneo são divididos nas contribuições de cada uma das diferentes escalas. Supõe-se que estas escalas são suficientemente diferentes tal que [Böhm, 2004]: (i) Flutuações nos campos de tensão e deformação na escala menor (micro-campos) influenciam o comportamento na escala maior só a traves de suas medias no volume. (ii) e os gradientes dos campos de tensão e deformação na escala maior (macro-campos) não são significantes na escala menor, onde estes campos aparentam ser constantes e podem ser descritos em termos de uma tensão ou deformação aplicada uniformemente. Formalmente, esta divisão em contribuições pode ser expressa como [Böhm, 2004]:

$$\varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} + \tilde{\varepsilon}_{ij} \quad \sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} + \tilde{\sigma}_{ij} \quad (2.41)$$

onde σ_{ij} e ε_{ij} denotam os micro-campos de tensão e deformação respectivamente, $\tilde{\sigma}_{ij}$ e $\tilde{\varepsilon}_{ij}$ denotam as flutuações microscópicas de estes campos, e $\langle \cdot \rangle_{\Omega} \stackrel{def}{=} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \cdot d\Omega$ é definido como o operador média espacial.

Se as relações (2.41) não são suficientemente satisfeitas, métodos especiais de homogeneização devem ser usados tais como os chamados esquemas de segunda ordem [Kouznetsova, 2002], onde mecânica do contínuo de alta ordem é utilizada na macro-escala. O presente trabalho se enquadra na micro-mecânica do contínuo onde a mecânica do contínuo clássica é usada em todas as escalas.

2.9.1. Mapeamento de deformação, tensão e trabalho

Postula-se que o tensor de deformações infinitesimais macroscópico ε_{ij}^M é a média espacial do tensor de deformações infinitesimais ε_{ij} (2.6) em um EVR [Nemat-Nasser & Hori, 1999]:

$$\varepsilon_{ij}^M = \langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} \quad (2.42)$$

Note-se que este mapeamento de escalas não é trivial, sendo que a média deve ser tomada em um EVR (e não é satisfeito para algumas grandezas cinemáticas na análise não linear [Kouznetsova, 2002]).

Da mesma forma se postula que o tensor de tensões macroscópico σ_{ij}^M é a média espacial do tensor de tensões σ_{ij} num EVR [Nemat-Nasser & Hori, 1999]:

$$\sigma_{ij}^M = \langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} \quad (2.43)$$

O teorema de energia média conhecido na literatura como condição de Hill ou condição de macro-homogeneidade [Hill, 1963; Suquet, 1985], requer que a média no volume do trabalho feito pelos campos internos de tensão e deformação num EVR seja igual ao trabalho local na macro-escala. Assim para um material micro-heterogêneo elástico linear a condição de Hill é expressa matematicamente como

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \sigma^M : \varepsilon^M \quad (2.44)$$

ou, como é apresentada mais comumente:

$$\underbrace{\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega}}_{\text{micro energia de deformação}} = \underbrace{\langle \varepsilon \rangle_{\Omega} : \langle \sigma \rangle_{\Omega}}_{\text{macro energia de deformação}} \quad (2.45)$$

levando em conta os postulados (2.42) e (2.43).

Esta condição é fundamental em micro-mecânica e permite interpretar o problema de homogeneização em como achar um material homogêneo que seja *energeticamente equivalente* à uma dada microestrutura. Ao mesmo tempo assegura que, para materiais com distribuição aleatória, as propriedades efetivas definidas em termo da energia elástica coincidem com aquela definida em termos da relação entre médias de tensão e deformação [Nemat-Nasser & Hori, 1999]. É importante notar que esta condição não é satisfeita para qualquer microestrutura, sendo que a mesma determina os requerimentos do tamanho do EVR.

2.10. Propriedades efetivas de materiais micro-heterogêneos

As propriedades efetivas são computadas utilizando a Teoria de Campos Médios ou também chamada Análise EVR [Hollister & Kikuchi, 1997], a qual, como outras teorias de homogeneização, está baseada no conceito de Elemento de Volume Representativo (EVR). O EVR para um ponto material de um meio contínuo é um volume de material que é estatisticamente representativo da vizinhança material infinitesimal de um ponto material. O ponto material do contínuo é chamado *macro-elemento*. Os micro-constituintes do EVR são chamados *micro-elementos*. A dimensão típica do macro-elemento, L , deve ser vários ordens de magnitude maior que a dimensão típica do micro-elemento, l . O requerimento de $L/l \gg 1$ independe de se a distribuição dos micro-elementos é aleatória ou periódica. Assim, o EVR deve

conter um número muito grande de micro-elementos e ser estatisticamente representativo das propriedades no nível da macro-escala. Na Figura 2.2, é mostrado um meio contínuo no qual se identifica um ponto material típico P cercado de um elemento material infinitesimal. Quando este macro-elemento é aumentado como esquematizado na figura, este pode ter sua própria micro-estrutura complexa, a qual pode consistir de grãos separados por contorno de grãos, furos, inclusões, trincas ou outros defeitos micro-estruturais.

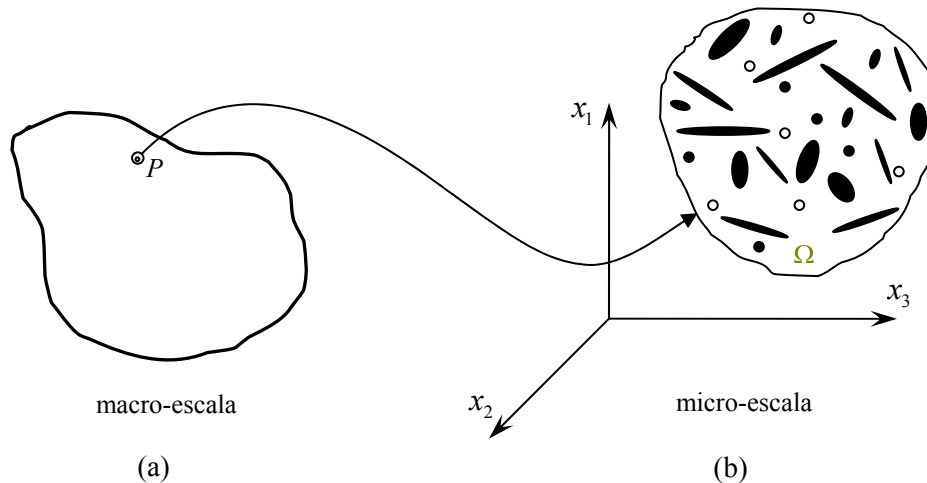


Figura 2.2 – (a) Ponto material P e a vizinhança material infinitesimal, é dizer, o macro-elemento. (b) Possível microestrutura de um EVR para a vizinhança do ponto material P .

No conceito de EVR é preciso definir duas escalas. Uma *macro-escala* pela qual a vizinhança material infinitesimal é medida, e uma *micro-escala* à qual corresponde o menor micro-constituente onde propriedades e forma são julgadas têm efeito direto de primeira ordem na resposta efetiva e propriedades do macro-elemento. A seleção dos micro-constituintes que são essenciais para a modelagem da microestrutura é uma tarefa que depende do problema e objetivo particular, sendo que isto é analisado através da observação sistemática da microestrutura, e deve ser guiada por resultados experimentais. Neste trabalho são considerados materiais que podem ser modelados como contendo uma matriz homogênea e isotrópica com micro-constituintes cilíndricos homogêneos e isotrópicos.

Existem muitas formas de definir o EVR e para uma discussão mais ampla sobre este tópico pode-se consultar os trabalhos de Drugan & Willis, 1996 e Aidun et al., 1999. Uma definição possível caracteriza o EVR como o menor volume de micro-estrutura que permite obter com certa precisão uma propriedade macroscópica de interesse [Kouznetsova, 2002]. Neste caso o tamanho do EVR depende do tipo de comportamento do material (por exemplo, o tamanho do

EVR para o regime linear é menor que para o comportamento plástico [Batista R. G. et al., 2003]). Esta é a definição de EVR que é considerada neste trabalho.

A análise EVR consiste em resolver um problema de valores de contorno sobre o EVR e encontrar uma relação entre médias das variáveis envolvidas. Uma forma de análise EVR é assumir condições de contorno de deslocamento linear ou tração uniforme e calcular a resposta de um EVR a estas condições de contorno [Hollister & Kikuchi, 1997]. Em muitos casos o problema de valores de contorno sobre o EVR não pode ser resolvido diretamente, a menos que se adote alguma hipótese simplificativa sobre as deformações das fases no EVR. Com as modernas ferramentas de análise numéricas é possível resolver o problema elástico em EVR de materiais com microestruturas de geometria e comportamento complexo. Uma vantagem do modelado de propriedades do material pela análise EVR é que este permite estabelecer uma relação entre o macro e o micro-campo das variáveis envolvidas. Isto é, se tem informação das tensões e deformações no nível da micro-escala, sendo isto de suma importância no estudo de fenômenos micro-estruturais.

Por não serem conhecidas as condições de contorno *in-situ* no EVR as condições de contorno adotadas são distintas à aquela real que o EVR experimenta. Baseando-se no Princípio de Mínima Energia Potencial pode-se deduzir uma característica importante da análise EVR na situação periódica: Quando se usa condições de borda de deslocamento linear obtém-se uma banda superior sobre a rigidez efetiva real do material. Da mesma forma, quando se usa condições de contorno de tensão uniforme obtém-se uma banda inferior sobre a rigidez efetiva real do material. Uma dedução disto é apresentada no Apêndice A.

Existem muitos outros métodos para se determinar propriedades efetivas de materiais micro-heterogêneos. O método mais simples para estimar propriedades efetivas é o modelo de bandas de Hill-Reuss-Voigt. Este modelo não fornece informações da micro-geometria do material além da fração de volume. Outros métodos são a Teoria Matemática de homogeneização [Sanchez-Palencia E., 1981; Bakhvalov N. & Panasenko G., 1984], ou os métodos analíticos e semi-analíticos como bandas de Hashin-Shtrikman, o Método auto-consistente, ou o Método de Mori-Tanaka [Nemat-Nasser S. & Hori M., 1999, Mura, 1993].

2.10.1. Teste computacional do material

Para se determinar as propriedades macroscópicas de um material heterogêneo deve-se computar a relação entre médias (2.46) [Zohdi, 2005; Hashin, 1983], onde é claro que estão implícitos os acoplamentos micro-macro (2.42) e (2.43):

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = C_{ijk}^* \langle \varepsilon_{km} \rangle_{\Omega} \quad (2.46)$$

ou tendo em conta a notação de Voigt

$$\begin{Bmatrix} \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{33} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{23} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{13} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{12} \rangle_{\Omega} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & c_{13}^* & c_{14}^* & c_{15}^* & c_{16}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* & c_{23}^* & c_{24}^* & c_{25}^* & c_{26}^* \\ c_{31}^* & c_{32}^* & c_{33}^* & c_{34}^* & c_{35}^* & c_{36}^* \\ c_{41}^* & c_{42}^* & c_{43}^* & c_{44}^* & c_{45}^* & c_{46}^* \\ c_{51}^* & c_{52}^* & c_{53}^* & c_{54}^* & c_{55}^* & c_{56}^* \\ c_{61}^* & c_{62}^* & c_{63}^* & c_{64}^* & c_{65}^* & c_{66}^* \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \langle \varepsilon_{11} \rangle_{\Omega} \\ \langle \varepsilon_{22} \rangle_{\Omega} \\ \langle \varepsilon_{33} \rangle_{\Omega} \\ 2\langle \varepsilon_{23} \rangle_{\Omega} \\ 2\langle \varepsilon_{13} \rangle_{\Omega} \\ 2\langle \varepsilon_{12} \rangle_{\Omega} \end{Bmatrix} \quad (2.47)$$

Para que esta relação seja válida a amostra de material deve ser um EVR [Zohdi, 2002].

Então o corpo de prova pode ser testado computacionalmente e se resolver o problema elástico para calcular os micro-campos de tensão e deformação. E então obter as constantes da matriz de elasticidade resolvendo-se o sistema de equações resultante (2.47). A amostra de material micro-estrutural é submetida às mesmas condições de contorno que produziram um campo de tensões ou deformações uniforme em um corpo homogêneo. Assim, são consideradas condições de deslocamento linear $u_i|_{\Gamma} = \mathcal{E}_{ij}x_j$ ou de tração uniforme $t_i|_{\Gamma} = \mathcal{L}_{ij}n_j$ sobre o contorno da matriz, sendo \mathcal{E}_{ij} e \mathcal{L}_{ij} constantes. Usualmente os casos de carga linearmente independentes são expressos na forma:

$$\mathcal{L} \text{ ou } \mathcal{E} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad (2.48)$$

$$\begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta \\ 0 & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{bmatrix}$$

onde β são parâmetros de carga constantes. Cada um dos 6 casos independentes de carga proporciona seis equações para um total de 36 equações que permitem calcular as 36 constantes elásticas da relação entre médias (2.46) ou (2.47).

2.10.2. Teorema da deformação média

A Figura 2.3 mostra a nomenclatura aqui utilizada para os domínios e contornos na amostra de material. O sub-índice m faz referência à matriz da microestrutura e o sub-índice p (partícula) referencia as inhomogeneidades na microestrutura.

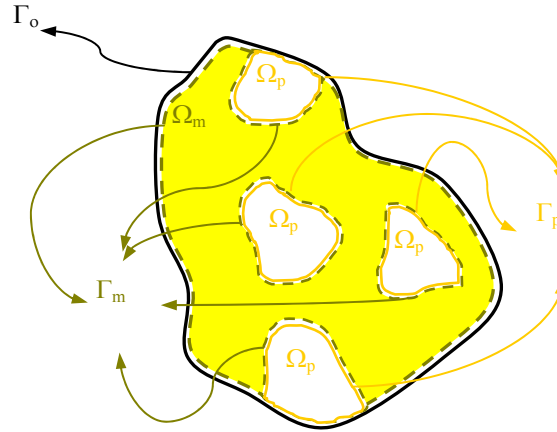


Figura 2.3 - Nomenclatura de domínios e contornos utilizados no teorema de deformação média.

A relação deformação-deslocamento (2.6) permite escrever

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\Omega} (u_{i,j} + u_{j,i}) d\Omega \quad (2.49)$$

com a nomenclatura de subdomínios $\Omega = \Omega_m \cup \Omega_p$ (ver Figura 2.3):

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{2|\Omega|} \left[\int_{\Omega_m} (u_{i,j} + u_{j,i}) d\Omega + \int_{\Omega_p} (u_{i,j} + u_{j,i}) d\Omega \right] \quad (2.50)$$

Aplicando o Teorema de Green:

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{2|\Omega|} \left[\int_{\Gamma_m} (u_i n_j + u_j n_i) d\Gamma + \int_{\Gamma_p} (u_i n_j + u_j n_i) d\Gamma \right] \quad (2.51)$$

Se o material está submetido à condição de contorno de deslocamento linear $u_i|_{\Gamma_o} = \mathbf{E}_{ij} x_j$ e levando-se em conta a nomenclatura dos subdomínios (ver Figura 2.3) tem-se:

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{2|\Omega|} \left[\int_{\Gamma_o} (\mathbf{E}_{ik} x_k n_j + \mathbf{E}_{jk} x_k n_i) d\Gamma + \int_{\Gamma_m \cap \Gamma_p} (u_i^{\circ} n_j + u_j^{\circ} n_i) d\Gamma \right] \quad (2.52)$$

onde u_i° é o deslocamento relativo na interface matriz-partícula. Novamente aplicando o teorema de Green sobre a primeira integral, resulta:

$$\begin{aligned}
\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} &= \frac{1}{2|\Omega|} \left[\int_{\Omega} \left((\mathbf{E}_{ik} x_k)_{,j} + (\mathbf{E}_{jk} x_k)_{,i} \right) d\Omega + \int_{\Gamma_m \cap \Gamma_p} (u_i^{\ominus} n_j + u_j^{\ominus} n_i) d\Gamma \right] = \\
&= \mathbf{E}_{ij} + \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\Gamma_m \cap \Gamma_p} (u_i^{\ominus} n_j + u_j^{\ominus} n_i) d\Gamma
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Finalmente, assumindo-se *adesão perfeita* entre matriz e partícula, $u_i^{\ominus} = 0$:

$$\langle \varepsilon \rangle_{\Omega} = \mathbf{E} \tag{2.54}$$

Note-se que este resultado independe das forças de corpo b_i .

2.10.3. Teorema da tensão média

Operando sobre o tensor de terceira ordem $\sigma \otimes x \stackrel{def}{=} \sigma_{ij} x_k$:

$$(\sigma_{ij} x_k)_{,j} = \sigma_{ij,j} x_k + \sigma_{ij} x_{k,j} = \sigma_{ij,j} x_k + \sigma_{ij} \delta_{kj} = \sigma_{ij,j} x_k + \sigma_{ik} \tag{2.55}$$

e inserindo a equação de equilíbrio da elasticidade (2.4) vem:

$$(\sigma_{ij} x_k)_{,j} = -b_i x_k + \sigma_{ik} \Rightarrow \sigma_{ik} = (\sigma_{ij} x_k)_{,j} + b_i x_k \tag{2.56}$$

Com este último resultado a média no volume do campo de tensões no corpo é expressa como:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\sigma_{ik} x_j)_{,k} d\Omega + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} b_i x_j d\Omega \tag{2.57}$$

Aplicando o Teorema de Green na primeira integral do lado direito:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} \sigma_{ik} x_j n_k d\Gamma + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} b_i x_j d\Omega \tag{2.58}$$

Quando se considera um corpo com condições de contorno de tração uniforme tal que $t_i|_{\Gamma_o} = \mathcal{L}_{ij} n_j$, a equação (2.58) fica:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_o} \mathcal{L}_{ik} x_j n_k d\Gamma + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} b_i x_j d\Omega = \mathcal{L}_{ik} + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} b_i x_j d\Omega \tag{2.59}$$

Finalmente se não existem forças de corpo tem-se que:

$$\langle \sigma \rangle_{\Omega} = \mathcal{L} \tag{2.60}$$

Note-se que a separação de interface (*debonding*) não muda este resultado.

2.10.4. Satisfação da condição de energia de Hill

Considere-se um corpo sólido com adesão perfeita da interface matriz-partícula da sua microestrutura e em ausência de forças de corpo. Logo

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega \quad (2.61)$$

com as equações (2.6), (2.7) e (2.8) o tensor de deformações infinitesimais pode ser expressa em função dos deslocamentos como:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma_{ij} \left[u_{i,j} - \frac{1}{2}(u_{j,i} - u_{i,j}) \right] d\Omega = \quad (2.62)$$

$$= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma_{ij} u_{i,j} + \sigma_{ij} \left[\frac{1}{2}(u_{i,j} - u_{j,i}) \right] d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma_{ij} u_{i,j} + \sigma_{ij} \omega_{ij} d\Omega \quad (2.63)$$

Devido ao tensor de rotação ω_{ij} ser anti-simétrico, isto é, $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$ e o tensor de tensões σ_{ij} ser um tensor simétrico ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$), ao se efetuar o produto $\sigma : \omega$ na segunda integral os termos da diagonal são nulos e os de fora da diagonal se anulam entre si. Portanto a micro-energia elástica é escrita como:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma_{ij} u_{i,j} d\Omega \quad (2.64)$$

Logo, com a equação de equilíbrio (2.4) (na ausência de forças corpo):

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\sigma_{ij} u_i)_{,j} d\Omega \quad (2.65)$$

e, aplicando-se o teorema de Green

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_o} \sigma_{ij} u_i n_j d\Gamma \quad (2.66)$$

Introduzindo-se agora condições de contorno de deslocamento linear da forma $u_i|_{\Gamma_o} = \mathbf{E}_{ij} x_j$, vem:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_o} \mathbf{E}_{ij} x_j \sigma_{ik} n_k d\Gamma \quad (2.67)$$

e aplicando-se o teorema de Green novamente:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\mathbf{E}_{ij} x_j \sigma_{ik})_{,k} d\Omega \quad (2.68)$$

Levando-se em conta a equação de equilíbrio (2.4) na ausência de forças de corpo:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\mathbf{E}_{ij} x_j)_{,k} \sigma_{ik} d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\mathbf{E}_{ij,k} x_j + \mathbf{E}_{ij} x_{j,k}) \sigma_{ik} d\Omega = \\
&= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\mathbf{E}_{ij} \delta_{jk}) \sigma_{ik} d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{E}_{ik} \sigma_{ik} d\Omega = \frac{\mathbf{E}_{ik}}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma_{ik} d\Omega = \mathbf{E}_{ik} \langle \sigma_{ik} \rangle_{\Omega}
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Aplicando-se agora o teorema da deformação média, $\langle \varepsilon \rangle_{\Omega} = \mathbf{E}$, a condição de energia de Hill é satisfeita [Zohdi, 2002]:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \langle \varepsilon_{ik} \rangle_{\Omega} \langle \sigma_{ik} \rangle_{\Omega} = \langle \varepsilon \rangle_{\Omega} : \langle \sigma \rangle_{\Omega} \tag{2.70}$$

Por outro lado, considerando ausência de forças de corpo e condições de contorno de tração uniforme $t_i|_{\Gamma_o} = \mathcal{L}_{ij} n_j$ em (2.66), tem-se:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_o} u_i t_i d\Gamma = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_o} u_i \mathcal{L}_{ij} n_j d\Gamma \tag{2.71}$$

Aplicando-se o Teorema de Green:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (u_i \mathcal{L}_{ij})_{,j} d\Omega \tag{2.72}$$

com o \mathcal{L}_{ij} constante e aplicando-se um argumento similar ao utilizado para encontrar a equação (2.64):

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_{i,j} \mathcal{L}_{ij} d\Omega = \frac{\mathcal{L}_{ij}}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_{i,j} d\Omega = \mathcal{L}_{ij} \langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} \tag{2.73}$$

Lembrando-se que $\langle \sigma \rangle_{\Omega} = \mathcal{L}$, o Teorema das tensões médias leva a [Zohdi, 2002]:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{\Omega} = \langle \sigma_{ik} \rangle_{\Omega} \langle \varepsilon_{ik} \rangle_{\Omega} = \langle \varepsilon \rangle_{\Omega} : \langle \sigma \rangle_{\Omega} \tag{2.74}$$

satisfazendo assim a condição de energia de Hill.

3. MODELAGEM NUMÉRICA DO MATERIAL

3.1. Introdução

Para computar a relação entre médias na análise EVR linear é preciso calcular os campos internos de tensões e deformações do material estudado [Nemat-Nasser & Hori, 1999]. Neste trabalho, é utilizado o *Método dos Elementos de Contorno* (MEC) para esse propósito. A principal característica do MEC reside na redução de uma dimensão do problema, em se tratando de problemas lineares, o que diminui drasticamente a quantidade de dados necessários para solução computacional do mesmo [Brebbia & Dominguez, 1992; Banerjee, 1994]. Assim, a discretização de microestruturas contendo heterogeneidades resulta simples e computacionalmente eficiente para modelar numericamente (ver Capítulo 5) e implementar em um módulo de otimização (ver Capítulo 6), sendo que não é necessário rediscritizar o contorno exterior da microestrutura nem o cálculo de coeficientes associados quando se altera a distribuição das inhomogeneidades. Em contrapartida, o MEC fornece geralmente matrizes cheias e não-simétricas, dificultando a resolução do sistema de equações algébricas. Também é importante destacar que em problemas de mecânica dos sólidos em regime linear, o MEC permite obter com alta precisão os campos de tensões e deslocamentos quando comparado com outras técnicas numéricas de resolução aproximada de equações diferenciais.

Neste capítulo é apresentada uma formulação de elementos de contorno utilizada para a análise de tensões elásticas em corpos sólidos que contêm um número grande de furos ou inclusões circulares [Henry & Banerjee, 1991 e Banerjee & Henry, 1992]. Nesse trabalho, a formulação de Henry & Banerjee, 1991 e Banerjee & Henry, 1992 para sólidos tridimensionais é particularizada a duas dimensões e apresentada em forma mais geral. O objetivo principal consiste na modelagem de materiais micro-porosos, onde a formulação desenvolvida leva em conta a possibilidade de inclusões de outros materiais na microestrutura. Como vantagem da formulação, é apresentada uma condensação estática no sistema de equações e é estudada com detalhe a técnica de integração implementada na formulação desenvolvida. Finalmente, o grau de precisão é ilustrado com alguns exemplos simples.

3.2. Equação integral de contorno para elastoestática

A formulação integral de contorno para elastoestática linear pode ser deduzida a partir do *método dos resíduos ponderados* [Brebbia & Dominguez, 1992] ou do *segundo teorema de Betti* ou *teorema de reciprocidade dos trabalhos externos* [Banerjee, 1994]. A partir de qualquer um

desses teoremas pode-se obter a conhecida *identidade Somigliana* [Brebbia & Dominguez, 1992; Banerjee, 1994]:

$$u_j(\xi_o) = \int_{\Gamma} [t_i(x)G_{ij}(x, \xi_o) - F_{ij}(x, \xi_o)u_i(x)]d\Gamma + \int_{\Omega} b_i(z)G_{ij}(z, \xi_o)d\Omega \quad (3.1)$$

onde x é um ponto no contorno Γ e z é um ponto no domínio Ω . Esta expressão fornece o deslocamento $u_j(\xi)$ num ponto interior ξ_o devido a qualquer combinação admissível de t_i e u_i sobre Γ e uma distribuição de b_i dentro do volume do sólido. A identidade Somigliana pode ser empregada para obter os deslocamentos em pontos internos uma vez que são conhecidos os deslocamentos e as trações em todo o contorno. No MEC, é de interesse obter a expressão (3.1) para pontos do contorno, chame-se agora ξ , e assim ter uma equação integral de contorno que permita produzir um sistema de equações algébricas lineares para incógnitas unicamente no contorno do domínio (as forças de corpo são consideradas conhecidas). Para isto utiliza-se um artifício que consiste modificar levemente o domínio do problema no ponto do contorno ξ de forma que possa ser utilizada a identidade Somigliana e, logo após, colapsar ao ponto a região modificada fazendo um processo de limite. Esse é detalhado na literatura sobre o MEC [Brebbia & Dominguez, 1992 ou Banerjee, 1994]. Finalmente, se pode escrever a equação integral de contorno para elastoestática [Banerjee, 1994] como:

$$\mathbf{C}_{ij}(\xi)u_j(\xi) = \int_{\Gamma} [t_i(x)G_{ij}(x, \xi) - F_{ij}(x, \xi)u_i(x)]d\Gamma + \int_{\Omega} b_i(z)G_{ij}(z, \xi)d\Omega \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{C}_{ij}(\xi)$ é uma matriz de coeficientes que dependem da geometria do contorno.

3.3. Formulação integral de contorno para matriz com furos

A equação integral de contorno para elastoestática (3.2) na ausência de forças de corpo pode ser expressa por (3.3) para o caso onde a inomogeneidade na matriz do material é um furo. Os sobre-índices o e f se referem à matriz (contorno exterior) e o furo, respectivamente e é enfatizado que não implicam somatório neste caso; e N_f é a quantidade de furos [Henry & Banerjee, 1991].

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{ij}(\xi)u_i(\xi) = & \int_{\Gamma_o} [G_{ij}^o(x, \xi)t_i^o(x) - F_{ij}^o(x, \xi)u_i^o(x)]d\Gamma + \\ & + \sum_{n=1}^{N_f} \int_{\Gamma^n} [G_{ij}^f(x, \xi)t_i^f(x) - F_{ij}^f(x, \xi)u_i^f(x)]d\Gamma \end{aligned} \quad (3.3)$$

Embora a discretização da equação (3.3) em elementos de contorno na forma convencional [Banerjee & Butterfield, 1981] requiera uma discretização muito refinada ao redor do furo, a formulação exposta aqui permite uma modelagem e uma análise eficiente através do “*elemento furo*” (“*hole element*”) proposto por Henry & Banerjee, 1991 e Banerjee & Henry, 1992 para furos de forma tubular em sólidos tridimensionais. Este elemento assume uma variação do campo de deslocamentos no contorno dos furos definida em termos de funções trigonométricas circulares. Um sistema de coordenadas local \hat{x}_i é definido com a origem no centro do furo. A barra “ $\hat{\cdot}$ ” será usada para variáveis relativas ao sistema local. A posição da origem do sistema de coordenadas local no sistema de coordenadas global x_i é determinada pelo vetor z_i enquanto o eixo \hat{x}_i permanece paralelo ao eixo x_i como mostrado na Figura 3.1. Assim, um ponto \hat{x}_i do contorno do furo pode ser expresso em função do ângulo θ de acordo com a equação (3.4), onde R é o raio do furo. O vetor normal ao contorno do furo no ponto \hat{x}_i é dado pela equação (3.5).

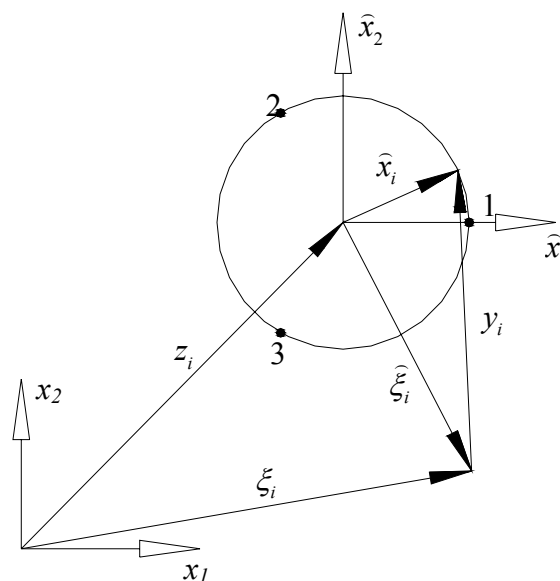


Figura 3.1 - Sistema de referência local e global.

$$\begin{aligned}\hat{x}_1 &= R \cos \theta \\ \hat{x}_2 &= R \sin \theta\end{aligned}\quad (3.4)$$

$$\begin{aligned}\hat{n}_1 &= -\cos \theta \\ \hat{n}_2 &= -\sin \theta\end{aligned}\quad (3.5)$$

Se for considerado o caso que não há pressão aplicada no contorno do furo, o primeiro termo no somatório da equação (3.3) desaparece por condição de contorno. Assim, o termo restante no somatório pode ser expresso no sistema local e integrado na direção circunferencial. Para o n -ésimo furo tem-se, então [Henry & Banerjee, 1991]:

$$\int_{\Gamma^n} F_{ij}^f(x, \xi) u_i^f(x) d\Gamma = \int_{2\pi}^0 \widehat{F}_{ij}^f(R, \theta, \widehat{\xi}) u_i^f(\theta) R d\theta \quad (3.6)$$

Neste trabalho, as expressões analíticas do tensor \widehat{F}_{ij} do furo são desenvolvidas para o sistema de referencia \widehat{x}_i a partir de (2.35), obtendo-se as expressões (3.7)-(3.10) que são validas tanto para EPT como para EPD:

$$\widehat{F}_{11}(R, \theta, \widehat{\xi}) = \left[\frac{C_3}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left\{ \left[C_4 + \frac{2(R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)^2}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left[\widehat{\xi}_1 \cos \theta + \widehat{\xi}_2 \sin \theta - R \right] \right\} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} & \widehat{F}_{21}(R, \theta, \widehat{\xi}) = \\ & = \left[\frac{C_3}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left\{ C_4 \left[\widehat{\xi}_1 \sin \theta - \widehat{\xi}_2 \cos \theta \right] + \left[\frac{2(R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)(R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left[\widehat{\xi}_1 \cos \theta + \widehat{\xi}_2 \sin \theta - R \right] \right\} \quad (3.8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \widehat{F}_{12}(R, \theta, \widehat{\xi}) = \\ & = \left[\frac{C_3}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left\{ C_4 \left[\widehat{\xi}_2 \cos \theta - \widehat{\xi}_1 \sin \theta \right] + \left[\frac{2(R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)(R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left[\widehat{\xi}_1 \cos \theta + \widehat{\xi}_2 \sin \theta - R \right] \right\} \quad (3.9) \end{aligned}$$

$$\widehat{F}_{22}(R, \theta, \widehat{\xi}) = \left[\frac{C_3}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left\{ \left[C_4 + \frac{2(R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)^2}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \left[\widehat{\xi}_1 \cos \theta + \widehat{\xi}_2 \sin \theta - R \right] \right\} \quad (3.10)$$

onde as constantes C_i foram definidas na seção 2.8 e são dependentes das propriedades da matriz e do modelo (EPT ou EPD). A variável r é definida da forma:

$$r^2(R, \theta, \widehat{\xi}) = (R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)^2 + (R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)^2 \quad (3.11)$$

A equação integral de contorno para a matriz do material contendo N_f furos cilíndricos sem pressão interna é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{ij}(\xi)u_i(\xi) = & \int_{\Gamma_o} \left[G_{ij}^o(x, \xi)t_i^o(x) - F_{ij}^o(x, \xi)u_i^o(x) \right] d\Gamma - \\ & - \sum_{n=1}^{N_f} \int_{2\pi}^0 \widehat{F}_{ij}^f(R, \theta, \xi)u_i^f(\theta)R_n d\theta \end{aligned} \quad (3.12)$$

3.4. Formulação integral de contorno para matriz com inclusões

No caso em que a inhomogeneidade da matriz seja uma inclusão de um outro material, a equação integral de contorno para a matriz fica igual à apresentada na seção anterior, equação (3.3) e, para cada uma das inclusões, pode-se escrever sua respectiva equação integral de contorno como [Banerjee & Henry, 1992]:

$$\mathbf{c}_{ij}^p(\xi)u_i(\xi) = \int_{\Gamma^n} \left[G_{ij}^p(x, \xi)t_i^p(x) - F_{ij}^p(x, \xi)u_i^p(x) \right] d\Gamma \quad (3.13)$$

onde p denota a partícula (inclusão). Quando se assume aderência total entre a partícula e a matriz a condição de interface corresponde a deslocamentos iguais e de trações de igual magnitude e sentidos opostos em relação ao contorno da partícula e ao contorno da matriz com furo:

$$u_i^f(x) = u_i^p(x), \quad t_i^f(x) = -t_i^p(x) \quad (3.14)$$

Estas condições são inseridas na equação integral de contorno da partícula, equação (3.13), e obtém-se a seguinte equação modificada para a n -ésima partícula:

$$\mathbf{c}_{ij}^p(\xi)u_i(\xi) = \int_{\Gamma^n} \left[-G_{ij}^p(x, \xi)t_i^f(x) - F_{ij}^p(x, \xi)u_i^f(x) \right] d\Gamma \quad (3.15)$$

Finalmente, somando esta última expressão para a n -ésima partícula na equação (3.3) da matriz do material tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{ij}^\ominus(\xi)u_i(\xi) = & \int_{\Gamma_o} \left[G_{ij}^o(x, \xi)t_i^o(x) - F_{ij}^o(x, \xi)u_i^o(x) \right] d\Gamma + \\ & + \sum_{n=1}^{N_p} \int_{\Gamma^n} \left[G_{ij}^\ominus(x, \xi)t_i^f(x) - F_{ij}^\ominus(x, \xi)u_i^f(x) \right] d\Gamma \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde

$$G_{ij}^\ominus(x, \xi) = G_{ij}^f(x, \xi) - G_{ij}^p(x, \xi) \quad (3.17)$$

$$F_{ij}^\ominus(x, \xi) = F_{ij}^f(x, \xi) + F_{ij}^p(x, \xi) \quad (3.18)$$

e N_p é a quantidade de partículas. Note-se que G_{ij}^f e G_{ij}^p têm expressões similares sendo que as constantes que são dependentes do material em G_{ij}^f são referidas à matriz, enquanto que em G_{ij}^p

às da partícula considerada. No caso do tensor F_{ij} acontece o mesmo. Aliás, os sinais de F_{ij}^f e F_{ij}^p são opostos tendo em vista a normal exterior do contorno. Por último, salienta-se que na formulação original de Banerjee & Henry, 1992 o tensor F_{ij}^\ominus é zerado argumentando-se que o coeficiente de Poisson da inclusão e da matriz são iguais quando o módulo de Young da inclusão é muito maior que o da matriz. Neste trabalho, esta condição é relaxada tendo-se a possibilidade de ter diferentes coeficientes de Poisson entre a matriz e inclusões resultando uma formulação mais geral.

Os termos na somatória na equação (3.16) podem ser mapeados ao sistema local e integrados na direção circunferencial, tal que para a n -ésima partícula:

$$\int_{\Gamma^n} F_{ij}^\ominus(x, \xi) u_i^f(x) d\Gamma = \int_{2\pi} \widehat{F}_{ij}^\ominus(R, \theta, \widehat{\xi}) u_i^f(\theta) R d\theta \quad (3.19)$$

$$\int_{\Gamma^n} G_{ij}^\ominus(x, \xi) t_i^f(x) d\Gamma = \int_{2\pi} \widehat{G}_{ij}^\ominus(R, \theta, \widehat{\xi}) t_i^f(\theta) R d\theta \quad (3.20)$$

No presente trabalho, as expressões analíticas para os tensores \widehat{G}_{ij} são desenvolvidas para o sistema local \widehat{x}_i , resultando as seguintes expressões, validas tanto para tensão plana quanto para deformação plana:

$$\widehat{G}_{11}(R, \theta, \widehat{\xi}) = C_1 \left[C_2 \ln \left(\sqrt{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right) - \frac{(R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)^2}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \quad (3.21)$$

$$\widehat{G}_{21}(R, \theta, \widehat{\xi}) = C_1 \left[\frac{(R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)(R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \quad (3.22)$$

$$\widehat{G}_{22}(R, \theta, \widehat{\xi}) = C_1 \left[C_2 \ln \left(\sqrt{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right) - \frac{(R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)^2}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \quad (3.23)$$

$$\widehat{G}_{12}(R, \theta, \widehat{\xi}) = C_1 \left[\frac{(R \cos \theta - \widehat{\xi}_1)(R \sin \theta - \widehat{\xi}_2)}{r^2(R, \theta, \widehat{\xi})} \right] \quad (3.24)$$

onde as constantes C_i foram definidas na seção 2.8 e são dependentes das propriedades da matriz e do modelo (EPT ou EPD).

A equação integral de contorno para uma matriz contendo N_p inclusões de um outro material é:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{ij}^{\ominus}(\xi)u_i(\xi) = & \int_{\Gamma_o} \left[G_{ij}^o(x, \xi)t_i^o(x) - F_{ij}^o(x, \xi)u_i^o(x) \right] d\Gamma + \\ & + \sum_{n=1}^{N_p} \int_{2\pi}^0 \left[\widehat{G}_{ij}^{\ominus}(R, \theta, \widehat{\xi})t_i^f(\theta) - \widehat{F}_{ij}^{\ominus}(R, \theta, \widehat{\xi})u_i^f(\theta) \right] R d\theta \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.5. Discretização das integrais de contorno

Nesta seção, o problema é formulado de uma forma geral levando em conta a possibilidade de se ter furos e partículas de distintas propriedades e raios. Para resolver a equação integral numericamente, os contornos são discretizados em elementos sob os quais os deslocamentos e trações são escritos em termos de seus valores numa série de pontos nodais. Escrevendo a forma discretizada da equação integral de contorno para cada ponto nodal, é obtido um sistema linear de equações algébricas. Com a aplicação das condições de borda do problema, este sistema pode ser resolvido, e obtém-se a solução aproximada das variáveis no contorno. Logo após, a solução em qualquer ponto interno (domínio) pode ser calculada através da *identidade Somigliana* [Brebbia & Dominguez, 1992].

A presente implementação do MEC utiliza elementos quadráticos descontínuos para discretizar o contorno exterior da microestrutura Γ_o . A idéia dos elementos descontínuos é deslocar para dentro do elemento os nós das extremidades. Estes elementos apresentam especiais vantagens em cantos ou pontos de descontinuidade [Brebbia & Dominguez, 1992]. As conhecidas matrizes de funções de forma para os elementos quadráticos $[\Phi]$ podem ser modificadas pela matriz $[\mathbf{Q}]$, a qual contém fatores geométricos em função dos deslocamentos dos nós no elemento descontínuo [Brebbia & Dominguez, 1992]. É obtida, assim, a matriz de funções de forma modificadas para elementos descontínuos:

$$[\Phi][\mathbf{Q}] = \begin{bmatrix} \bar{\phi}_1 & 0 & \bar{\phi}_2 & 0 & \bar{\phi}_3 & 0 \\ 0 & \bar{\phi}_1 & 0 & \bar{\phi}_2 & 0 & \bar{\phi}_3 \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

onde

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_1 &= \frac{\eta(\eta-1+b)}{2+a^2+ab-3a} \\ \bar{\phi}_2 &= \frac{\eta(a-b-\eta)-a+ab+1-b}{-a+ab+1-b} \\ \bar{\phi}_3 &= \frac{-\eta(a-1-\eta)}{2+b^2+ab-3b}\end{aligned}\quad (3.27)$$

sendo que η é a variável no espaço normalizado $[-1;+1]$ e, a e b são os deslocamentos do primeiro e último nó, respectivamente, como se indica na Figura 3.2. Assim, a geometria é interpolada com as funções de forma $[\Phi]$ e as variáveis físicas do problema são interpoladas com as funções de forma modificadas. Ficam definidos os nós geométricos e os nós físicos (ver Figura 3.2).

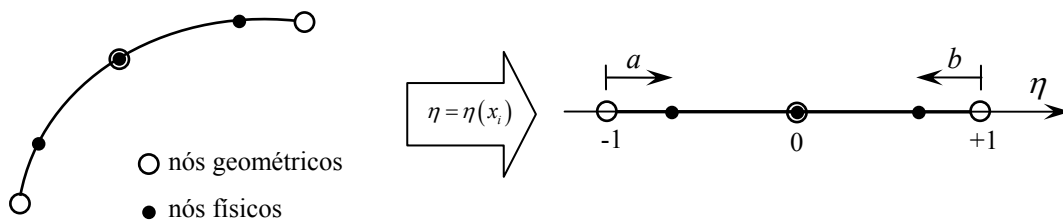


Figura 3.2 – Mapeamento do elemento quadrático descontínuo ao espaço normalizado η . Indicam-se os nós geométricos e nós físicos.

Os campos de deslocamentos e trações no contorno da inomogeneidade são interpolados com as funções de forma M_i :

$$u_i = M_\beta U_i^\beta \quad (3.28)$$

$$t_i = M_\beta T_i^\beta \quad (3.29)$$

onde U_i^β e T_i^β são os deslocamentos e trações do nó β na direção i . A posição dos nós é indicada na Figura 3.1. As funções de forma M_i , de base trigonométrica são [Henry & Banerjee, 1991 e Banerjee & Henry, 1992]:

$$\begin{aligned}
 M_1(\theta) &= \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cos \theta \\
 M_2(\theta) &= \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{3} \sin \theta - \frac{1}{3} \cos \theta \\
 M_3(\theta) &= \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{3} \sin \theta - \frac{1}{3} \cos \theta
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

e são mostradas na Figura 3.3. Estas funções têm valor unitário em um nó e zero nos outros.

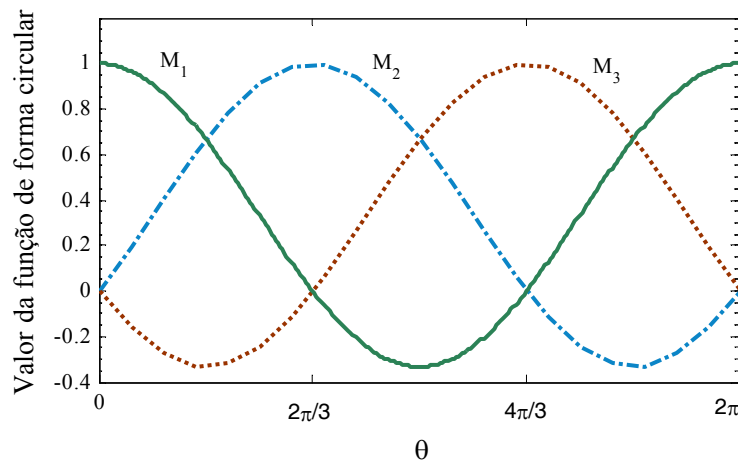


Figura 3.3 - Funções de forma circulares dos furos e inclusões.

Os campos de deslocamentos $\mathbf{u} = [u_1 \ u_2]^T$ e de trações $\mathbf{t} = [t_1 \ t_2]^T$ são interpolados para os elementos do contorno exterior da matriz, respectivamente, por:

$$\{\mathbf{u}\} = [\Phi][Q]\{\mathbf{U}\} \tag{3.31}$$

$$\{\mathbf{t}\} = [\Phi][Q]\{\mathbf{T}\} \tag{3.32}$$

e para os elementos de furo ou inclusão por:

$$\{\mathbf{u}\} = [\mathbf{M}]\{\mathbf{U}\} \tag{3.33}$$

$$\{\mathbf{t}\} = [\mathbf{M}]\{\mathbf{T}\} \tag{3.34}$$

onde são definidos os vetores de deslocamentos e trações nodais para os elementos quadráticos descontínuos ou elementos de furo ou inclusão como:

$$\{\mathbf{U}\} = [U_1^1 \ U_2^1 \ U_1^2 \ U_2^2 \ U_1^3 \ U_2^3]^T \tag{3.35}$$

$$\{\mathbf{T}\} = [T_1^1 \ T_2^1 \ T_1^2 \ T_2^2 \ T_1^3 \ T_2^3]^T \tag{3.36}$$

e a matriz de funções de forma para o furo ou inclusão é escrita como:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_1 & 0 & M_2 & 0 & M_3 & 0 \\ 0 & M_1 & 0 & M_2 & 0 & M_3 \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

A equação integral de contorno para uma matriz contendo N_f furos cilíndricos livres de tração (ver equação (3.12)) e N_p inclusões de um outro material (ver equação (3.25)) é:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{ij}(\xi)u_i(\xi) &= \int_{\Gamma_o} \left[G_{ij}^o(x, \xi)t_i^o(x) - F_{ij}^o(x, \xi)u_i^o(x) \right] d\Gamma - \\ &\quad - \sum_{n=1}^{N_f} \int_{2\pi}^0 \widehat{F}_{ij}^f(R, \theta, \widehat{\xi})u_i^f(\theta)R_n d\theta + \\ &\quad + \sum_{n=1}^{N_p} \int_{2\pi}^0 \left[\widehat{G}_{ij}^\ominus(R, \theta, \widehat{\xi})t_i^f(\theta) - \widehat{F}_{ij}^\ominus(R, \theta, \widehat{\xi})u_i^f(\theta) \right] R_n d\theta \end{aligned} \quad (3.38)$$

Utilizando as correspondentes funções de forma para interpolar os campos de tração e deslocamentos para cada caso, a equação de integral de contorno (3.38) pode ser escrita na sua forma discretizada como:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{ij}(\xi)u_i(\xi) &= \sum_{k=1}^{NE} \left[T_i^q \int_{\Gamma_k} G_{ij}^o(x, \xi) \bar{\phi}_q(x) d\Gamma \right] - \sum_{k=1}^{NE} \left[U_i^q \int_{\Gamma_k} F_{ij}^o(x, \xi) \bar{\phi}_q(x) d\Gamma \right] - \\ &\quad - \sum_{n=1}^{N_f} \left[U_i^q \int_{2\pi}^0 \widehat{F}_{ij}^f(R, \theta, \widehat{\xi}) M_q(\theta) R_n d\theta \right] + \\ &\quad + \sum_{n=1}^{N_p} \left[T_i^q \int_{2\pi}^0 \widehat{G}_{ij}^\ominus(R, \theta, \widehat{\xi}) M_q(\theta) R_n d\theta \right] - \sum_{n=1}^{N_p} \left[U_i^q \int_{2\pi}^0 \widehat{F}_{ij}^\ominus(R, \theta, \widehat{\xi}) M_q(\theta) R_n d\theta \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

A expressão (3.39) é reescrita em forma matricial como:

$$\begin{aligned} [\mathbf{C}]^i \{\mathbf{U}\}^i &= \sum_{j=1}^{NE} \left[\int_{\Gamma_j} [\mathbf{G}^o]^T [\mathbf{\Phi}][\mathbf{Q}] d\Gamma \{\mathbf{T}\}^j \right] - \sum_{j=1}^{NE} \left[\int_{\Gamma_j} [\mathbf{F}^o]^T [\mathbf{\Phi}][\mathbf{Q}] d\Gamma \{\mathbf{U}\}^j \right] - \\ &\quad - \sum_{n=1}^{N_f} \left[\int_{2\pi}^0 [\mathbf{F}^f]^T [\mathbf{M}] R_n d\theta \{\mathbf{U}\}^n \right] + \\ &\quad + \sum_{n=1}^{N_p} \left[\int_{2\pi}^0 [\mathbf{G}^\ominus]^T [\mathbf{M}] R_n d\theta \{\mathbf{T}\}^n \right] - \sum_{n=1}^{N_p} \left[\int_{2\pi}^0 [\mathbf{F}^\ominus]^T [\mathbf{M}] R_n d\theta \{\mathbf{U}\}^n \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde NE é o número de elementos utilizado para discretizar o contorno exterior da matriz Γ_o , N_f e N_p é o número de elementos (quantidade de furos) de furo e o número de elementos (quantidade de partículas) de partícula que contém a microestrutura; respectivamente. Assim, (3.39) e (3.40) são a forma discretizada da equação integral de contorno quando é realizada a

colocação no nó i . Os vetores coluna $\{\mathbf{U}\}^j$ e $\{\mathbf{T}\}^j$ são os deslocamentos e trações no elemento j (ver (3.35) e (3.36)).

A formulação (3.40) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} [\mathbf{c}]^i \{\mathbf{U}\}^i &= \sum_{j=1}^{NNO} \left[\int_{\Gamma_j} [\mathbf{G}^o]^T [\bar{\Phi}_q] d\Gamma \{\mathbf{T}\}^j \right] - \sum_{j=1}^{NNO} \left[\int_{\Gamma_j} [\mathbf{F}^o]^T [\bar{\Phi}_q] d\Gamma \{\mathbf{U}\}^j \right] - \\ &\quad - \sum_{n=1}^{NNF} \left[\int_{2\pi} [\mathbf{F}^f]^T [\mathbf{M}_q] R_n d\theta \{\mathbf{U}\}^n \right] + \\ &\quad + \sum_{n=1}^{NNP} \left[\int_{2\pi} [\mathbf{G}^\ominus]^T [\mathbf{M}_q] R_n d\theta \{\mathbf{T}\}^n \right] - \sum_{n=1}^{NNP} \left[\int_{2\pi} [\mathbf{F}^\ominus]^T [\mathbf{M}_q] R_n d\theta \{\mathbf{U}\}^n \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

onde NNO é o número de nós que tem o contorno externo da matriz, NNF e NNP é o número de nós de furos e de partículas na microestrutura, respectivamente. Por não existir, no caso de elemento descontínuo, um mesmo nó que pertença a distintos elementos, as integrais são definidas para o contorno do elemento ao qual pertence o nó. Nesta expressão, os vetores coluna $\{\mathbf{U}\}^j$ e $\{\mathbf{T}\}^j$ são os deslocamentos e trações no nó j . A definição $[\bar{\Phi}] = [\Phi][\mathbf{Q}]$ é utilizada para as funções de forma do elemento descontínuo e o sub-índice q ($q=1..3$) indica a ordem do nó j dentro do elemento correspondente. E i ainda indica o nó onde é realizada a colocação. Esta formulação pode ser escrita de forma mais compacta como:

$$\begin{aligned} [\mathbf{c}]^i \{\mathbf{U}\}^i &= \sum_{j=1}^{NNO} \left[[\mathbf{G}\bar{\Phi}]^{ij} \{\mathbf{T}\}^j \right] - \sum_{j=1}^{NNO} \left[[\widehat{\mathbf{F}\bar{\Phi}}]^{ij} \{\mathbf{U}\}^j \right] - \sum_{n=1}^{NNF} \left[[\widehat{\mathbf{F}^f\mathbf{M}}]^{in} \{\mathbf{U}\}^n \right] + \\ &\quad + \sum_{n=1}^{NNP} \left[[\mathbf{G}^\ominus\mathbf{M}]^{in} \{\mathbf{T}\}^n \right] - \sum_{n=1}^{NNP} \left[[\widehat{\mathbf{F}^\ominus\mathbf{M}}]^{in} \{\mathbf{U}\}^n \right] \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde valem as seguintes definições:

$$[\mathbf{G}\bar{\Phi}]^{ij} = \int_{\Gamma_j} \begin{bmatrix} G_{11}^{ij} & G_{12}^{ij} \\ G_{21}^{ij} & G_{22}^{ij} \end{bmatrix}_o^T \begin{bmatrix} \bar{\phi}_q & 0 \\ 0 & \bar{\phi}_q \end{bmatrix} d\Gamma \quad (3.43)$$

$$[\widehat{\mathbf{F}\bar{\Phi}}]^{ij} = \int_{\Gamma_j} \begin{bmatrix} F_{11}^{ij} & F_{12}^{ij} \\ F_{21}^{ij} & F_{22}^{ij} \end{bmatrix}_o^T \begin{bmatrix} \bar{\phi}_q & 0 \\ 0 & \bar{\phi}_q \end{bmatrix} d\Gamma \quad (3.44)$$

$$[\widehat{\mathbf{F}^f\mathbf{M}}]^{in} = \int_{2\pi} \begin{bmatrix} \widehat{F}_{11}^{in} & \widehat{F}_{12}^{in} \\ \widehat{F}_{21}^{in} & \widehat{F}_{22}^{in} \end{bmatrix}_f^T \begin{bmatrix} M_q & 0 \\ 0 & M_q \end{bmatrix} R_n d\theta \quad (3.45)$$

$$[\mathbf{G}^\ominus\mathbf{M}]^{in} = \int_{2\pi} \begin{bmatrix} \widehat{G}_{11}^{in} & \widehat{G}_{12}^{in} \\ \widehat{G}_{21}^{in} & \widehat{G}_{22}^{in} \end{bmatrix}_\ominus^T \begin{bmatrix} M_q & 0 \\ 0 & M_q \end{bmatrix} R_n d\theta \quad (3.46)$$

$$\widehat{[\mathbf{F}^\ominus \mathbf{M}]}^{in} = \int_{2\pi}^0 \begin{bmatrix} \widehat{F}_{11}^{in} & \widehat{F}_{12}^{in} \\ \widehat{F}_{21}^{in} & \widehat{F}_{22}^{in} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} M_q & 0 \\ 0 & M_q \end{bmatrix} R_n d\theta \quad (3.47)$$

Finalmente, chamando:

$$\begin{cases} [\mathbf{F}\bar{\Phi}]^{ij} = \widehat{[\mathbf{F}\bar{\Phi}]}^{ij} & \text{se } i \neq j \\ [\mathbf{F}\bar{\Phi}]^{ij} = \widehat{[\mathbf{F}\bar{\Phi}]}^{ij} + [\mathbf{C}]^i & \text{se } i = j \end{cases} \quad (3.48)$$

$$\begin{cases} [\mathbf{F}^f \mathbf{M}]^{in} = \widehat{[\mathbf{F}^f \mathbf{M}]}^{in} & \text{se } i \neq n \\ [\mathbf{F}^f \mathbf{M}]^{in} = \widehat{[\mathbf{F}^f \mathbf{M}]}^{in} + [\mathbf{C}]^i & \text{se } i = n \end{cases} \quad (3.49)$$

$$\begin{cases} [\mathbf{F}^\ominus \mathbf{M}]^{in} = \widehat{[\mathbf{F}^\ominus \mathbf{M}]}^{in} & \text{se } i \neq n \\ [\mathbf{F}^\ominus \mathbf{M}]^{in} = \widehat{[\mathbf{F}^\ominus \mathbf{M}]}^{in} + [\mathbf{C}]^i & \text{se } i = n \end{cases} \quad (3.50)$$

a equação de integral de contorno discretizada para o domínio da matriz é escrita na sua forma compacta como:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{NNO} \left[[\mathbf{F}\bar{\Phi}]^{ij} \{\mathbf{U}\}^j \right] + \sum_{n=1}^{NNF} \left[[\mathbf{F}^f \mathbf{M}]^{in} \{\mathbf{U}\}^n \right] + \sum_{n=1}^{NNP} \left[[\mathbf{F}^\ominus \mathbf{M}]^{in} \{\mathbf{U}\}^n \right] &= \sum_{j=1}^{NNO} \left[[\mathbf{G}\bar{\Phi}]^{ij} \{\mathbf{T}\}^j \right] + \\ &+ \sum_{n=1}^{NNP} \left[[\mathbf{G}^\ominus \mathbf{M}]^{in} \{\mathbf{T}\}^n \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

Agora, a equação de integral de contorno para cada um dos domínios da inclusão pode ser escrita como[†]:

$$\mathbf{c}_{ij}^p(\xi) u_i(\xi) = \int_0^{2\pi} \left[-\widehat{G}_{ij}^p(R, \theta, \xi) t_i^f(\theta) + \widehat{F}_{ij}^p(R, \theta, \xi) u_i^f(\theta) \right] R_n d\theta \quad (3.52)$$

a qual considera o mapeamento ao sistema local \widehat{x}_i . Inserindo as aproximações dos campos de tração e deslocamentos com suas respectivas funções de interpolação, a equação (3.52) em forma matricial tem a forma:

$$[\mathbf{C}^p]^i \{\mathbf{U}\}^i = \int_{2\pi}^0 [\mathbf{G}^p]^T [\mathbf{M}] R d\theta \{\mathbf{T}\} - \int_{2\pi}^0 [\mathbf{F}^p]^T [\mathbf{M}] R d\theta \{\mathbf{U}\} \quad (3.53)$$

onde os vetores coluna $\{\mathbf{U}\}$ e $\{\mathbf{T}\}$ são os deslocamentos e trações nodais no elemento de inclusão. Em contrapartida, a equação (3.53) pode ser expressa para valores nodais como:

[†] O sinal positivo no segundo termo da integral do lado da direita é devido a considerações no sinal da normal nas expressões (3.7)-(3.10).

$$[\mathbf{c}^p]^i \{\mathbf{U}\}^i = \sum_{n=1}^{NNP} \left[\int_{2\pi}^0 [\mathbf{G}^p]^T [\mathbf{M}_q] R d\theta \{\mathbf{T}\}^n \right] - \sum_{n=1}^{NNP} \left[\int_{2\pi}^0 [\mathbf{F}^p]^T [\mathbf{M}_q] R d\theta \{\mathbf{U}\}^n \right] \quad (3.54)$$

onde os vetores coluna $\{\mathbf{U}\}^n$ e $\{\mathbf{T}\}^n$ são os deslocamentos e trações no nó n e $[\mathbf{M}_q]$ é a submatriz de funções de interpolação correspondentes ao nó local q . Na notação compacta a expressão (3.54) é rescrita da forma:

$$[\mathbf{c}^p]^i \{\mathbf{U}\}^i = \sum_{n=1}^{NNP} \left[[\mathbf{G}^p \mathbf{M}]^{in} \{\mathbf{T}\}^n \right] - \sum_{n=1}^{NNP} \left[\widehat{[\mathbf{F}^p \mathbf{M}]}^{in} \{\mathbf{U}\}^n \right] \quad (3.55)$$

onde valem as seguintes definições:

$$[\mathbf{G}^p \mathbf{M}]^{in} = \int_{2\pi}^0 \begin{bmatrix} \widehat{G}_{11}^{in} & \widehat{G}_{12}^{in} \\ \widehat{G}_{21}^{in} & \widehat{G}_{22}^{in} \end{bmatrix}_p^T \begin{bmatrix} M_q & 0 \\ 0 & M_q \end{bmatrix} R_n d\theta \quad (3.56)$$

$$\widehat{[\mathbf{F}^p \mathbf{M}]}^{in} = \int_{2\pi}^0 \begin{bmatrix} \widehat{F}_{11}^{in} & \widehat{F}_{12}^{in} \\ \widehat{F}_{21}^{in} & \widehat{F}_{22}^{in} \end{bmatrix}_p^T \begin{bmatrix} M_q & 0 \\ 0 & M_q \end{bmatrix} R_n d\theta \quad (3.57)$$

Finalmente, chamando:

$$\begin{cases} [\mathbf{F}^p \mathbf{M}]^{ij} = \widehat{[\mathbf{F}^p \mathbf{M}]}^{ij} & \text{se } i \neq j \\ [\mathbf{F}^p \mathbf{M}]^{ij} = \widehat{[\mathbf{F}^p \mathbf{M}]}^{ij} + [\mathbf{c}]^i & \text{se } i = j \end{cases} \quad (3.58)$$

a equação de integral de contorno discretizada para o domínio da inclusão é escrita na sua forma compacta como:

$$\sum_{n=1}^{NNP} \left[\widehat{[\mathbf{F}^p \mathbf{M}]}^{in} \{\mathbf{U}\}^n \right] = \sum_{n=1}^{NNP} \left[[\mathbf{G}^p \mathbf{M}]^{in} \{\mathbf{T}\}^n \right] \quad (3.59)$$

Realizando-se o processo de colocação [Brebbia & Dominguez, 1992] sobre todos os pontos nodais do contorno, obtém-se o sistema de equações do problema de valor no contorno correspondente. Assim para o sistema de equações correspondente à matriz do material tem-se:

$$\begin{aligned} [\mathbf{F}^{oo}] \{\mathbf{U}^o\} + [\mathbf{F}^{op}] \{\mathbf{U}^p\} + [\mathbf{F}^{of}] \{\mathbf{U}^f\} &= [\mathbf{G}^{oo}] \{\mathbf{T}^o\} + [\mathbf{G}^{op}] \{\mathbf{T}^p\} \\ [\mathbf{F}^{po}] \{\mathbf{U}^o\} + [\mathbf{F}^{pp}] \{\mathbf{U}^p\} + [\mathbf{F}^{pf}] \{\mathbf{U}^f\} &= [\mathbf{G}^{po}] \{\mathbf{T}^o\} + [\mathbf{G}^{pp}] \{\mathbf{T}^p\} \\ [\mathbf{F}^{fo}] \{\mathbf{U}^o\} + [\mathbf{F}^{fp}] \{\mathbf{U}^p\} + [\mathbf{F}^{ff}] \{\mathbf{U}^f\} &= [\mathbf{G}^{fo}] \{\mathbf{T}^o\} + [\mathbf{G}^{fp}] \{\mathbf{T}^p\} \end{aligned} \quad (3.60)$$

e para cada uma das partículas, já com as condições de interface impostas, tem-se:

$$[\mathbf{F}^{pp}]\{\mathbf{U}^p\} = [\mathbf{G}^{pp}]\{\mathbf{T}^p\} \quad (3.61)$$

onde, nesta notação, o primeiro supra-índice denota o contorno onde se faz a colocação e o segundo o contorno sobre o qual se integra. O sistema global resultante fica:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}^{oo} & \mathbf{F}^{op} & \mathbf{F}^{of} \\ \mathbf{F}^{po} & \mathbf{F}^{pp} & \mathbf{F}^{pf} \\ \mathbf{F}^{fo} & \mathbf{F}^{fp} & \mathbf{F}^{ff} \\ 0 & \mathbf{F}^{pp} & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U}^o \\ \mathbf{U}^p \\ \mathbf{U}^f \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{oo} & \mathbf{G}^{op} \\ \mathbf{G}^{po} & \mathbf{G}^{pp} \\ \mathbf{G}^{fo} & \mathbf{G}^{fp} \\ 0 & \mathbf{G}^{pp} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{T}^o \\ \mathbf{T}^p \end{Bmatrix} \quad (3.62)$$

ou em forma simplificada:

$$[\mathbf{F}]\{\mathbf{U}\} = [\mathbf{G}]\{\mathbf{T}\} \quad (3.63)$$

com $[\mathbf{F}]$ e $[\mathbf{G}]$ sendo as chamadas matrizes de coeficientes do método dos elementos de contorno.

3.6. Solução do sistema de equações

Note-se que no sistema linear de equações (3.62) n_1 valores de deslocamentos e n_2 valores de tração são conhecidos no contorno exterior da matriz Γ_1 e Γ_2 ($\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma_o$), respectivamente, quando se leva em conta as condições de contorno. Agora, a quantidade de incógnitas sobre o contorno exterior da matriz é $n_1 + n_2 = 2NNO$. Assim, o sistema de equações fica com $2NNO + 4NNP + 2NNF$ incógnitas e $2NNO + 4NNP + 2NNF$ equações. Este sistema de equações pode ser rearranjado de forma que todas as incógnitas fiquem em um só vetor. Primeiramente, considerando-se que as trações na interface das partículas são desconhecidas, o sistema (3.62) é rearranjado como em (3.64). Após, ao se inserir as condições de contorno no sistema (3.64), rearranja-se as colunas do primeiro bloco coluna da matriz do lado esquerdo, e as colunas das matrizes do lado direito e o sistema de equações é escrito como em (3.65).

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}^{oo} & \mathbf{F}^{op} & \mathbf{F}^{of} & -\mathbf{G}^{op} \\ \mathbf{F}^{po} & \mathbf{F}^{pp} & \mathbf{F}^{pf} & -\mathbf{G}^{pp} \\ \mathbf{F}^{fo} & \mathbf{F}^{fp} & \mathbf{F}^{ff} & -\mathbf{G}^{fp} \\ 0 & \mathbf{F}^{pp} & 0 & -\mathbf{G}^{pp} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U}^o \\ \mathbf{U}^p \\ \mathbf{U}^f \\ \mathbf{T}^p \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{oo} \\ \mathbf{G}^{po} \\ \mathbf{G}^{fo} \\ 0 \end{bmatrix} \{\mathbf{T}^o\} \quad (3.64)$$

$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{A}}^{oo} & \mathbf{F}^{op} & \mathbf{F}^{of} & -\mathbf{G}^{op} \\ \bar{\mathbf{A}}^{po} & \mathbf{F}^{pp} & \mathbf{F}^{pf} & -\mathbf{G}^{pp} \\ \bar{\mathbf{A}}^{fo} & \mathbf{F}^{fp} & \mathbf{F}^{ff} & -\mathbf{G}^{fp} \\ 0 & \mathbf{F}^{pp} & 0 & -\mathbf{G}^{pp} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{x}^o \\ \mathbf{U}^p \\ \mathbf{U}^f \\ \mathbf{T}^p \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{B}}^{oo} \\ \bar{\mathbf{B}}^{po} \\ \bar{\mathbf{B}}^{fo} \\ 0 \end{bmatrix} \{\bar{\mathbf{x}}^o\} \quad (3.65)$$

Isto é,

$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{A}}^{oo} & \mathbf{C} \\ \mathbf{B} & \mathbf{D} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{x}^o \\ \mathbf{x}_a \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{b}_o \\ \mathbf{b}_a \end{Bmatrix} \quad (3.66)$$

ou, simplesmente

$$[\mathbf{A}]\{\mathbf{x}\} = \{\mathbf{b}\} \quad (3.67)$$

onde têm-se em conta as seguintes definições:

$$[\mathbf{C}] = [\mathbf{F}^{op} \quad \mathbf{F}^{of} \quad -\mathbf{G}^{op}], \quad [\mathbf{B}] = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{A}}^{po} \\ \bar{\mathbf{A}}^{fo} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{D}] = \begin{bmatrix} \mathbf{F}^{pp} & \mathbf{F}^{pf} & -\mathbf{G}^{pp} \\ \mathbf{F}^{fp} & \mathbf{F}^{ff} & -\mathbf{G}^{fp} \\ \mathbf{F}^{pp} & 0 & -\mathbf{G}^{pp} \end{bmatrix} \quad (3.68)$$

$$\{\mathbf{x}_a\} = \begin{Bmatrix} \mathbf{U}^p \\ \mathbf{U}^f \\ \mathbf{T}^p \end{Bmatrix}, \quad \{\mathbf{b}_o\} = [\bar{\mathbf{B}}^{oo}]\{\bar{\mathbf{x}}^o\}, \quad \{\mathbf{b}_a\} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{B}}^{po} \\ \bar{\mathbf{B}}^{fo} \\ 0 \end{bmatrix} \{\bar{\mathbf{x}}^o\}$$

É interessante notar que as incógnitas no vetor $\{\mathbf{x}\}$ agora contêm tanto deslocamentos como trações. Isto é consequência da *formulação mista* do método dos elementos de contorno e representa uma vantagem com respeito ao método dos elementos finitos quanto à precisão das variáveis duais.

Outra vantagem consiste no fato do sistema de equações a ser resolvido, em geral, ser menor do que os normalmente gerados pelo MEF, para uma mesma precisão. Cabe salientar que o MEC, ao contrário do MEF, apresenta a particularidade de a sua matriz $[\mathbf{A}]$ ser densamente cheia e não-simétrica.

Neste trabalho é escolhida a técnica de eliminação Gaussiana para resolver o sistema (3.67), o qual corresponde à bi-fatoração da matriz de coeficientes em termos de álgebra matricial. Outras possibilidades avaliadas são, por exemplo, métodos iterativos como Jacobi ou Gauss-Seidel, os quais são mais convenientes para grandes sistemas de equações, mas não se tem

demonstração de sua convergência em todos os casos [Beer & Watson, 1992, Banerjee, 1994]. Ao mesmo tempo, a regra de Cramer e inversão da matriz requerem mais tempo computacional quando comparados ao método de eliminação Gaussiana. Logo, esta técnica é implementada de forma simples e direta com uma linguagem de programação de alto nível [MATLAB, 2004].

Na modelagem do material, onde é necessário resolver o teste computacional do material (Capítulo 3), muitas vezes cada uma com distribuição distinta das inomogeneidades (Capítulo 5), ou na implementação de um algoritmo de otimização (Capítulo 6), a formulação do MEC apresenta uma vantagem especial. A matriz $[\bar{\mathbf{A}}^{oo}]$ não precisa ser recalculada e a mesma pode ser armazenada no disco rígido do computador (*out-of-core*) com as vantagens óbvias de rendimento computacional. Neste caso, é implementada uma *condensação estática* no sistema de equações (3.66). Assim, em primeiro lugar se pode resolver as incógnitas nos furos e partículas com a expressão (3.69) e, logo após, obter as incógnitas no contorno exterior da matriz com a expressão (3.70). Isto reduz os requerimentos de memória do computador já que esta metodologia implica, agora, em resolver dois sistemas de equações de menor tamanho. Note-se que a matriz $[\bar{\mathbf{A}}^{oo}]$ é a única que se garante ser sempre quadrada, podendo ser invertida uma só vez e armazenada já a mesma não muda com a redistribuição das inomogeneidades. A condensação de (3.67) resulta:

$$[\mathbf{D} - \mathbf{B}(\bar{\mathbf{A}}^{oo})^{-1}\mathbf{C}]\{\mathbf{x}_a\} = \{\mathbf{b}_a - \mathbf{B}(\bar{\mathbf{A}}^{oo})^{-1}\mathbf{b}_o\} \quad (3.69)$$

$$\{\mathbf{x}^o\} = [(\bar{\mathbf{A}}^{oo})^{-1}]\{\mathbf{b}_o - \mathbf{C}\mathbf{x}_a\} \quad (3.70)$$

3.7. Avaliação numérica das matrizes de coeficientes

A precisão do *Método dos Elementos de Contorno* para elastoestática é criticamente dependente da correta avaliação das integrais de contorno. Neste trabalho, as integrais da formulação de elementos de furo são avaliadas em forma numérica unidimensional utilizando a conhecida técnica padrão de quadratura de Gauss-Legendre por meio da expressão [Stroud, A. H. & Secrest D., 1966]:

$$\int_{-1}^1 \psi(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i \psi(x_i) \quad (3.71)$$

onde $\psi(x_i)$ é o valor do núcleo avaliado no ponto de Gauss x_i e w_i são os correspondentes pesos para os n pontos de Gauss. A utilização da equação (3.71) implica no mapeamento das

integrais (3.43), (3.44) e (3.45), para um espaço normalizado. As integrais das soluções fundamentais apresentam diferentes graus de singularidades não sendo conveniente aplicar diretamente a fórmula (3.71) quando o nó de colocação é um nó do elemento sobre o qual se está integrando. Isso ocorre porque a integração não é convergente ou apresenta convergência muito lenta. Nestes casos são utilizadas técnicas especiais de integração.

A definição de singularidade *fraca* ou *forte* depende não só do grau de singularidade do integrando mas também da dimensão do domínio de integração. Por exemplo, integrais *fracamente singulares* são integrais contendo núcleos logarítmicos em um domínio de integração unidimensional ou núcleo $\frac{1}{r}$ em um domínio de integração bidimensional, onde r é a distância do ponto de colocação ao ponto campo do elemento que está sendo considerado. Integrais *fortemente singulares* ou interpretadas no sentido de *valor principal de Cauchy* são aquelas que contêm núcleos de Cauchy $\frac{1}{r}$ ou $\frac{1}{r^2}$, em domínios de integração unidimensionais e bidimensionais, respectivamente. As integrais chamadas *hipersingulares*, ou integrais de *Hadamard*, são integrais contendo núcleos $\frac{1}{r^v}$, onde v é maior que a dimensão do domínio de integração. Adicionalmente, se denomina integrais *quase-singulares* aquelas cujo pólo singular não se encontra dentro do domínio de integração, mas suficientemente próximo deste ao ponto de dificultar sua integração por quadratura gaussiana padrão, devido ao alto gradiente do integrando nas vizinhanças do ponto singular. Observando-se os tensores fundamentais G_{ij} e F_{ij} (equações (2.34) e (2.35), respectivamente), é possível inferir sobre os tipos de singularidades presentes nas integrais (3.43)-(3.47).

A integral (3.43) envolve integrais fracamente singulares e as mesmas são calculadas com a conhecida técnica de *transformação de coordenadas* proposta por Telles, 1987. Em suma, este procedimento é uma transformação de coordenadas não-linear cujo Jacobiano se anula no ponto singular, acelerando significativamente a convergência em relação à quadratura de Gauss-Legendre padrão.

A integral (3.44) envolve integrais fortemente singulares as quais são calculadas de forma indireta com a técnica de *Translação de corpo rígido* [Brebbia & Dominguez, 1992]. Esta técnica consiste em assumir um deslocamento de corpo rígido unitário numa direção do sistema de coordenadas cartesiana. Neste caso, as trações devem ser nulas e, portanto, o sistema (3.63) assume a forma:

$$[\mathbf{F}]\{\mathbf{I}\}^q = \mathbf{0} \quad (3.72)$$

onde $\{\mathbf{I}\}^q$ é o vetor de deslocamentos unitários na direção q . A parti desta condição podem ser calculadas as matrizes fortemente singulares da forma:

$$[\mathbf{F}]^{ii} = - \sum_{j=1}^{NNO+NNF+2NNP} [\mathbf{F}]^{ij} \quad \text{para } j \neq i \quad (3.73)$$

A integração na matriz (3.45) envolve um grau forte de singularidade. Neste trabalho propõe-se utilizar o método de integração direta [Guiggiani, 1998] a qual é detalhada na seção 3.7.1.

3.7.1. Integração direta das integrais fortemente singulares do elemento de furo

A técnica de translação de corpo rígido não é utilizada na integração de elementos de furo e elementos de partícula. Isso é devido a que a mesma é imprecisa na integração de elementos curvilíneos [Banerjee, 1994; Guiggiani & Casalini, 1989]. No trabalho de Henry & Banerjee em 1991 é proposto o método de colocação por fora do domínio (domínio fictício) para se calcular as integrais singulares do elemento de furo. Neste trabalho a integração do núcleo fortemente singular é realizada pelo método de integração direta [Guiggiani, 1998].

Seja o contorno do elemento de furo ou inclusão Γ_n mapeado para um domínio normalizado $\eta \in [-1, +1]$ e $p = \eta(\xi)$ a imagem do ponto fonte no domínio η (ver Figura 3.4). A forma geral de uma integral forte no MEC pode ser escrita da forma:

$$I_{ij} = \int_{\Gamma} K_{ij}(x, \xi) d\Gamma = \int_{-1}^{+1} F_{ij}[x(\eta), \xi(p)] \phi_a(\eta) J(\eta) d\eta \quad (3.74)$$

onde ϕ_a são as funções de forma associada ao nó a e J é o Jacobiano do mapeamento geométrico. Em consequência, o integrando K_{ij} já leva em conta a regra de interpolação usada para as variáveis físicas no referido elemento de contorno. O ponto chave no método direto é expandir assintoticamente o integrando K_{ij} usando séries de Laurent na vizinhança da imagem do ponto fonte [Guiggiani, 1998]:

$$\mathbf{K}(\eta, p) = \frac{\mathbf{F}_{-2}}{\rho^2} + \frac{\mathbf{F}_{-1}}{\rho} + O(1) \quad (3.75)$$

onde $\rho = \eta - p$ é a imagem de r no domínio normalizado. A expansão \mathbf{F}_{-1} leva em conta contribuição fortemente singular do integrando, em quanto que a expansão \mathbf{F}_{-2} leva em conta contribuição hiper-singular e assim por diante. Singularidades de ordem mais alta podem ser contempladas aumentando-se a quantidade de termos na expansão. Logo, um integrando regular ou fracamente singular tem $\mathbf{F}_{-1} = \mathbf{F}_{-2} = 0$. A expansão \mathbf{F}_{-2} é zero no caso de integrando fortemente singulares, mas não no caso de integrandos hipersingulares. Detalhes sobre a formulação do método de integração direta podem ser encontrados em [Guiggiani & Casalini

1987, Guiggiani & Gigante 1990, Guiggiani et al. 1992, Guiggiani 1998]. A fórmula final do método para pólos singulares não compartilhados por mais de um elemento é dada por:

$$I = \int_{-1}^{+1} \left[\mathbf{K}(\eta, p) - \left(\frac{\mathbf{F}_{-1}}{\rho} + \frac{\mathbf{F}_{-2}}{\rho^2} \right) \right] d\eta + \mathbf{F}_{-1}(\eta) \ln \left| \frac{1-\eta}{-1-\eta} \right| + \mathbf{F}_{-2}(\eta) \left(-\frac{1}{1-\eta} + \frac{1}{-1-\eta} \right) \quad (3.76)$$

Note-se que nesta expressão a parte singular no integrando é subtraída e a integral resultante é regular. Os outros dois termos correspondem à integração analítica da singularidade a través de um criterioso processo de limite [Guiggiani, 1998]. Logo, a integral singular é obtida como a soma entre uma integral regular e mais dois termos escalares avaliados no pólo. A dedução da expressão (3.76) não possui qualquer aproximação em relação à sua forma original dada pela equação (3.74). Assim, a aplicação genérica do método direto implica tão somente no conhecimento das expansões \mathbf{F}_{-1} e \mathbf{F}_{-2} da equação (3.76).

No caso de elasticidade em duas dimensões Marczak & Creus em 2002 derivaram uma expressão geral para os termos \mathbf{F}_{-1} e \mathbf{F}_{-2} obtendo:

$$F_{-1}^{\alpha\beta} = -\frac{(1-2\nu)}{4\pi(1-\nu)} \left[n_\alpha(\xi) t_\beta(\xi) - n_\beta(\xi) t_\alpha(\xi) \right] \phi_\alpha(p) \\ F_{-2}^{\alpha\beta} = 0 \quad (3.77)$$

onde n_α e t_α são os vetores normais e tangenciais no ponto ξ respectivamente. É interessante notar em (3.77) que somente os termos fora da diagonal são fortemente singulares enquanto que nos termos da diagonal ($\alpha = \beta$) $\mathbf{F}_{-1} = \mathbf{F}_{-2} = 0$ e a integral é regular, ao contrário do que possa sugerir as expressões (3.7) e (3.10). Isto é, a simples presença no denominador de r em uma solução fundamental não deve ser tomada como condição suficiente para caracterizar um comportamento singular [Marczak & Creus, 2002]. Também pode ser observado de (3.77) que é necessário levar em conta o comportamento assintótico de todo o integrando, incluindo a função de interpolação e o Jacobiano do mapeamento [Marczak & Creus, 2002]. No caso particular que está sendo estudado, as funções de interpolação usadas para aproximar o campo de deslocamentos no furo ou na inclusão possuem valor unitário no nó e zero nos outros. Isto significa que tão somente são fortemente singulares as integrais que contêm as funções de interpolação que não valem zero na imagem do nó em que é realizada a colocação.

Para achar as funções \mathbf{F}_{-1} e \mathbf{F}_{-2} para o elemento furo ou inclusão são necessárias algumas relações úteis dos vetores normais e tangenciais [Marczak & Creus, 2002]:

$$n_i = \frac{J_i}{J} \quad (3.78)$$

$$t_i = \frac{A_i}{J} \quad (3.79)$$

O Jacobiano da transformação pode ser expandindo em séries de Taylor como:

$$J = \sqrt{\frac{dx_\alpha}{d\eta} \frac{dx_\alpha}{d\eta}} = \sqrt{J_1(\eta)^2 + J_2(\eta)^2} \quad (3.80)$$

onde

$$J_1 = A_2 + 2B_2\rho + O(\rho^2) \quad (3.81)$$

$$J_2 = -A_1 - 2B_1\rho + O(\rho^2) \quad (3.82)$$

sendo

$$A_i = \left. \frac{dx_i}{d\eta} \right|_{\eta=p} \quad (3.83)$$

$$B_i = \left. \frac{1}{2} \frac{d^2x_i}{d\eta^2} \right|_{\eta=p} \quad (3.84)$$

Tanto no elemento de furo como na inclusão o contorno do elemento Γ_n é mapeado a um domínio normalizado $\eta \in [-1, +1]$ com a transformação (3.85) onde é escolhido $\lambda = \frac{1}{3}\pi$.

$$\lambda + \theta = (\eta + 1)\pi \quad (3.85)$$

Note-se que δ poderia ter qualquer valor, aliás, se este valor é zerado acontece uma situação particular quando o ponto de colocação é no nó 1 (ver Figura 3.4). Este ponto apresenta singularidade dupla, em $\eta = -1$ e $\eta = 1$ correspondente ao ângulo $\theta = 0 \equiv 2\pi$ respectivamente. O método de avaliação direta proposto não é capaz de eliminar as duas singularidades simultaneamente e para evitar esta dificuldade é proposto este mapeamento, com $\lambda = \frac{1}{3}\pi$, onde os pólos são deslocados um $\frac{\lambda}{\pi}$.

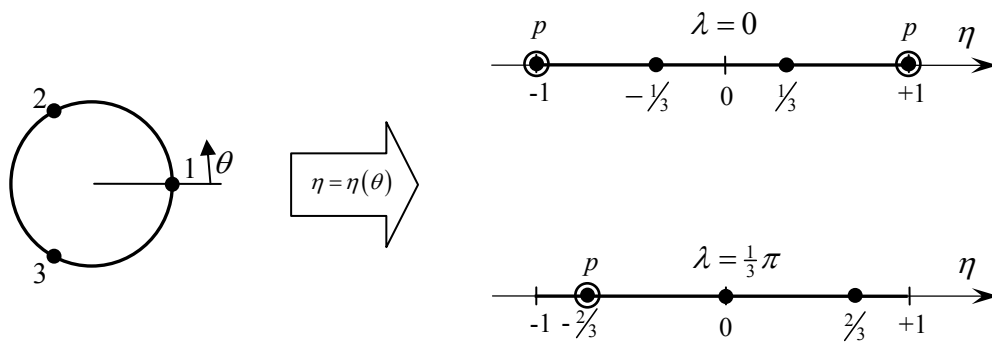


Figura 3.4 – Mapeamento do elemento de furo ao espaço normalizado η com $\lambda = 0$ e com $\lambda = \frac{1}{3}\pi$.

Tendo em conta este mapeamento e a geometria no sistema \hat{x}_i , as expressões anteriormente apresentadas são particularizadas na forma:

$$A_1 = \left. \frac{d\hat{x}_1}{d\theta} \frac{d\theta}{d\eta} \right|_{\eta=p} = -R\pi \operatorname{sen} \theta \Big|_{\eta=p} \quad (3.86)$$

$$A_2 = \left. \frac{d\hat{x}_2}{d\theta} \frac{d\theta}{d\eta} \right|_{\eta=p} = R\pi \cos \theta \Big|_{\eta=p} \quad (3.87)$$

$$B_1 = B_2 = 0 \quad (3.88)$$

$$J_1 = R\pi \cos \theta \quad (3.89)$$

$$J_2 = R\pi \operatorname{sen} \theta \quad (3.90)$$

desprezando-se os termos de ordem superior

$$J = \sqrt{(R\pi \cos \theta)^2 + (R\pi \operatorname{sen} \theta)^2} = R\pi \quad (3.91)$$

e com estas relações obtém-se

$$\begin{cases} t_1 = -\operatorname{sen} \theta \\ t_2 = \cos \theta \end{cases} \quad (3.92)$$

$$\begin{cases} n_1 = \cos \theta \\ n_2 = \operatorname{sen} \theta \end{cases} \quad (3.93)$$

Finalmente os termos na expansão de Laurent (3.77) que regularizam as integrais para os elementos de furo e inclusão são:

$$F_{-1}^{12} = -\frac{(1-2\nu)}{4\pi(1-\nu)} M_a(p) \quad (3.94)$$

$$F_{-1}^{21} = \frac{(1-2\nu)}{4\pi(1-\nu)} M_a(p) \quad (3.95)$$

Vale a pena notar que o mapeio (3.85) usado em esta dedução implica que a direção de viagem sobre o contorno Γ_n é anti-horária (correspondente à normal externa do domínio da inclusão). Entretanto, as expressões (3.94) e (3.95) são as mesmas se a direção de viagem sobre o contorno fosse horária (correspondente à normal externa do domínio da matriz do material). Note-se também, que o método de integração direta permite somente a regularização da contribuição fortemente singular, e a visualização dos integrandos permite verificar que todas as integrais são regulares. Na seção 4.8 são examinados alguns exemplos de estes integrandos e é estudada a performance da integração proposta. Mostra-se que a integral regularizada pode ser calculada com a técnica padrão de quadratura de Gauss-Legendre. Também será mostrado que não é adequado utilizar integração numérica com o método de colocação no contorno fictício.

3.8. Experimentos numéricos com a integração do elemento de furo

A fim de prover uma verificação da eficiência da integração direta implementada para o elemento de furo proposto são aqui apresentados alguns experimentos numéricos. Nas Figura 3.5 e Figura 3.6 é mostrado o comportamento singular das funções $F_{12}M_1J$ e $F_{21}M_1J$ no espaço normalizado η quando a colocação é feita sobre as coordenadas $\hat{\xi}_1 = R$ e $\hat{\xi}_2 = 0$. Nestas figuras pode-se ver o efeito da regularização dos integrandos e ao mesmo tempo é apresentada a expansão assintótica de Laurent correspondente. A integral regular do método de integração direta é calculada com a quadratura padrão de Gauss – Legendre com K pontos. A efetividade da técnica de integração proposta pode ser examinada na Tabela 3.1 onde se apresentam resultados para todas as integrais singulares presentes no elemento de furo.

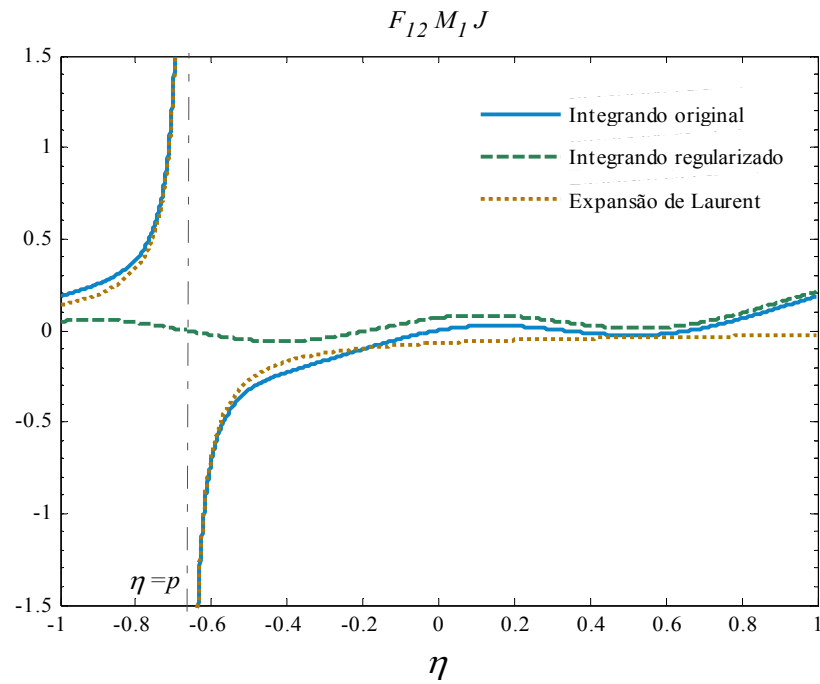


Figura 3.5 - Comportamento de $F_{12} M_1 J$ no espaço normalizado η quando a colocação é feita nas coordenadas $\widehat{\xi}_1 = R$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$.

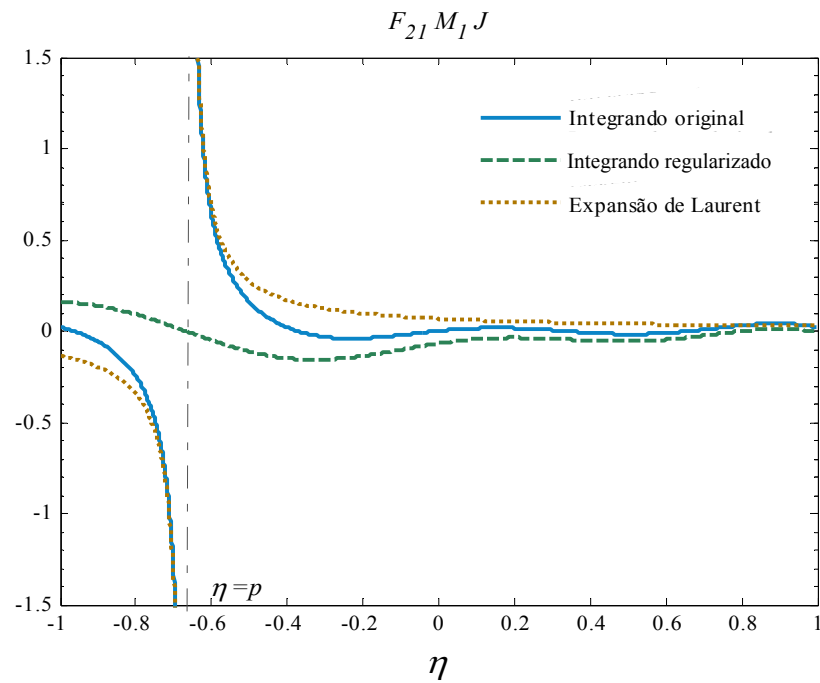


Figura 3.6 - Comportamento de $F_{21} M_1 J$ no espaço normalizado η quando a colocação é feita nas coordenadas $\widehat{\xi}_1 = R$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$.

K	$\int_{-1}^{+1} F_{12}M_1J d\eta$	$\int_{-1}^{+1} F_{21}M_1J d\eta$	$\int_{-1}^{+1} F_{12}M_2J d\eta$	$\int_{-1}^{+1} F_{21}M_2J d\eta$	$\int_{-1}^{+1} F_{12}M_3J d\eta$	$\int_{-1}^{+1} F_{21}M_3J d\eta$
2	-0,0906830057	-0,0420223859	-0,0128691349	-0,0128691349	-0,1699279990	-0,2185886188
4	-0,0100886758	-0,0120556646	0,0954351670	0,0954351670	-0,1134493895	-0,1114824007
6	-0,0001553394	-0,0001378292	0,1029515549	0,1029515549	-0,1032361530	-0,1032536637
8	-0,0000007553	-0,0000000219	0,1030978737	0,1030978737	-0,1030982842	-0,1030990176
10	-0,0000000153	0,0000000145	0,1030982620	0,1030982620	-0,1030982477	-0,1030982776
16	0	0	0,1030982623	0,1030982623	-0,1030982622	-0,1030982624

Tabela 3.1 - Resultados das integrais singulares do elemento de furo com o método de integração direta. A variável K refere-se ao número de pontos de Gauss – Legendre.

O método de colocação no contorno fictício proposto por Henry & Banerjee em 1991 e Banerjee & Henry em 1992 para calcular a integral singular deste mesmo elemento de furo ou inclusão é analisado a seguir. Na Figura 3.7 apresenta-se o integrando $F_{12}M_1J$ no espaço normalizado η onde a colocação é realizada na coordenada $\hat{\xi}_1$ e $\hat{\xi}_2 = 0$. Note-se que esta integral é singular quando $\hat{\xi}_1 = R$ (ver Figura 3.5). Na Figura 3.7 pode-se ver que com a colocação no contorno fictício a integral é regular, embora a mesma seja menos suave à medida que o ponto de colocação no contorno fictício se aproxima do elemento de furo. Esta falta de suavidade é observada também nas Figura 3.8 e Figura 3.9 e se traduz numa dificuldade na integração numérica. A Tabela 3.2 apresenta as integrais $\int_{-1}^{+1} F_{12}M_1J d\eta$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\hat{\xi}_1$ e $\hat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha **M** corresponde à integração obtida com o programa Maple, 2003 o qual utiliza técnicas de integração mais eficientes. Estes resultados revelam que a quadratura de Gauss – Legendre é inadequada para esta integral quando se utiliza a técnica de colocação por fora do domínio. Cabe mencionar que no trabalho de Henry & Banerjee, 1991 a colocação é realizada a um comprimento de 0,25 do raio do furo fora do domínio ($\hat{\xi}_1 = 0,75R$, $\hat{\xi}_2 = 0$).

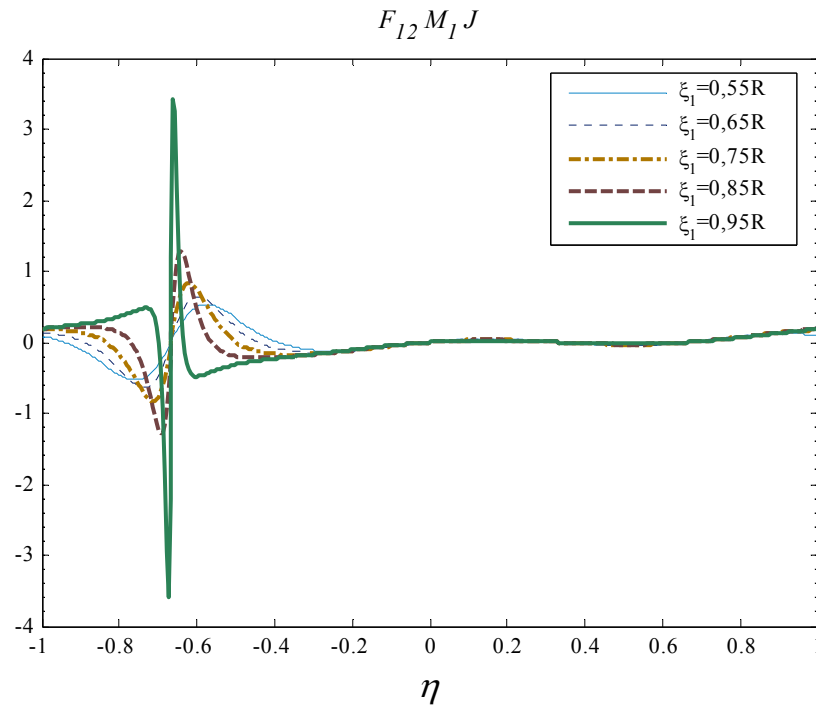


Figura 3.7 - Integrando $F_{12} M_1 J$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$.

$\int_{-1}^{+1} F_{12} M_1 J d\eta$					
K	$\widehat{\xi}_1 = 0,55$	$\widehat{\xi}_1 = 0,65$	$\widehat{\xi}_1 = 0,75$	$\widehat{\xi}_1 = 0,85$	$\widehat{\xi}_1 = 0,95$
2	0,4996274853	0,5735158877	0,5068130807	0,1009152246	-0,4689180337
4	-0,1002672434	-0,0832486298	-0,0466133316	-0,00851649	0,0132779673
6	-0,0069769269	0,0182694658	0,0592049376	0,1673348176	1,1397498933
8	0,0270281486	0,0223166112	0,0089186448	-0,0040539271	-0,00923141485
10	-0,0255006629	-0,0466853398	-0,0868154614	-0,2072715589	-0,674246733
16	0,0000000008	-0,000000211	-0,0000754613	-0,0065360969	-0,1558334228
20	0,0004056231	0,0047222951	0,0308300392	0,1206006627	0,0536906454
24	0,0000122533	0,0008807299	0,0118965367	0,0844295122	0,1942318955
32	-0,0000022819	-0,0000467012	-0,0000028392	0,0097769609	0,1747858787
40	-0,000000354	-0,0000073850	-0,0004063562	-0,010461151	-0,1797103976
48	0,0000000008	0,0000000008	-0,0000754613	-0,0065360969	-0,1558334228
64	0	0,0000000001	0,0000016898	0,0003037949	0,0094003974
M	0	0	0	0	0

Tabela 3.2 - Resultados das integrais $\int_{-1}^{+1} F_{12} M_1 J d\eta$ para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha M corresponde à integração obtida com o programa Maple.

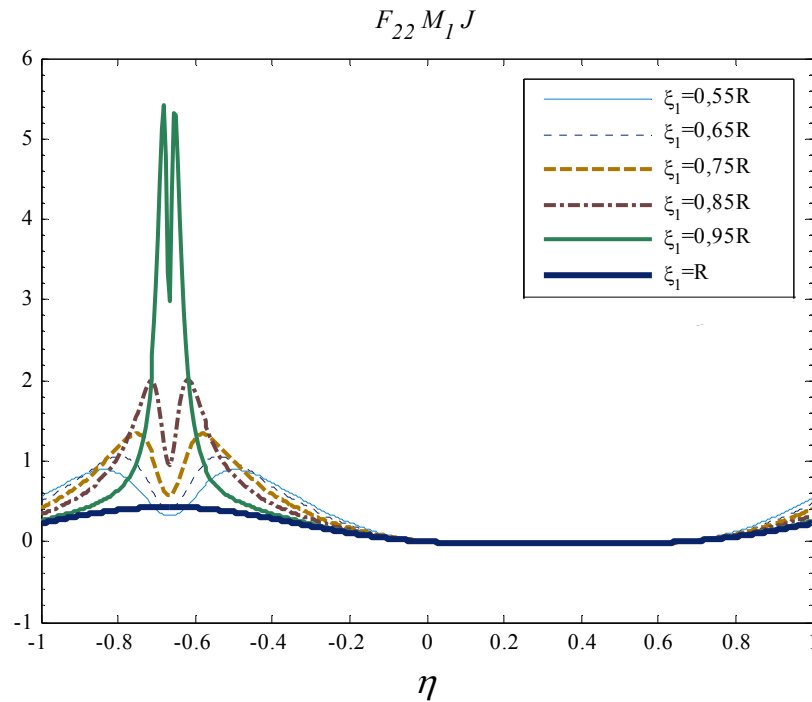


Figura 3.8 - Integrando $F_{22}M_1J$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$.

$\int_{-1}^{+1} F_{22}M_1J d\eta$						
K	$\widehat{\xi}_1 = 0,55R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,65R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,75R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,85R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,95R$	$\widehat{\xi}_1 = R$
2	0,6544569211	0,9415202291	1,3124938877	1,500233656	0,9272763187	0,3927711795
4	0,7157020404	0,6803904348	0,6016911575	0,4845903435	0,3512584301	0,2873830534
6	0,4358738207	0,4334965656	0,4513181780	0,5567690033	1,5722486092	0,2857990867
8	0,6485691854	0,7280318858	0,7570033652	0,6596240653	0,4230954335	0,2857145100
10	0,5548558685	0,5598308865	0,5510520606	0,5941668872	1,4174691308	0,2857142859
16	0,5821428582	0,6273813806	0,6726505367	0,7180423354	0,7849876626	0,2857142857
20	0,5817657263	0,6259344381	0,6717446408	0,7390321328	0,7704249468	0,2857142857
24	0,5820524686	0,6263580410	0,6662137031	0,6989334415	0,8793821755	0,2857142857
32	0,5821419504	0,6272907099	0,6701842342	0,6870751694	0,6738938507	0,2857142857
40	0,5821429032	0,6273809527	0,6723746529	0,7071040271	0,7007284870	0,2857142857
48	0,5821428582	0,6273813806	0,6726505367	0,7180423354	0,7849876626	0,2857142857
64	0,5821428572	0,6273809520	0,6726204717	0,7186825791	0,8193213854	0,2857142857
M	0,5821428572	0,6273809525	0,6726190477	0,7178571430	0,7630952382	0,2857142858

Tabela 3.3 - Resultados das integrais $\int_{-1}^{+1} F_{22}M_1J d\eta$ para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha M corresponde à integração obtida com o programa Maple.

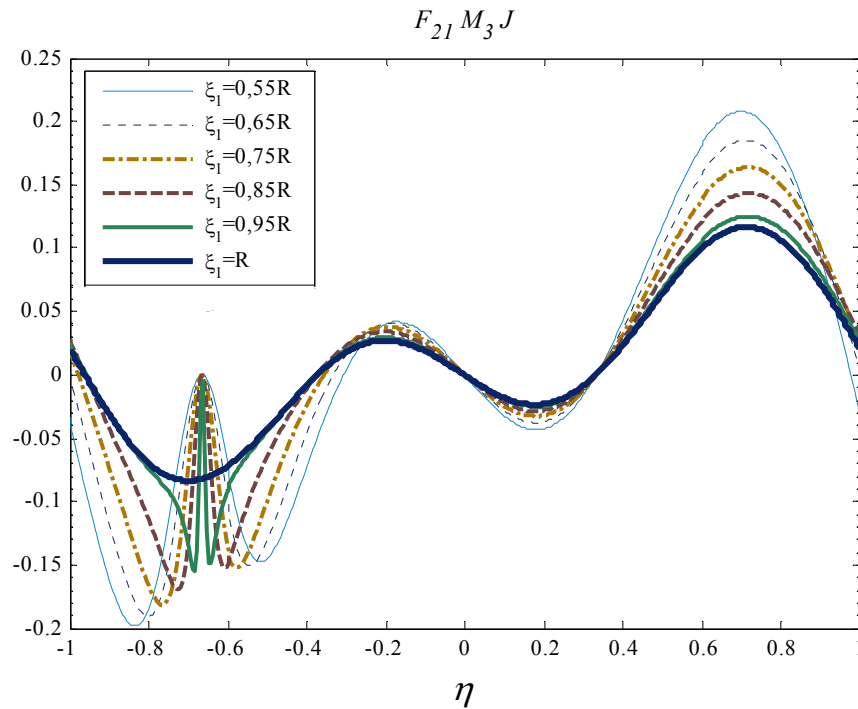


Figura 3.9 - Integrando $F_{21}M_3J$ no espaço normalizado η para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$.

$\int_{-1}^{+1} F_{21}M_3J d\eta$						
K	$\widehat{\xi}_1 = 0,55R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,65R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,75R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,85R$	$\widehat{\xi}_1 = 0,95R$	$\widehat{\xi}_1 = R$
2	0,0633211216	0,0132709361	-0,0234557166	-0,0171949043	0,0223215849	0,0255811226
4	-0,0311281851	-0,0085957102	0,01154883782	0,0238127932	0,0242360241	0,0202787449
6	0,0590163752	0,0649659139	0,0658870503	0,0607482422	0,0380897305	0,0206196647
8	-0,0110969181	-0,0130757548	-0,0043853567	0,0132490408	0,0232252332	0,0206196524
10	0,0211723316	0,0313640255	0,0399001428	0,04005423308	0,0138006206	0,0206196524
16	0,0113408084	0,0134026753	0,0154602646	0,01752666859	0,0188876608	0,0206196524
20	0,0114449175	0,0136551751	0,0153835071	0,01516896084	0,0169477101	0,0206196524
24	0,0113696751	0,0136340597	0,0164836958	0,01968690216	0,0163524927	0,0206196524
32	0,0113412171	0,0134260660	0,0158839898	0,02083706671	0,0267519208	0,0206196524
40	0,0113407956	0,0134029664	0,0155107639	0,01867844978	0,0238278769	0,0206196524
48	0,0113408084	0,0134026757	0,01546026469	0,01752666859	0,0188876608	0,0206196524
64	0,0113408088	0,0134027741	0,0154644804	0,017443313	0,0170441945	0,0206196524
M	0,0113408088	0,01340277411	0,01546473936	0,01752670461	0,0195886698	0,0206196524

Tabela 3.4 - Resultados das integrais $\int_{-1}^{+1} F_{21}M_3J d\eta$ para o elemento de furo com colocação em $\widehat{\xi}_1$ e $\widehat{\xi}_2 = 0$ pelo método de integração de quadratura de Gauss – Legendre padrão com K pontos. A linha M corresponde à integração obtida com o programa Maple.

Como é deduzido a partir do método direto na seção anterior, o integrando $F_{22}M_1J$ é regular por ser um termo da diagonal e o integrando $F_{21}M_3J$ é também regular por valer zero a função de forma M_3 ao ser avaliada sobre o pólo (ver equação (3.77)). As Figura 3.8 e Figura 3.9 mostram que a técnica de colocação no contorno fictício torna os núcleos menos suaves, sendo mais difíceis de serem integrados numericamente, mesmo sendo regulares. Segundo os resultados apresentados nas Tabela 3.3 e Tabela 3.4, enquanto estas integrais são facilmente calculadas com 10 pontos de Gauss, em muitos casos 64 pontos não são suficientes quando se faz colocação no domínio fictício.

3.9. Exemplos de verificação

Com o objetivo de validar a formulação desenvolvida e verificar preliminarmente a qualidade dos resultados na solução das variáveis envolvidas, a presente seção ilustra alguns problemas simples resolvidos com a formulação proposta.

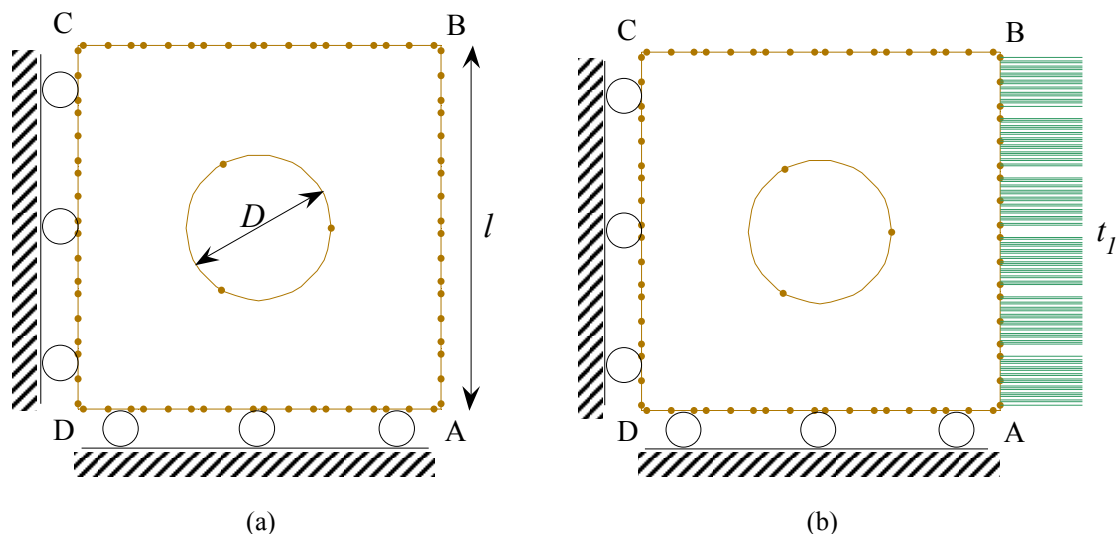


Figura 3.10 - Esquema do problema de uma placa quadrada com um furo centrado no meio. Carregamento uniforme na direção x_1 sobre a face AB e simplesmente apoiada nas faces CD e DA.

O problema de uma placa quadrada de lado l com um furo centrado de diâmetro D é resolvido como ilustrado na Figura 3.10-(a). As condições de contorno do problema são de tração uniforme na direção x_1 sobre a face AB (ver Figura 3.10-(b)), a face BC se encontra livre de trações e as faces CD e DA estão simplesmente apoiadas. É considerada a hipótese de EPT. A Figura 3.11 mostra uma amplificação das configurações deformadas com o elemento de furo e com o furo discretizado com 16 elementos quadráticos descontínuos. As Figuras 3.12, 3.13 e 3.14 apresentam os resultados obtidos no campo de deslocamentos no contorno da placa para o

caso em que a relação D/l vale 0,4. Os mesmos são apresentados junto com os obtidos utilizando o MEC convencional com o furo discretizado utilizando 16 elementos quadráticos descontinuos.

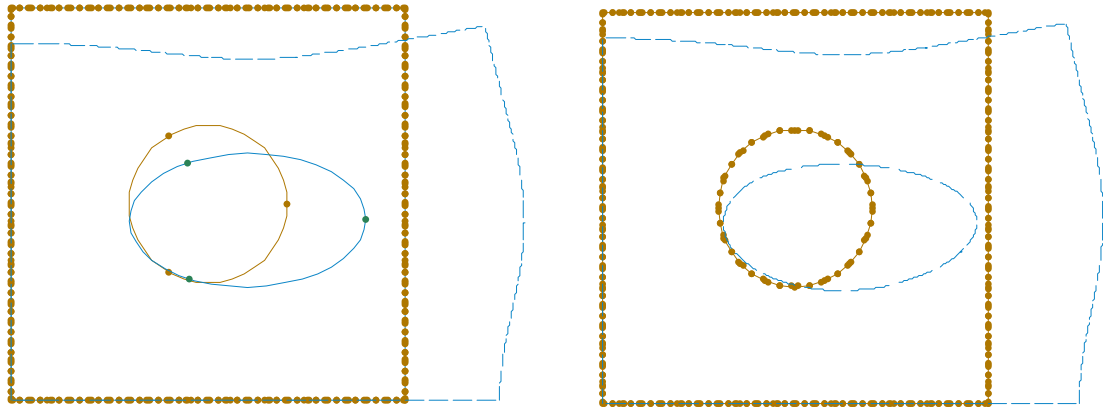


Figura 3.11 - Configuração deformada da placa com furo de relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme na direção x_1 sobre o contorno AB. Elemento de furo (esquerda) e furo discretizado com 16 elementos quadráticos (direita).

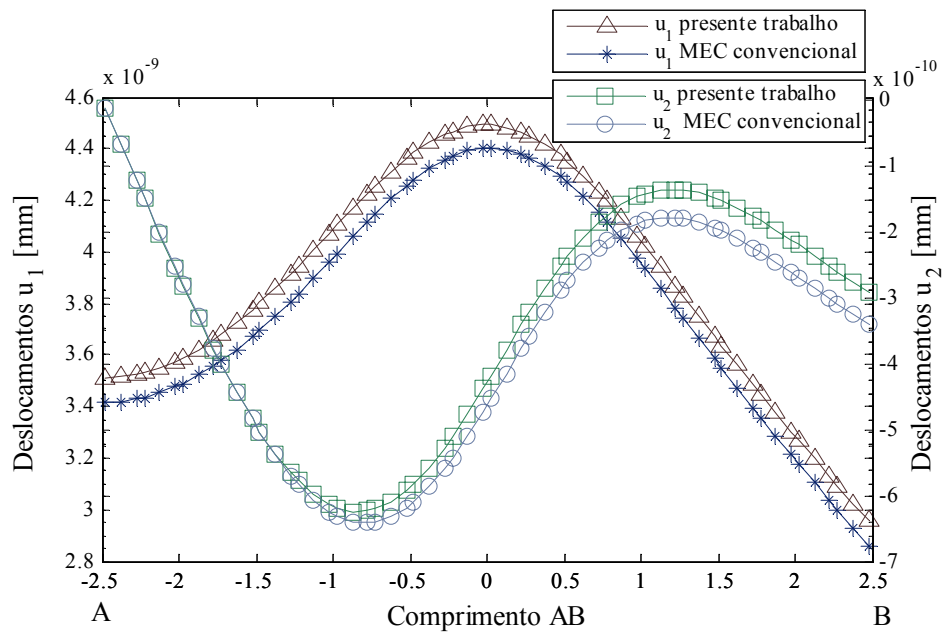


Figura 3.12 - Deslocamentos no contorno AB no caso de uma placa de relação $D/l=0,4$ com carregamento uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. Resultados do MEC com o furo discretizado com 16 elementos e o elemento de furo.

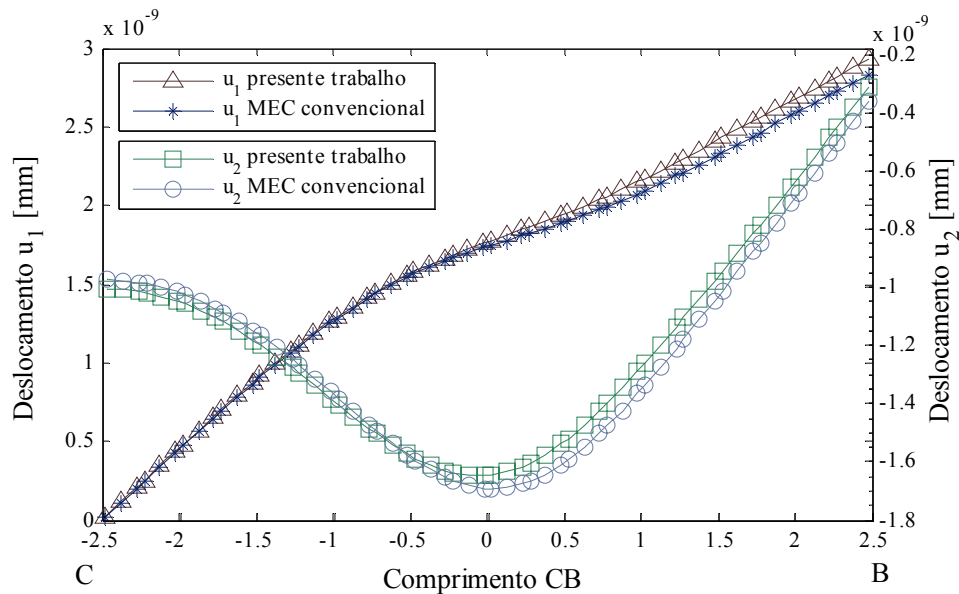


Figura 3.13 - Deslocamentos no contorno CB no caso de uma placa de relação $D/l = 0,4$ com carregamento uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. Resultados do MEC com o furo discretizado com 16 elementos e o elemento de furo.

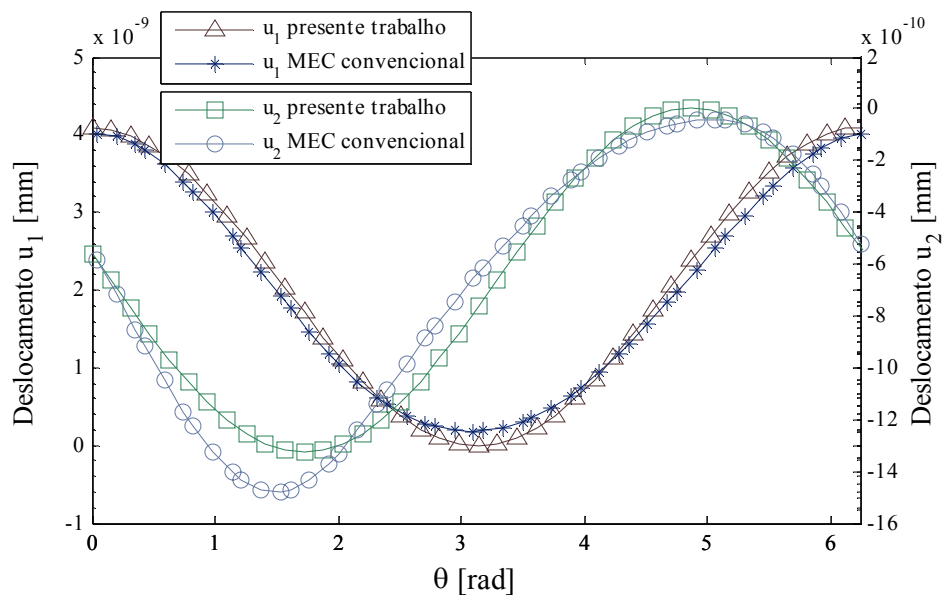


Figura 3.14 - Deslocamentos no contorno do furo no caso de uma placa de relação $D/l = 0,4$ com carregamento uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. Resultados do MEC com o furo discretizado com 16 elementos e o elemento de furo.

Este exemplo é resolvido para relações D/l de 0,2; 0,4; 0,6 e 0,8. Como medida de erro é considerado o parâmetro δ o qual é definido como o deslocamento máximo (mínimo) no contorno AB (BC) na direção x_1 (x_2) obtido com o elemento de furo ($u_{1\max}$, $u_{2\min}$), sobre o deslocamento máximo obtido com o MEC convencional utilizando 16 elementos quadráticos ($u_{1\max\text{ MEC}}$, $u_{2\min\text{ MEC}}$). As Figura 3.15 e Figura 3.16 mostram os resultados correspondentes.

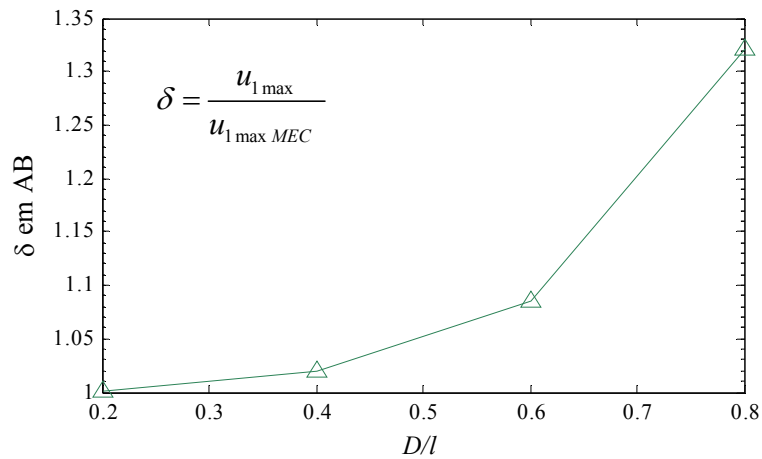


Figura 3.15 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_1 da aresta AB em função da relação D/l .

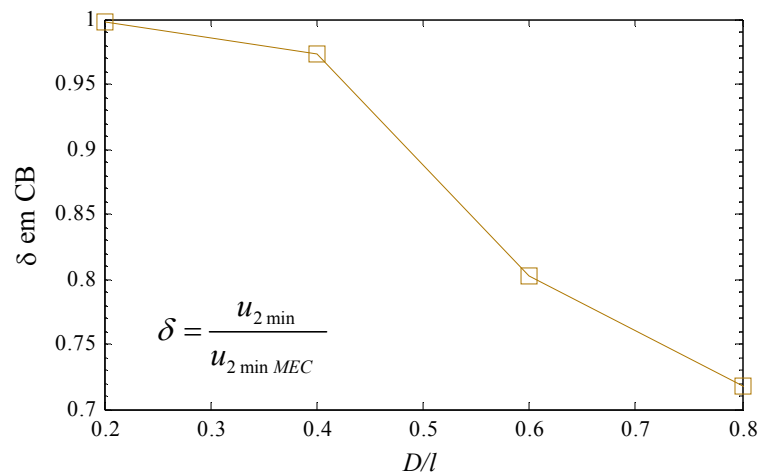


Figura 3.16 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_2 da aresta BC em função da relação D/l .

Visando analisar a resposta do elemento de furo em diferentes direções são considerados dois exemplos simétricos. A Figura 3.17 apresenta as configurações deformadas para uma placa com furo de relação $D/l = 0,4$ com carregamento uniforme na direção do eixo x_2 sobre o contorno BC e com condição de engaste no contorno DA (esquerda); e carregamento uniforme na direção do eixo x_1 sobre o contorno AB e condição de engaste no contorno CD. A diferença no deslocamento máximo na direção da carga nos pontos “a” e “b” é de 4,3%.

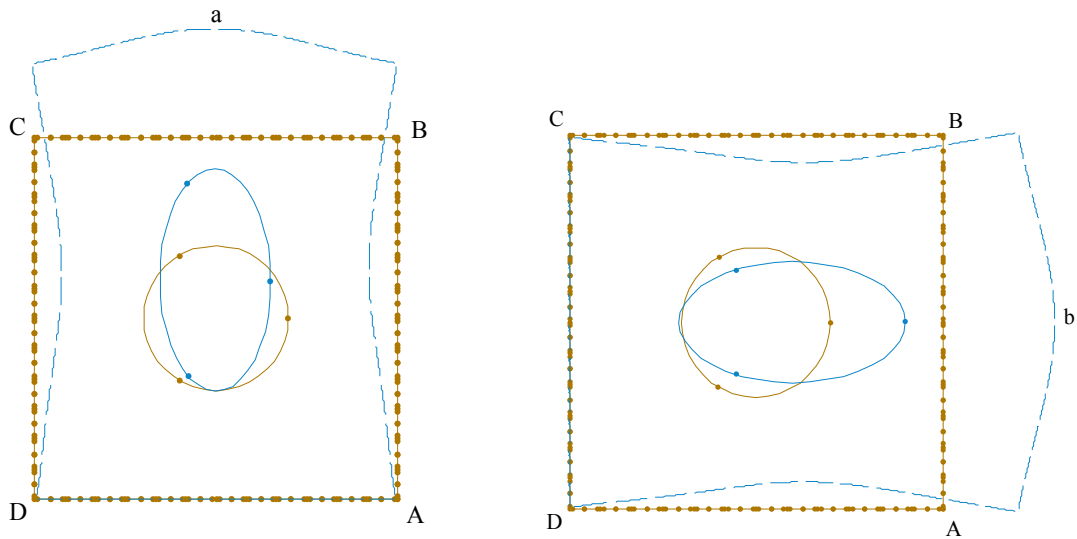


Figura 3.17 - Configuração deformada da placa com furo com relação $D/l = 0,4$ com carregamento uniforme na direção do eixo x_2 sobre o contorno BC e com condição de engaste no contorno DA (esquerda); e carregamento uniforme na direção do eixo x_1 sobre o contorno AB e condição de engaste no contorno CD.

O exemplo da Figura 3.10 com uma relação $D/l = 0,4$ é utilizado para analisar a convergência da solução com os pontos de Gauss. A Figura 3.18 mostra a convergência do deslocamento máximo na direção x_1 no contorno AB e o deslocamento mínimo na direção x_2 no contorno BC. Em todos os casos é utilizado 64 pontos de Gauss para integrar os elementos de furo. O eixo das abscissas corresponde aos pontos de Gauss utilizados para integrar os elementos quadráticos do contorno da placa.

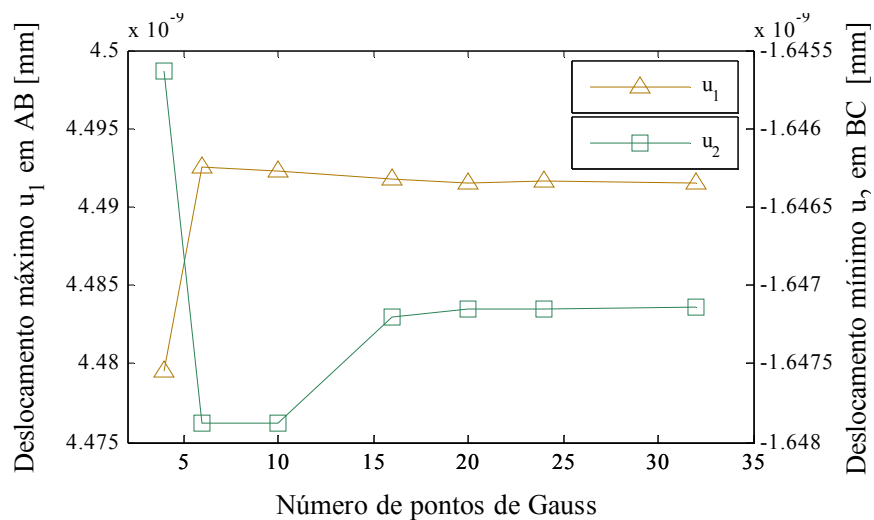


Figura 3.18 – Convergência nos deslocamentos no contorno da placa com o número de pontos de Gauss utilizados para integrar o elemento do contorno da placa. O elemento de furo é integrado com 64 pontos de Gauss em todos os casos.

A Figura 3.19 mostra a convergência dos mesmos deslocamentos com os pontos de Gauss utilizados para integrar o elemento de furo. Em todos os casos é utilizado 32 pontos de Gauss para integrar os elementos do contorno da placa.

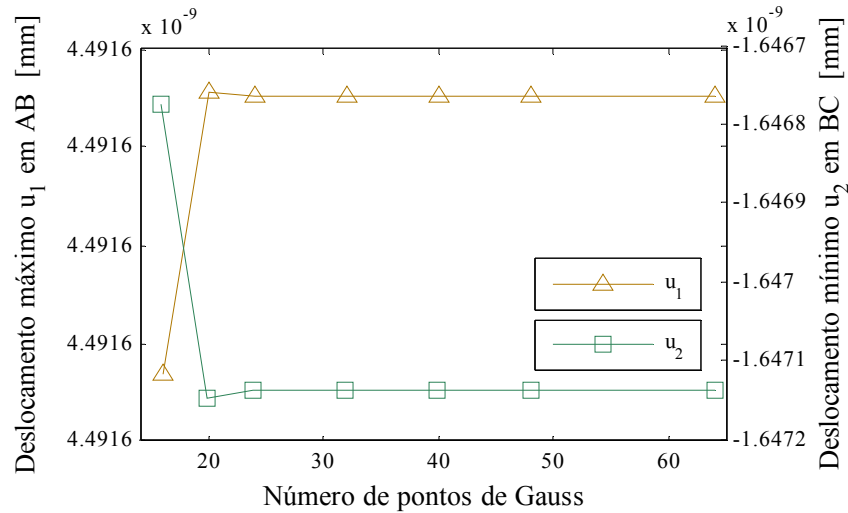


Figura 3.19 - Convergência nos deslocamentos no contorno da placa com o número de pontos de Gauss utilizados para integrar o elemento de furo. Os elementos do contorno da placa são integrados com 32 pontos de Gauss em todos os casos.

3.10. Considerações sobre os resultados obtidos com o elemento de furo

Da análise dos resultados obtidos se pode concluir que o elemento de furo fornece resultados satisfatórios quando comparado com o MEC convencional (ver Figuras 3.12, 3.13 e 3.14). Para relações de D/l menores a 0,4 o erro é inferior aos 4 %. Aliás, o erro aumenta para relações de D/l maiores como se observa das Figuras 3.15 e 3.16. Esse erro é atribuído à deficiência do elemento de furo para modelar o complexo campo de deslocamentos no contorno do furo [Henry & Banerjee, 1991]. Na Figura 3.20 se pode ver a configuração deformada do furo para uma relação $D/l = 0,6$. É claro que esse tipo de configuração deformada não pode ser representada satisfatoriamente com o elemento de furo proposto. Ao mesmo tempo, da análise das Figuras 3.7, 3.8 e 3.9 se observa que as integrais se tornam mal comportadas quando se faz colocação perto do elemento. Isto justifica o uso de muitos pontos de Gauss neste caso de integração do elemento de furo. As Figuras 3.18 e 3.19 mostram convergência no caso $D/l = 0,4$ com 16 pontos de Gauss no elemento do contorno da placa e 24 pontos de Gauss para o elemento de furo. A fim de minimizar o erro em furos perto do contorno da matriz do material ou de outros furos, no próximo capítulo são propostos elementos de furo com graus de liberdade adicionais.

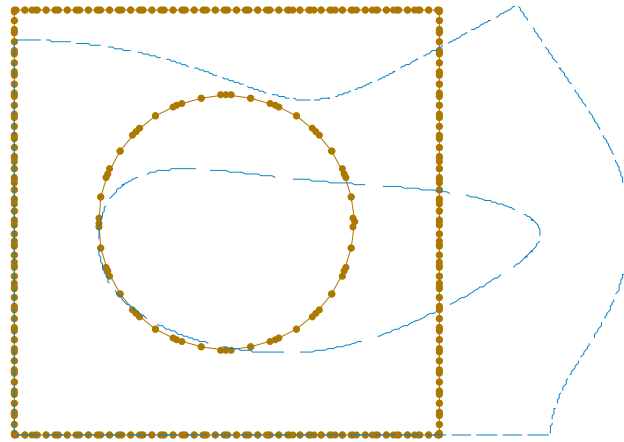


Figura 3.20 – Configuração deformada da placa com furo com relação $D/l = 0,6$. O furo é discretizado com o MEC convencional com 16 elementos quadráticos descontínuos.

4. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

4.1. Introdução

Neste capítulo é implementada a ferramenta numérica desenvolvida para modelagem de materiais micro-porosos. O objetivo da análise apresentada é obter o tensor de elasticidade efetivo C_{ijkl}^* de um material micro-poroso em termos das propriedades elásticas da matriz e da topologia da microestrutura do material num EVR. Certas simplificações são assumidas na modelagem da microestrutura. Em primeiro lugar a microestrutura consta de uma matriz homogênea e isotrópica com micro-poros distribuídos em forma aleatória. Os micro-poros são de forma circular e livres de tração. Ao mesmo tempo, no material não acontecem mudanças micro-estruturais com o histórico de aplicação da carga como, por exemplo, criação e coalescência de micro-poros ou transformação de fases na matriz, o que justifica a análise explícita implementada considerando somente um estado final de carregamento. A modelagem enquadra-se no comportamento elástico linear com deformações infinitesimais no nível da macro e micro-escala.

Neste capítulo são propostos elementos de furo com graus de liberdade adicionais ao elemento apresentado no capítulo anterior, e são analisados seus desempenhos. Logo após é estudada a interação entre furos com estes novos elementos. As expressões utilizadas para o cômputo de propriedades efetivas no plano são desenvolvidas para as hipóteses de EPT e EPD. Como exemplo de aplicação, é realizada a análise EVR linear para um material em EPT com propriedades e distribuição de furos tomados da microestrutura de um *ferro fundido nodular ferrítico*.

4.2. Elementos de ordem superior

Nesta seção é estudada a possibilidade de usar elementos de ordem superior para melhorar a qualidade da solução quando o furo interage com outros furos ou com o contorno exterior da matriz e os modos de deformação do furo (não elípticos) não são bem representados pelo elemento de furo com três nós. No presente trabalho, além do elemento de furo proposto no Capítulo 4, são também propostos elementos de furo de base trigonométrica de ordem superior. As funções de forma para interpolar a geometria e os deslocamentos no contorno do furo são:

$$\begin{aligned}
M_1(\theta) &= \frac{(1 + \cos \theta)}{2} \cos \theta \\
M_2(\theta) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin \theta - \frac{1}{2} \cos^2 \theta \\
M_3(\theta) &= \frac{(-1 + \cos \theta)}{2} \cos \theta \\
M_4(\theta) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \theta - \frac{1}{2} \cos^2 \theta
\end{aligned} \tag{4.1}$$

para o elemento de 4 nós,

$$\begin{aligned}
M_1(\theta) &= -\frac{1}{5} + \frac{2}{5} \cos \theta + \frac{4}{5} \cos^2 \theta \\
M_2(\theta) &= \frac{342}{899} \sin \theta + \frac{845}{1797} \sin \theta \cos \theta + \frac{122}{987} \cos \theta - \frac{2706}{4181} \cos^2 \theta + \frac{10946}{20905} \\
M_3(\theta) &= \frac{845}{3594} \sin \theta - \frac{684}{899} \sin \theta \cos \theta - \frac{1353}{4181} \cos \theta + \frac{244}{987} \cos^2 \theta + \frac{377}{4935} \\
M_4(\theta) &= -\frac{845}{3594} \sin \theta + \frac{684}{899} \sin \theta \cos \theta - \frac{1353}{4181} \cos \theta + \frac{244}{987} \cos^2 \theta + \frac{377}{4935} \\
M_5(\theta) &= -\frac{342}{899} \sin \theta - \frac{845}{1797} \sin \theta \cos \theta + \frac{122}{987} \cos \theta - \frac{2706}{4181} \cos^2 \theta + \frac{10946}{20905}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

para o elemento de 5 nós, e

$$\begin{aligned}
M_1(\theta) &= -\frac{1}{6} - \frac{1}{6} \cos \theta + \frac{2}{3} \cos^2 \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta \\
M_2(\theta) &= \frac{390}{1351} \sin \theta + \frac{780}{1351} \sin \theta \cos \theta - \frac{1}{3} \cos^2 \theta - \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \frac{2}{3} \cos \theta + \frac{1}{3} \\
M_3(\theta) &= \frac{390}{1351} \sin \theta - \frac{780}{1351} \sin \theta \cos \theta - \frac{2}{3} \cos \theta - \frac{1}{3} \cos^2 \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \frac{1}{3} \\
M_4(\theta) &= -\frac{1}{6} + \frac{1}{6} \cos \theta + \frac{2}{3} \cos^2 \theta - \frac{2}{3} \cos^3 \theta \\
M_5(\theta) &= -\frac{390}{1351} \sin \theta + \frac{780}{1351} \sin \theta \cos \theta - \frac{2}{3} \cos \theta - \frac{1}{3} \cos^2 \theta + \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \frac{1}{3} \\
M_6(\theta) &= -\frac{390}{1351} \sin \theta - \frac{780}{1351} \sin \theta \cos \theta + \frac{2}{3} \cos \theta - \frac{1}{3} \cos^2 \theta - \frac{2}{3} \cos^3 \theta + \frac{1}{3}
\end{aligned} \tag{4.3}$$

para o elemento de 6 nós. As funções de forma dadas pelas equações (4.1)-(4.3) são ilustradas nas Figuras 4.1 a 4.3, respectivamente.

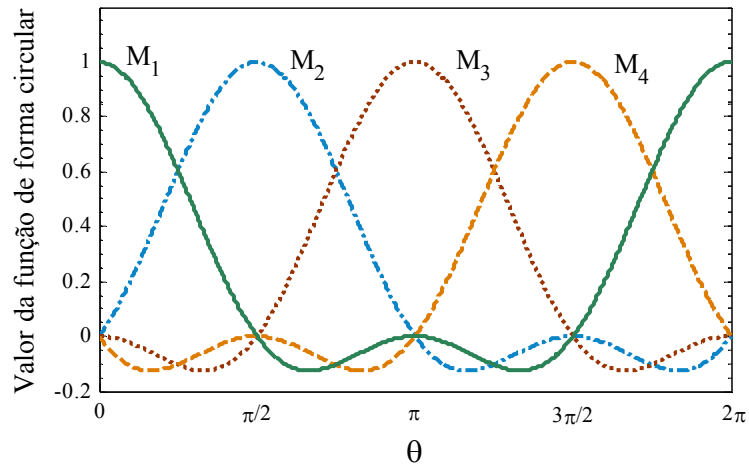


Figura 4.1 - Funções de forma circulares para interpolar geometria e deslocamentos no elemento de furo de quatro nós.

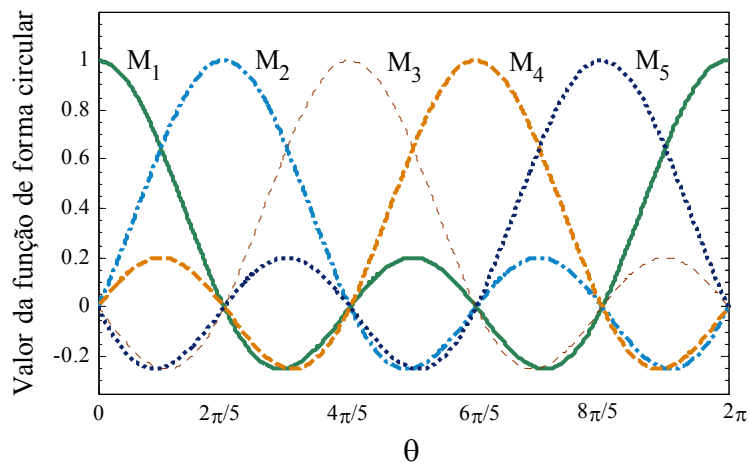


Figura 4.2 - Funções de forma circulares para interpolar geometria e deslocamentos no elemento de furo de cinco nós.

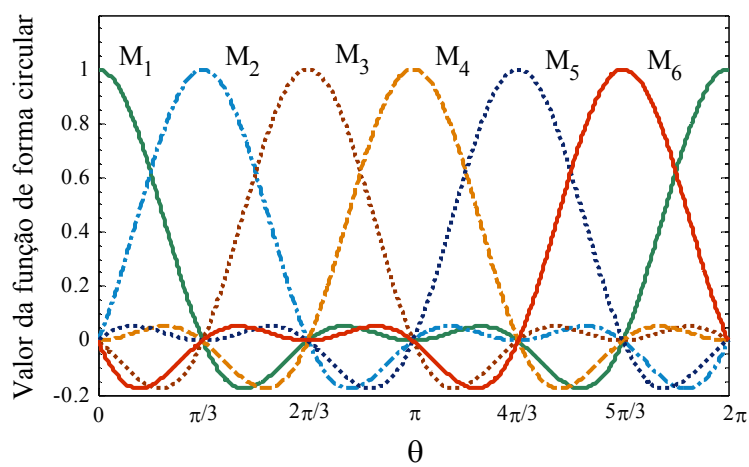


Figura 4.3 - Funções de forma circulares para interpolar geometria e deslocamentos no elemento de furo de seis nós.

Pode-se observar que em todos os casos as funções de forma propostas satisfazem três propriedades que garantem que as mesmas sejam linearmente independentes [Zienckiewicz & Taylor, 2000]. Isto é, têm valor unitário no nó ao que estão associadas, têm valor zero nos outros nós do elemento, e a soma das funções em qualquer ponto do domínio do elemento tem valor unitário.

A qualidade dos resultados obtidos com os novos elementos é verificada com exemplos similares aos apresentados para o elemento de 3 nós. A Figura 4.4 mostra as configurações deformadas para uma placa com uma relação $D/l = 0,6$; solicitada como indicado na Figura 3.10. A Figura 4.4-(a) corresponde ao furo discretizado com 16 elementos quadráticos descontínuos utilizando o MEC convencional. As Figura 4.4-(b), (c), (d) e (e) correspondem aos elementos de furo de 3, 4, 5 e 6 nós, respectivamente. Nesta figura pode-se observar a habilidade dos elementos de ordem superior para capturar modos de deformação do furo quando a relação D/l é grande.

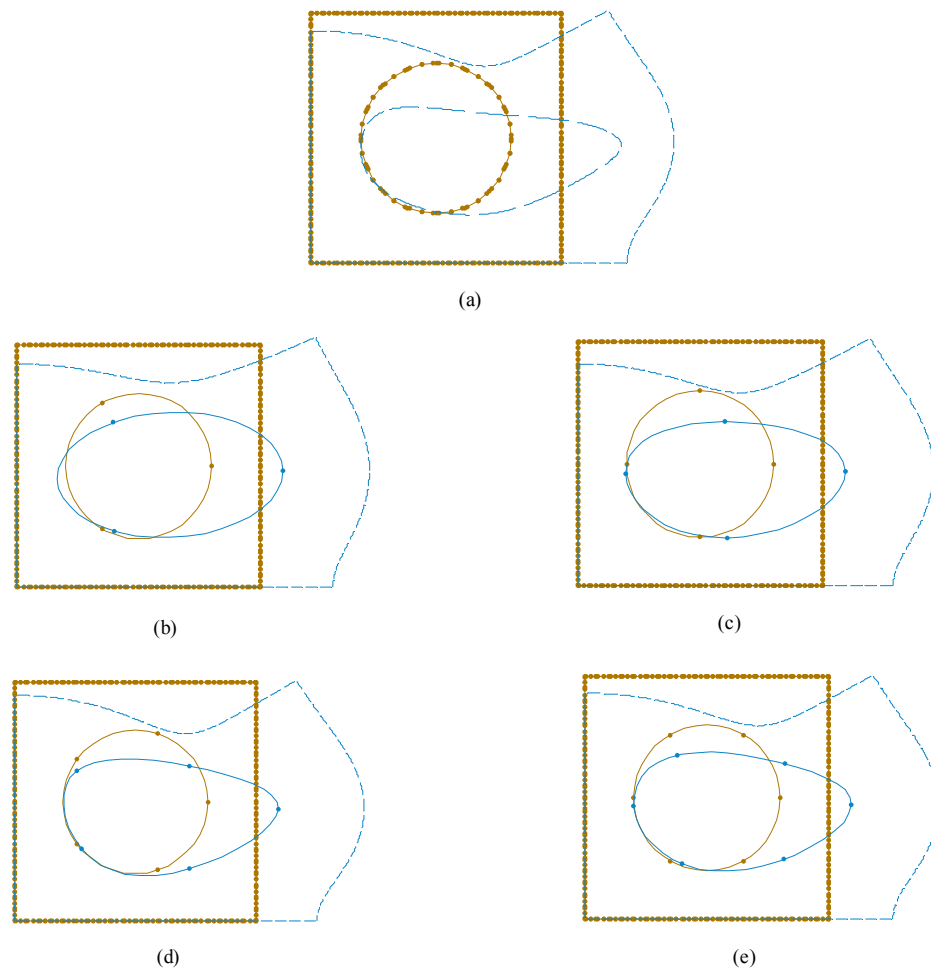


Figura 4.4 – Configurações deformadas no exemplo da placa com relação $D/l = 0,6$. (a) Com furo discretizado com 16 elementos quadráticos. (b) elemento de furo com 3 nós. (c) elemento de furo com 4 nós. (d) elemento de furo com 5 nós. (e) elemento de furo com 6 nós.

As Figuras 4.5 e 4.6 ilustram o parâmetro δ como medida do erro no campo de deslocamentos do contorno da placa estudada como exemplo (ver Figura 3.10) para os elementos de ordem superior em função à relação D/l . Na Figura 4.5 o parâmetro δ é definido como a relação entre o deslocamento máximo na direção x_1 sobre o lado AB obtido com o elemento de furo e o deslocamento máximo obtido discretizando-se o furo discretizado com 16 elementos quadráticos descontínuos. Na Figura 4.6 o parâmetro δ é definido como a relação entre o deslocamento mínimo na direção x_2 sobre o lado BC obtido com o elemento de furo e o deslocamento máximo com o furo discretizado. Essas figuras evidenciam a perda de qualidade dos resultados à medida que os diâmetros dos furos assumem valores próximos à própria dimensão da placa. Isso é consequência do fato da presente implementação não utilizar nenhum cuidado especial com integrais quase-singulares, que se tornam mais conspícuas quando os pontos de colocação estão próximos dos elementos de furo. Nos experimentos numéricos realizados, obtém-se, inclusive, sistemas muito mal-condicionados para relações de $D/l = 0,8$. Observa-se também uma melhora na precisão dos resultados com a utilização de elementos de ordem superior propostos.

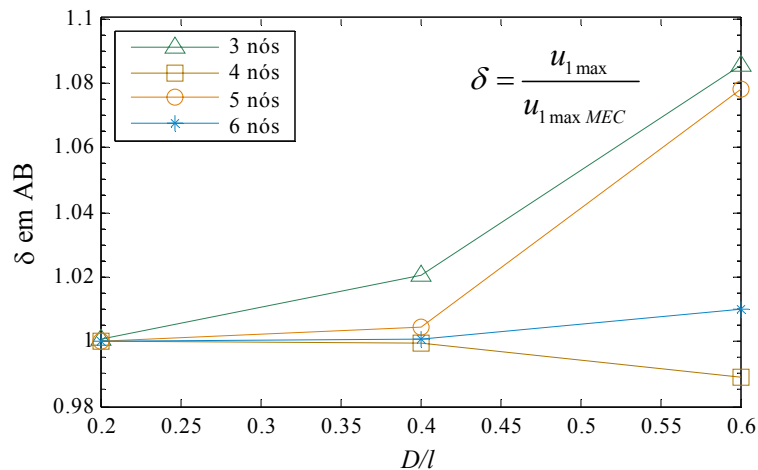


Figura 4.5 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_1 da aresta AB em função da relação D/l . δ é definido como o deslocamento máximo obtido com o elemento de furo sobre o deslocamento máximo com o furo discretizado com 16 elementos quadráticos.

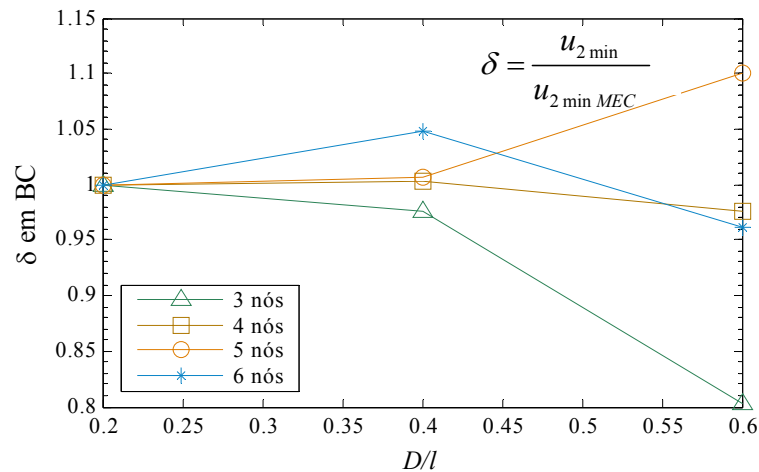


Figura 4.6 - Medida do erro δ no deslocamento na direção x_2 da aresta BC em função da relação D/l . δ é definido como o deslocamento mínimo obtido com o elemento de furo sobre o deslocamento mínimo com o furo discretizado com 16 elementos quadráticos.

4.3. Interação entre furos

Uma das vantagens da técnica de cômputo de propriedades efetivas implementada neste trabalho é que a mesma pode ser utilizada na modelagem de materiais com frações de volume altas, onde resultados com métodos analíticos ou semi-analíticos não são satisfatórios [Zohdi, 2002]. Com o aumento da fração de volume o efeito da interação entre furos torna-se mais importante. Nesta seção é estudada a interação entre dois furos com os elementos de ordem superior. A configuração considerada é uma placa quadrada de lado l vinculada e carregada da mesma forma que indicado na Figura 4.7, com dois furos no centro da placa. O lado l da placa é 20 mm, o raio R é unitário e a distância entre os centros dos furos é definido como d (Figura 4.8). A Figura 4.8 mostra a disposição dos furos e os parâmetros envolvidos.

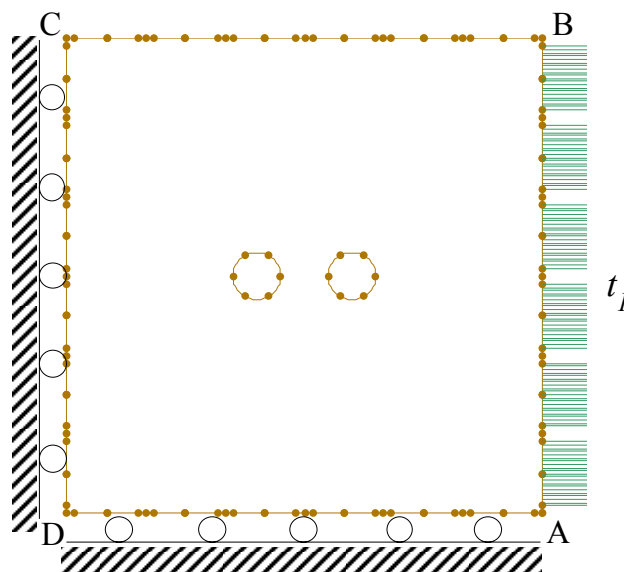


Figura 4.7 - Esquema do problema de uma placa quadrada com dois furos centrais no meio. Carregamento uniforme na direção x_1 sobre a face AB e simplesmente apoiada nas faces CD e DA.

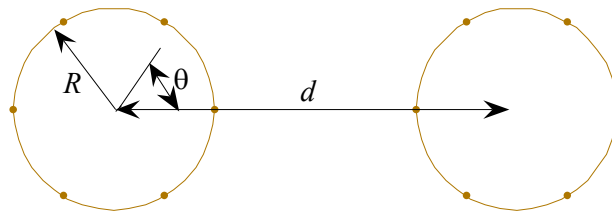


Figura 4.8 - Esquema dos parâmetros definidos para a interação entre dois furos.

São analisados os casos com relação R/d de 0,25; 0,285; 0,375 e 0,44. Estas relações escolhidas são comparáveis às razões D/l estudadas no Capítulo 3 quanto à proximidade do ponto de colocação ao elemento de furo. As Figura 4.9, Figura 4.10, Figura 4.12 e Figura 4.13 mostram o campo de deslocamentos no contorno do furo da esquerda com os distintos elementos para cada uma das relações R/d . A título ilustrativo, a Figura 4.11 mostra ainda os resultados obtidos no furo da direita para uma relação $R/d = 0,285$ enquanto a Figura 4.14 mostra os resultados quando a placa é carregada por compressão com uma relação $R/d = 0,44$.

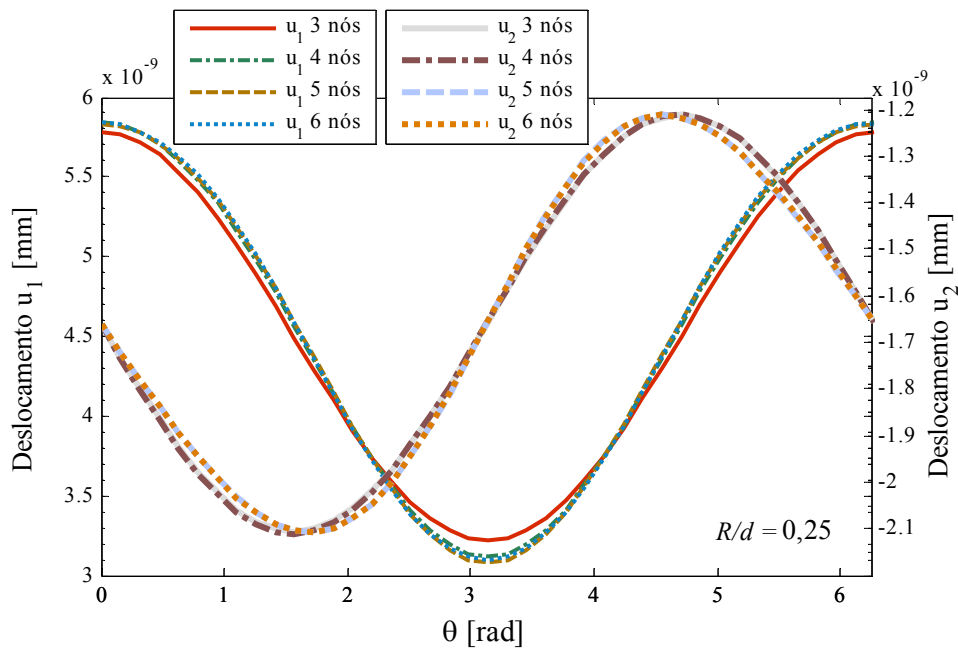


Figura 4.9 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d = 0,25$.

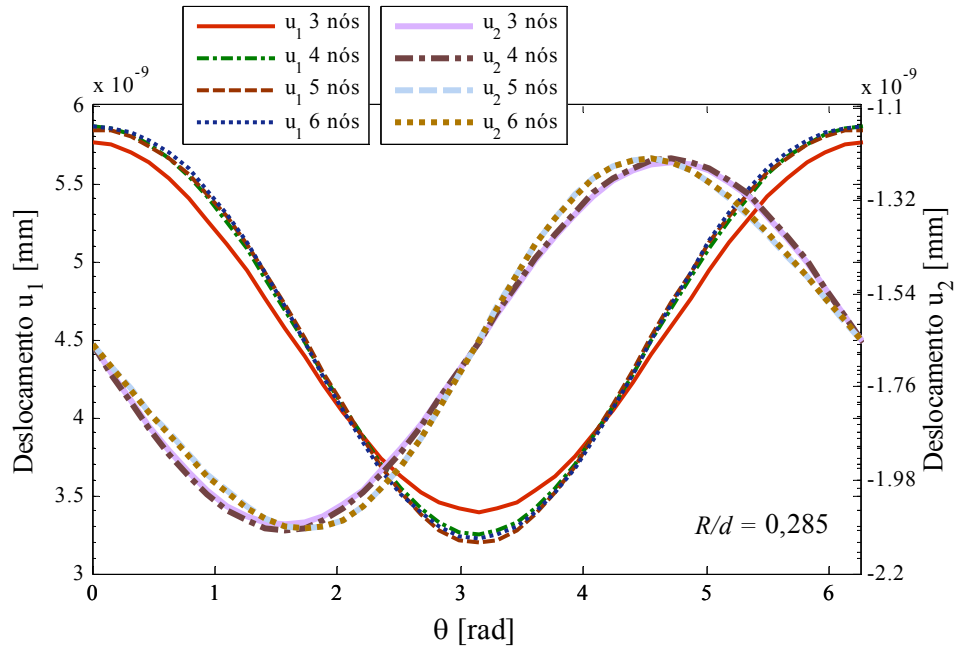


Figura 4.10 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,285$.

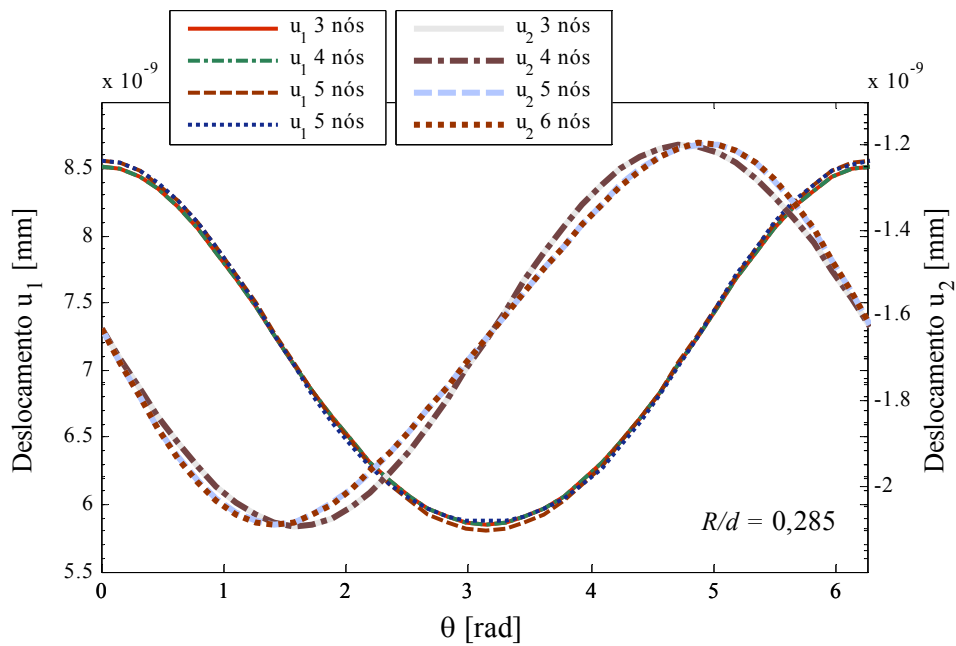


Figura 4.11 - Deslocamentos no contorno do furo da direita no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d=0,285$.

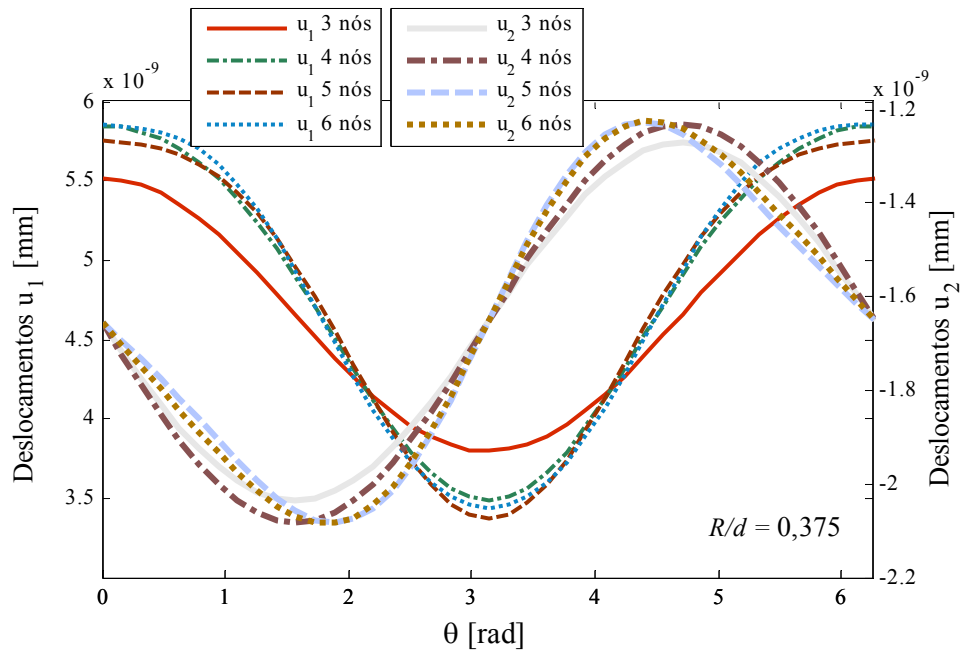


Figura 4.12 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d = 0,375$.

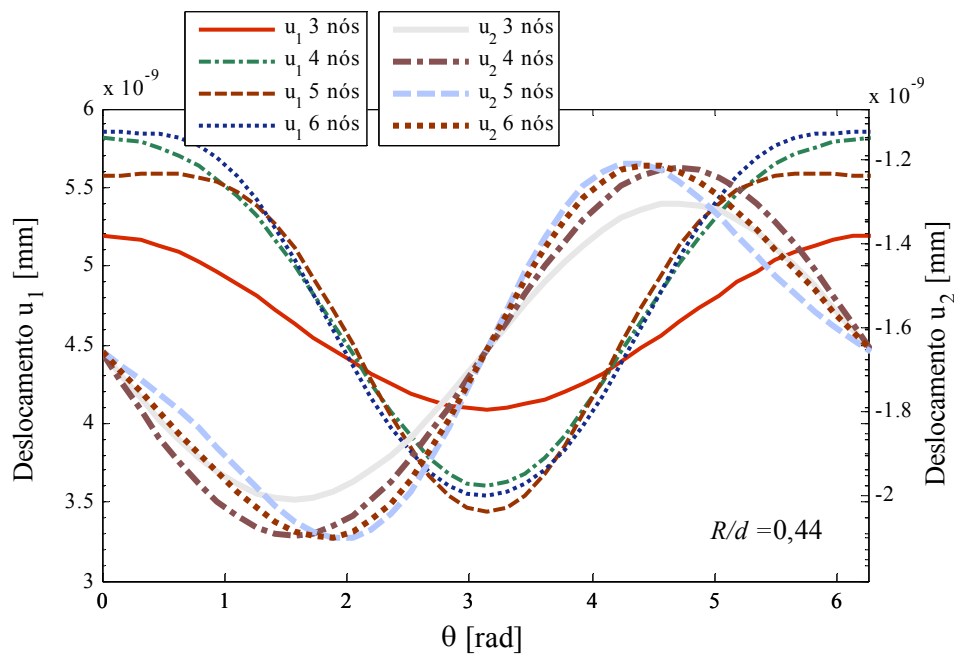


Figura 4.13 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com tração uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d = 0,44$.

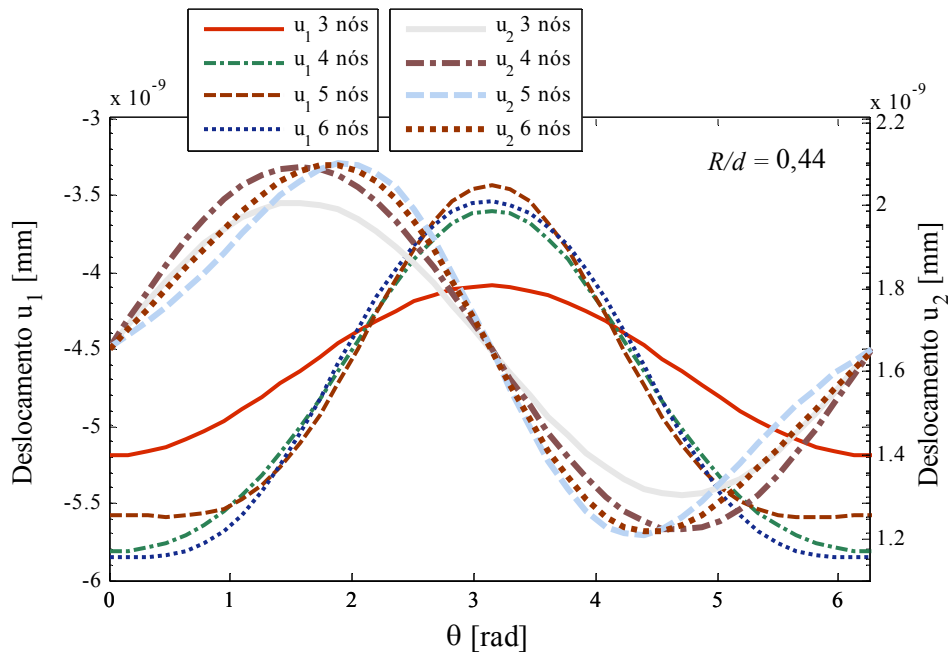


Figura 4.14 - Deslocamentos no contorno do furo da esquerda no caso de uma placa com dois furos com compressão uniforme no eixo x_1 sobre o contorno AB. A relação $R/d = 0,44$.

Da análise dos casos estudados se pode concluir que esses novos elementos de ordem superior permitem descrever o campo de deslocamentos com maior precisão que o elemento original de 3 nós, como era de esperar. Recomenda-se utilizar o elemento de 4 nós onde se obtém resultados consideravelmente melhores que com o elemento de 3 nós e não implica em um aumento de custo computacional significativo.

4.4. Propriedades efetivas de materiais micro-porosos em duas dimensões

As propriedades efetivas do material micro-poroso são computadas como uma relação entre médias para o qual é preciso obter $\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega}$ e $\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega}$ na microestrutura. Para satisfação da condição de energia de Hill as condições de borda na microestrutura devem ser de deslocamento linear $u_i|_{\Gamma} = \mathbf{E}_{ij} x_j$ ou de tração uniforme $t_i|_{\Gamma} = \mathbf{L}_{ij} n_j$ (ver Capítulo 2). É muito difícil se impor condições de contorno somente de tração em uma formulação explícita e, portanto, é considerado somente o caso de deslocamento linear. Esta condição de contorno junto com o requerimento de ausência de força de corpo garante que a condição de Hill é satisfeita. Pelo teorema da deformação média tem-se que $\langle \varepsilon \rangle_{\Omega} = \mathbf{E}$. No MEC as variáveis são calculadas inicialmente no contorno do problema e então as variáveis do domínio podem ser calculadas em uma etapa de pós-processamento. A seguir é apresentada uma forma de se evitar o cálculo de variáveis no domínio para o cômputo de propriedades efetivas.

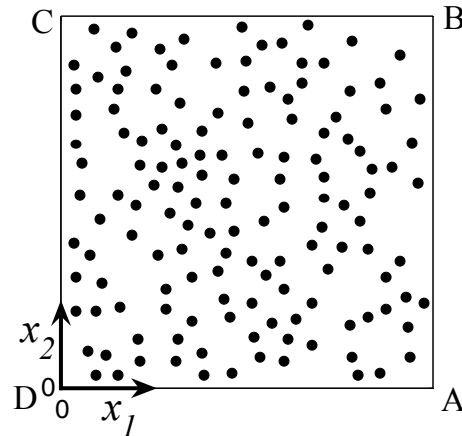


Figura 4.15 - Modelo de material micro-poroso indicando o sistema de referencia. O desenho corresponde a 140 micro-poros com uma fração de volume de 7,7% e uma relação media entre o raio do poro e o comprimento entre centros de poros mais próximos de 0,25.

Da equação (2.56) e lembrando-se que não há forças de corpo tem-se que o tensor de tensão pode ser escrito como $\sigma_{ik} = (\sigma_{ij} x_k)_{,j}$, e então o campo de tensões médio no material pode ser expresso como [Zohdi, 2002]:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\sigma_{ik} x_j)_{,k} d\Omega \quad (4.4)$$

aplicando o Teorema de Green e lembrando que Γ_o é o contorno exterior da matriz, o campo de tensões médias no material poroso é levado ao contorno com a expressão [Nemat-Nasser & Hori, 1999]:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_o} \sigma_{ik} x_j n_k d\Gamma \quad (4.5)$$

Uma expressão similar à (4.5) é apresentada no trabalho de Yang & Qin, 2004. Considerando-se o material micro-poroso em duas dimensões com um sistema de referência cartesiano qualquer, a equação (4.5) pode ser escrita em forma matricial para elementos descontínuos quadráticos como:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{k=1}^{NE} \left\{ \begin{bmatrix} T_i^1 & T_i^2 & T_i^3 \end{bmatrix}_k \int_{-1}^1 \begin{bmatrix} \bar{\phi}_1(\eta) \phi_1(\eta) & \bar{\phi}_1(\eta) \phi_2(\eta) & \bar{\phi}_1(\eta) \phi_3(\eta) \\ \bar{\phi}_2(\eta) \phi_1(\eta) & \bar{\phi}_2(\eta) \phi_2(\eta) & \bar{\phi}_2(\eta) \phi_3(\eta) \\ \bar{\phi}_3(\eta) \phi_1(\eta) & \bar{\phi}_3(\eta) \phi_2(\eta) & \bar{\phi}_3(\eta) \phi_3(\eta) \end{bmatrix} J d\eta \begin{bmatrix} x_j^1 \\ x_j^2 \\ x_j^3 \end{bmatrix}_k \right\} \quad (4.6)$$

Na implementação numérica estas integrais podem ser computadas de forma exata com quadratura de Gauss-Legendre padrão (a menos das inevitáveis aproximações aritméticas de ponto flotante) utilizando-se 3 pontos de Gauss por se tratar de funções polinomiais de quarto grau. Note-se, portanto que o MEC é particularmente atrativo para calcular propriedades efetivas

de materiais, já que para isto é suficiente o cálculo de trações (ou deslocamentos) no contorno sendo que são variáveis primais da formulação e são obtidas com maior precisão que outros métodos como MEF. Também da expressão (4.5) se pode observar que unicamente as trações no plano de normal exterior do contorno da matriz são necessárias, não tendo que obter trações fora do plano do contorno por pós-processamento.

As Figura 4.16 e Figura 4.17 ilustram a distribuição de trações no contorno de uma microestrutura com 12 furos distribuídos de forma aleatória e uma fração de volume de 7,7%. A condição de contorno em esse caso é de deslocamento linear em x_1 , que corresponde a uma deformação uniforme $\boldsymbol{\varepsilon} = [\beta \ 0 \ 0]^T$. A Figura 4.18 mostra a correspondente configuração deformada.

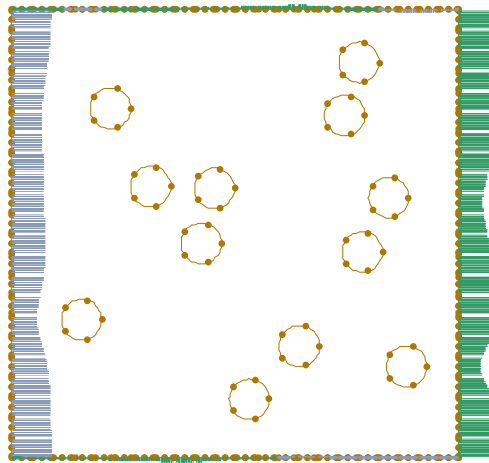


Figura 4.16 – Distribuição das trações na direção x_1 no contorno de uma microestrutura com 12 furos e fração de volume de 7,7%.

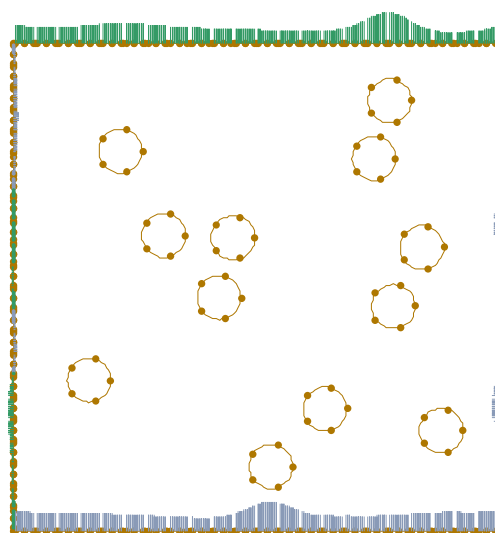


Figura 4.17 - Distribuição das trações na direção x_2 no contorno de uma microestrutura com 12 furos e fração de volume de 7,7%.

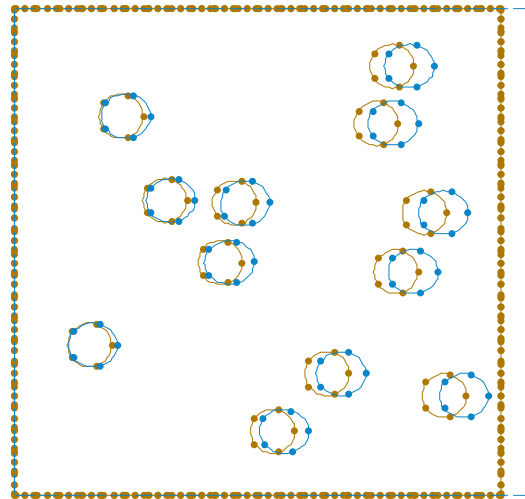


Figura 4.18 – Configuração deformada de uma microestrutura com 12 furos e fração de volume de 7,7%. Condição de contorno de deslocamento linear.

4.4.1. EPT, EPD e propriedades efetivas no plano

Nesta seção, o problema de estimar propriedades efetivas de sólidos com furos cilíndricos é apresentado. Em elasticidade plana são comumente empregadas hipóteses sobre o comportamento referente à terceira dimensão, x_3 , levando aos conhecidos modelos de EPD e o EPT (ver Capítulo 2, Seção 2.6). Assim, pode-se modelar o caso de uma placa de espessura fina contendo furos circulares com a hipótese de EPT ou o caso de um sólido contendo furos cilíndricos compridos alinhados na direção x_3 com a hipótese de EPD [Nemat-Nasser & Hori, 1999]. Quando os micro-constituintes do material são isotrópicos, a simetria geométrica da microestrutura implica simetria macroscópica do material. Ao se considerar a modelagem de inhomogeneidades na microestrutura e tendo em conta que na modelagem plana, o plano x_3 *deve ser um plano de simetria do material*, o caso de anisotropia mais geral que pode ser considerado ao modelar microestruturas em duas dimensões é de simetria monoclinica (em elasticidade tridimensional). Um material monoclinico com simetria no eixo x_3 é caracterizado por um tensor da forma C_{mon}^* (4.7), onde é necessário determinar 13 constantes elásticas.

$$\mathbf{c}_{mon}^* = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & c_{13}^* & 0 & 0 & c_{16}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* & c_{23}^* & 0 & 0 & c_{26}^* \\ c_{13}^* & c_{23}^* & c_{33}^* & 0 & 0 & c_{36}^* \\ 0 & 0 & 0 & c_{44}^* & c_{45}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{45}^* & c_{55}^* & 0 \\ c_{16}^* & c_{26}^* & c_{36}^* & 0 & 0 & c_{66}^* \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Se for considerado um material anisotrópico *no plano* ou também chamado transversalmente anisotrópico (monoclínico em elasticidade tridimensional), são necessários três casos de carregamento para determinar as constantes elásticas que determinam o comportamento macroscópico do material *no plano*. São considerados três casos:

$$\begin{cases} \langle \sigma_1 \rangle_\Omega \\ \langle \sigma_2 \rangle_\Omega \\ \langle \sigma_{12} \rangle_\Omega \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & c_{16}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* & c_{26}^* \\ c_{61}^* & c_{62}^* & c_{66}^* \end{bmatrix} \begin{cases} \beta \\ 0 \\ 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} c_{11}^* = \frac{\langle \sigma_1 \rangle_\Omega}{\beta} \\ c_{21}^* = \frac{\langle \sigma_2 \rangle_\Omega}{\beta} \\ c_{61}^* = \frac{\langle \sigma_{12} \rangle_\Omega}{\beta} \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\begin{cases} \langle \sigma_1 \rangle_\Omega \\ \langle \sigma_2 \rangle_\Omega \\ \langle \sigma_{12} \rangle_\Omega \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & c_{16}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* & c_{26}^* \\ c_{61}^* & c_{62}^* & c_{66}^* \end{bmatrix} \begin{cases} 0 \\ \beta \\ 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} c_{12}^* = \frac{\langle \sigma_1 \rangle_\Omega}{\beta} \\ c_{22}^* = \frac{\langle \sigma_2 \rangle_\Omega}{\beta} \\ c_{62}^* = \frac{\langle \sigma_{12} \rangle_\Omega}{\beta} \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\begin{cases} \langle \sigma_1 \rangle_\Omega \\ \langle \sigma_2 \rangle_\Omega \\ \langle \sigma_{12} \rangle_\Omega \end{cases} = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & c_{16}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* & c_{26}^* \\ c_{61}^* & c_{62}^* & c_{66}^* \end{bmatrix} \begin{cases} 0 \\ 0 \\ 2\beta \end{cases} \rightarrow \begin{cases} c_{16}^* = \frac{\langle \sigma_1 \rangle_\Omega}{2\beta} \\ c_{26}^* = \frac{\langle \sigma_2 \rangle_\Omega}{2\beta} \\ c_{66}^* = \frac{\langle \sigma_{12} \rangle_\Omega}{2\beta} \end{cases} \quad (4.10)$$

No caso do material estudado a distribuição aleatória dos furos no plano x_1x_2 leva a um comportamento estatisticamente isotrópico e a resposta efetiva de um EVR resulta em uma simetria de *isotropia transversal* [Nemat-Nasser & Hori, 1999] em qualquer uma das duas

hipóteses de EPT ou EPD. Com esta hipótese de isotropia no plano, as matrizes constitutivas em função das constantes elásticas E^* e ν^* para o EPT e EPD, seguindo das equações (2.25) e (2.22), são:

$$\mathbf{C}_{EPT}^* = \frac{E^*}{1-\nu^{*2}} \begin{bmatrix} 1 & \nu^* & 0 \\ \nu^* & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-\nu^*)}{2} \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{C}_{EPD}^* = \frac{E^{*2}E_3}{(1+\nu^*)\{(1-\nu^*)E_3 - 2\nu_3^{*2}E^*\}} \begin{bmatrix} \frac{1}{E^*} - \frac{\nu_3^{*2}}{E_3} & \frac{\nu^*}{E^*} + \frac{\nu_3^{*2}}{E_3} & 0 \\ \frac{\nu^*}{E^*} + \frac{\nu_3^2}{E_3} & \frac{1}{E^*} - \frac{\nu_3^{*2}}{E_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\{(1-\nu^*)E_3 - 2\nu_3^{*2}E^*\}}{2E^*E_3} \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

É interessante notar que na modelagem de EPD, o comportamento *no plano* é função da resposta no plano na terceira dimensão, a qual deveria ser assumida. Isto não acontece na modelagem de EPT onde a lei constitutiva tem a mesma forma que para isotropia. Com essa consideração, a lei constitutiva *no plano* do material isotrópico transversal é caracterizada somente por duas constantes elásticas onde um único caso de carga é suficiente para determinar a resposta macroscópica. Porém, há duas situações que não permitem calcular estas variáveis. Se as condições de contorno são de corte puro, por exemplo $\boldsymbol{\varepsilon} = [0 \ 0 \ 2\beta]^T$, ou de componente desviadora nula, como por exemplo $\boldsymbol{\varepsilon} = [\beta \ \beta \ 0]^T$, o sistema de equações resultante da relação entre médias não tem solução. Ou seja, a condição de contorno deve ter componentes esférica e desviadora não nulas. Note-se que este requerimento é em referência ao plano e não é considerada a terceira dimensão.

As expressões para obter o módulo de Young e o coeficiente de Poisson efetivos para um material isotrópico transversal utilizadas neste trabalho podem agora ser desenvolvidas a partir dos sistemas de equações (4.8) e (4.9), e as matrizes constitutivas (4.11) e (4.12). Logo, para o EPT se obtém as expressões:

$$\boldsymbol{\Xi} = [\beta \ 0 \ 0]^T \rightarrow \begin{cases} E^* = \frac{1 - \left(\frac{\langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}}{\langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}} \right)^2}{\beta} \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} \\ \nu^* = \frac{\langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}}{\langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}} \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\boldsymbol{\Xi} = [0 \ \beta \ 0]^T \rightarrow \begin{cases} E^* = \frac{1 - \left(\frac{\langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}}{\langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}} \right)^2}{\beta} \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} \\ \nu^* = \frac{\langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}}{\langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}} \end{cases} \quad (4.14)$$

e, para o EPD, as expressões:

$$\boldsymbol{\Xi} = [\beta \ 0 \ 0]^T \rightarrow \begin{cases} E^* = \frac{4E_3^* (\langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} + \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}) \beta^2}{\Xi_1 (\langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} - \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega})} \\ \nu^* = \frac{4E_3^* \beta \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} - \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^* + \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^{*2}}{\Xi_1} \end{cases} \quad (4.15)$$

$$\boldsymbol{\Xi} = [0 \ \beta \ 0]^T \rightarrow \begin{cases} E^* = \frac{4E_3^* (\langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} + \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}) \beta^2}{\Xi_2 (\langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} - \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega})} \\ \nu^* = \frac{4E_3^* \beta \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} - \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^* + \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^{*2}}{\Xi_2} \end{cases} \quad (4.16)$$

com as seguintes definições:

$$\Xi_1 = \beta \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} E_3^* - 3\beta \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} E_3^* + \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^* - \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^{*2} \quad (4.17)$$

$$\Xi_2 = \beta \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} E_3^* - 3\beta \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} E_3^* + \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^* - \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega}^2 \nu_3^{*2} \quad (4.18)$$

Se for considerado o caso de isotropia com a hipótese de EPD, as expressões para obter as propriedades efetivas, podem ser obtidas fazendo $E_3 = E$ e $\nu_3 = \nu$:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = [\beta \quad 0 \quad 0]^T \rightarrow \begin{cases} E^* = \frac{(3\langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega} - \langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega})}{(\langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega} - \langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega})\beta} \langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega} \\ \nu^* = -\frac{\langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega}}{\langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega} - \langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega}} \end{cases} \quad (4.19)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = [0 \quad \beta \quad 0]^T \rightarrow \begin{cases} E^* = \frac{(3\langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega} - \langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega})}{(\langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega} - \langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega})\beta} \langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega} \\ \nu^* = -\frac{\langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega}}{\langle\sigma_{11}\rangle_{\Omega} - \langle\sigma_{22}\rangle_{\Omega}} \end{cases} \quad (4.20)$$

É razoável pensar que a resposta macroscópica isotrópica *no plano* seja independente da hipótese de EPT ou de EPD. Em todos os trabalhos de pesquisa estudados durante esta dissertação, o comportamento macroscópico é considerado isotrópico. Aliás, no livro de Nemat-Nasser & Hori, 1999 é levada em conta a isotropia transversal para diferentes métodos analíticos de estimação de propriedades efetivas, onde este efeito é considerado desprezável. Neste trabalho, é implementada a hipótese de EPT onde não se diferenciam as hipóteses de isotropia das de isotropia transversal macroscópica. Esse tópico merece ser estudado com mais detalhes em trabalhos futuros.

4.5. Propriedades efetivas do ADI

A metodologia desenvolvida possibilita a homogeneização de materiais em duas dimensões com a hipótese de EPT ou com a hipótese de EPD. Como exemplo de aplicação da ferramenta numérica desenvolvida para a modelagem de materiais micro-porosos é homogeneizada a microestrutura de *ferro fundido nodular ferrítico* conhecida como ADI (*Austempered Ductile Iron*) com a hipótese de EPT. Nos trabalhos de Batista et al., 2003 e Pundale et al., 1998 é adotada a mesma hipótese. A Figura 4.19 mostra uma micrografia típica do ADI estudado.

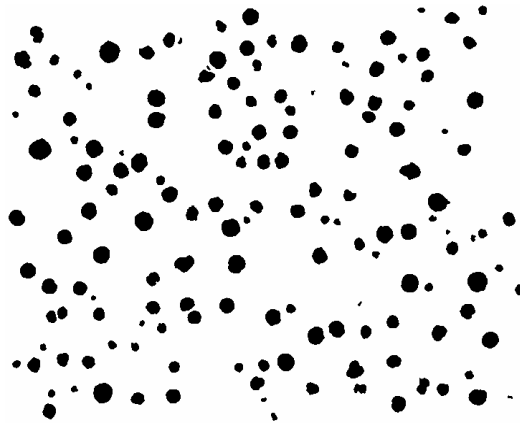


Figura 4.19 - Micrografia de ADI. 150 nódulos/ mm^2

Neste modelo os nódulos de grafite são modelados como furos [Berdin et al, 2003; Zhang et al. 1999; Batista et al., 2003 e Pundale et al., 1998] devido às baixas propriedades mecânicas desta fase com respeito às da matriz. A relação R/d é escolhida como parâmetro característico, onde R é o raio médio do nódulo e d é o comprimento mínimo médio entre centros de nódulos. No trabalho de Ortiz et al. em 2001, é realizada uma análise estatística sobre micrografias de ADI com a técnica de análise digital de imagens. Os resultados obtidos por estes autores para o parâmetro R/d são apresentados na Tabela 4.1. Pode-se ver que para uma ampla faixa de contagem nodular (60 a 600 nódulos/ mm^2) o parâmetro R/d e sua desvio padrão são quase constantes, com valores de $R/d = 0,25$ e desvio padrão de 35%. Em todos os casos há 100% de nodularidade, ou seja, as projeções dos nódulos são aproximadamente circulares no plano. Seguindo o trabalho de Zhang et al., 1999 as propriedades da matriz ferrítica são selecionadas com um coeficiente de Poisson de 0,3 e um módulo de Young de 210 GPa. A fração de volume é de 7,7% de grafite em nódulos.

Nódulos por área [mm^{-2}]	Nodularidade [%]	R/d média	Desvio padrão [%]
60	100	0,27682	31,18
100	100	0,26175	37,56
150	100	0,25294	35,43
600	100	0,25625	32,62

Tabela 4.1 - Resultados da análise estatística em micrografias de ADI do trabalho de Ortiz et al., 2001.

Para efeito da simulação numérica, a estratégia para gerar as microestruturas de ADI é a seguinte:

- Adota-se um raio unitário para todos os nódulos e esta dimensão é tomada como característica do problema.
- Considera-se que a fração de volume é de 7,7% de grafito em forma de nódulos.
- A partir do número de nódulos que se deseja gerar para a amostra e com a fração de volume se calcula a área da microestrutura.
- Geram-se nódulos em forma aleatória verificando que não haja superposição entre os mesmos e que a distribuição corresponda aos dados experimentais.

Para determinar as coordenadas dos nódulos seguindo a estratégia anteriormente descrita é utilizada uma rotina escrita em MATLAB, 2004 a qual foi cedida pelo Prof. Adrián P. Cisilino da Universidad Nacional de Mar del Plata [*gera_coord*, 2004].

4.6. Determinação do EVR do ADI

Não existe um procedimento padrão para determinar de forma direta as dimensões e número de heterogeneidades que devem incluir-se no EVR. Por isto, as dimensões do EVR são determinadas em forma numérica através do sucessivo incremento do volume da amostra. O tamanho de amostra representativo será aquele que proporcione uma resposta macroscópica invariante (com certa margem) para distintas distribuições das partículas. A Figura 4.21 mostra um esquema de diversos tamanhos de amostras de microestruturas consideradas para determinar o EVR.

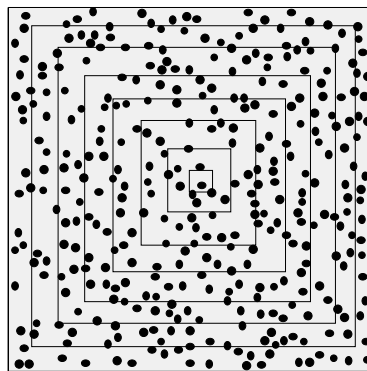


Figura 4.20 - Esquema de diversos tamanhos de amostras da microestrutura.

Na estratégia implementada [Zohdi, 2005] para estudar a resposta efetiva da microestrutura do ADI são simuladas 50 amostras, cada uma com uma distribuição aleatória diferente dos nódulos. As Figura 4.21 e Figura 4.24 apresentam os resultados obtidos para o modulo de Young e o coeficiente de Poisson (equação (4.13)) respectivamente, com microestruturas que contém 25 nódulos em os casos todos. Cada ponto destas figuras representa o resultado de um ensaio computacional do material. Também se observam os valores máximos, mínimos, médios e desvios padrões do grupo de amostras. As Figura 4.22 e Figura 4.25 mostram os correspondentes histogramas de estes resultados.

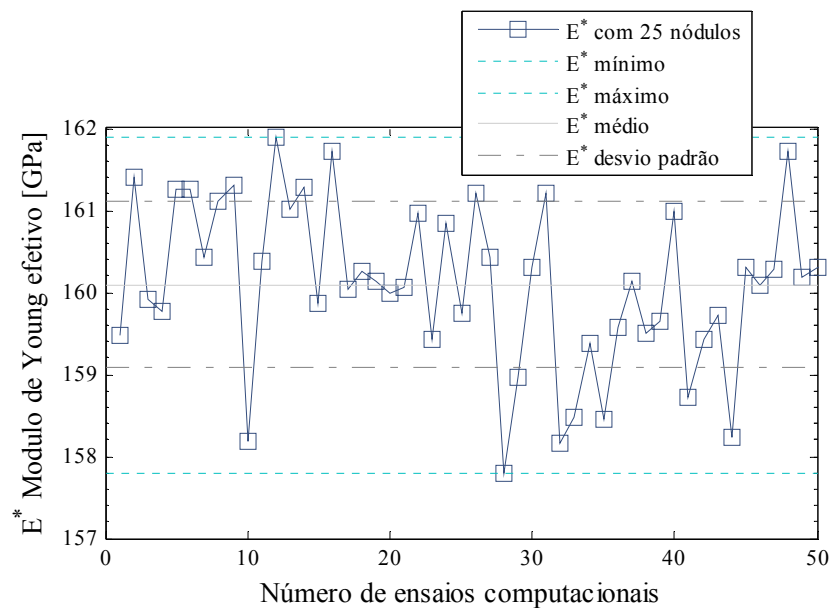


Figura 4.21 - Módulo de Young efetivo do material [GPa] para 50 microestruturas com 25 nódulos distribuídas em forma aleatória em cada caso. Indicam-se os valores máximos, mínimos, médio e desvio padrão.

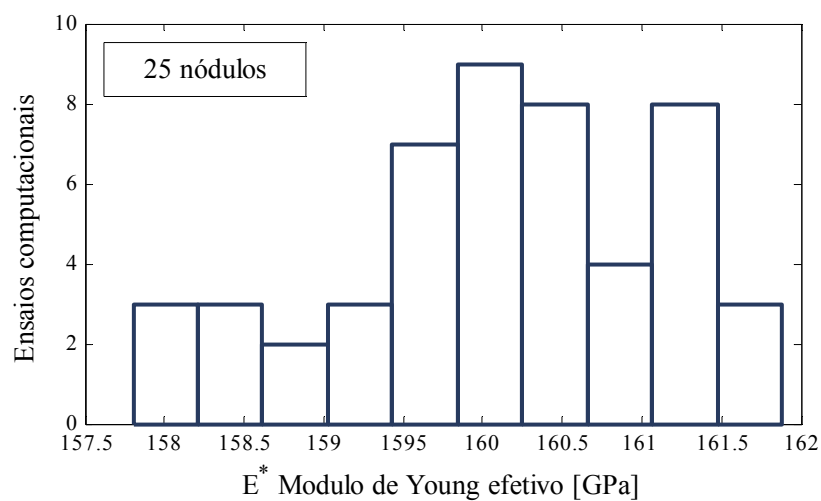


Figura 4.22 - Histograma do módulo de Young efetivo [GPa] para 50 microestruturas com 25 nódulos distribuídas em forma aleatória em cada caso.

Da mesma forma estas simulações são realizadas para microestruturas que contém 2, 4, 6, 8, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 50 e 60 nódulos para estabelecer um tamanho de EVR. Em todos os casos são realizados 50 ensaios computacionais. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4.23 e na Tabela 4.2 para o módulo de Young e na Figura 4.26 e na Tabela 4.3 para o coeficiente de Poisson.

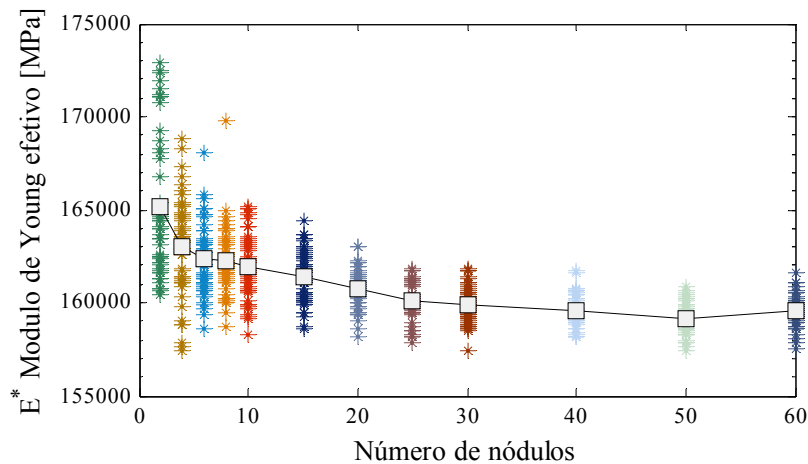


Figura 4.23 - Curva de convergência do EVR. Valores do módulo de Young efetivo para amostras com distintas distribuições aleatórias dos nódulos e contendo um número de nódulos que vá aumentando.

Número de inclusões	Mod. Young médio E_{media}^* [MPa]	Diferença $E_{máx}^* - E_{mín}^*$ [MPa]	Desvio padrão do E^*	Porcentagem $\frac{E_{máx}^* - E_{mín}^*}{E_{media}^*} \times 100$	Porcentagem Desvio padrão $\frac{\text{Desvio padrão}}{E_{media}^*} \times 100$
2	165129	12450	3932	7,54 %	2,38 %
4	163019	11388	2661	6,99 %	1,63 %
6	162331	9380	1904	5,78 %	1,17 %
8	162237	11032	1762	6,80 %	1,09 %
10	161955	6860	1756	4,24 %	1,08 %
15	161437	5736	1406	3,55 %	0,87 %
20	160713	4840	1018	3,01 %	0,63 %
25	160096	4077	988	2,55 %	0,62 %
30	159910	4447	994	2,78 %	0,62 %
40	159622	3550	868	2,22 %	0,54 %
50	159163	3415	820	2,15 %	0,52 %
60	159575	4106	819	2,57 %	0,51 %

Tabela 4.2 - Resultados da avaliação computacional de microestruturas com diferentes distribuições aleatórias de micro-furos para o módulo de Young.

As Tabela 4.2 e Tabela 4.3 apresentam informações estatísticas das amostras como valores médios das propriedades mecânicas efetivas, diferença entre valores máximos e mínimos e desvio padrão de cada caso. Também são mostrados em porcentagem o quanto estas diferenças e

desvios padrões representam sobre os valores médios de cada caso. Os resultados obtidos permitem concluir que uma amostra de material micro-estrutural contendo 25 nódulos é adequada para a obtenção de propriedades efetivas do ADI com uma faixa de variação de 3% para o módulo de Young e 6,5% para o coeficiente de Poisson aproximadamente.

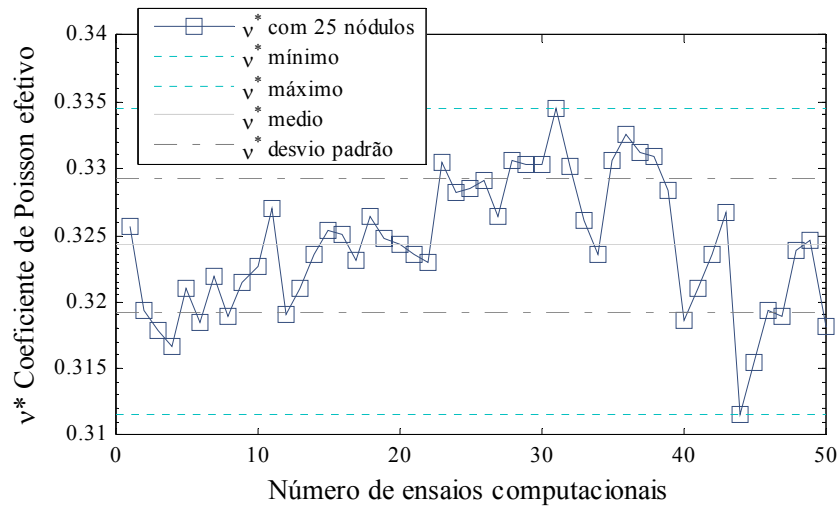


Figura 4.24 - Coeficiente de Poisson efetivo do material resultante para 50 microestruturas com 25 nódulos distribuídos em forma aleatória em cada caso. Indicam-se os valores máximos, mínimos, médios e desvio padrão.

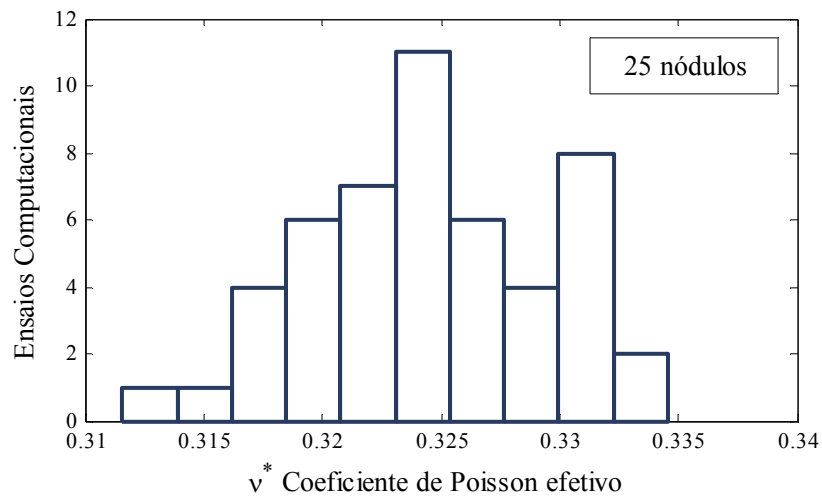


Figura 4.25 - Histograma do coeficiente de Poisson para 50 microestruturas com 25 nódulos distribuídos em forma aleatória em cada caso.

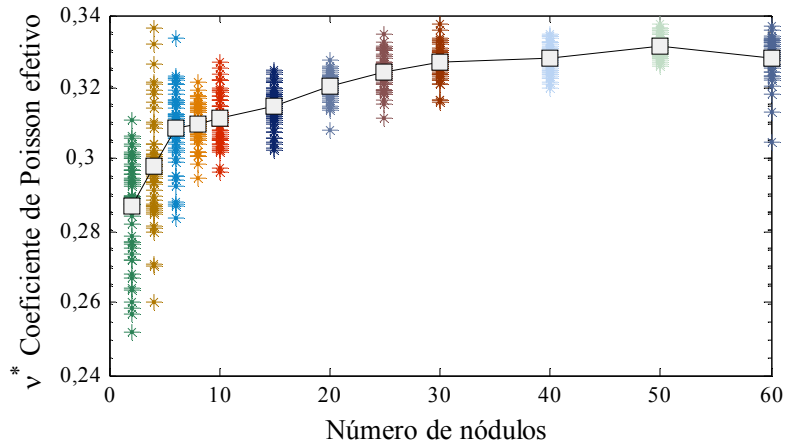


Figura 4.26 - Curva de convergência de EVR para valores do coeficiente de Poisson efetivo para amostras com distintas distribuições aleatórias dos nódulos e contendo um número de nódulos que vá aumentando.

Número de nódulos	Coef. de Poisson médio v_{media}^*	Diferença $v_{max}^* - v_{min}^*$	Desvio padrão de v^*	Porcentagem $\frac{v_{max}^* - v_{min}^*}{v_{media}^*} \times 100$	Porcentagem $\frac{\text{Desvio padrão}}{v_{media}^*} \times 100$
2	0,287	0,059	0,015	20,38 %	5,16 %
4	0,298	0,076	0,016	25,43 %	5,21 %
6	0,309	0,050	0,011	16,22 %	3,47 %
8	0,310	0,026	0,006	8,53 %	1,89 %
10	0,311	0,030	0,007	9,74 %	2,29 %
15	0,315	0,022	0,006	7,13 %	1,83 %
20	0,320	0,019	0,004	6,07 %	1,15 %
25	0,324	0,021	0,005	6,46 %	1,48 %
30	0,327	0,021	0,004	6,50 %	1,35 %
40	0,328	0,015	0,004	4,64 %	1,15 %
50	0,331	0,011	0,003	3,43 %	0,85 %
60	0,328	0,032	0,006	9,85 %	1,75 %

Tabela 4.3 - Resultados da avaliação computacional de microestruturas com diferentes distribuições aleatórias de nódulos para o coeficiente de Poisson.

Note-se das Figura 4.23 e Figura 4.26 que as propriedades mecânicas convergem a um valor desde valores de rigidez mais altos. Estes resultados obtidos verificam o fato que condições de contorno em deslocamentos sobreestimam as propriedades elásticas efetivas (ver apêndice A).

4.7. Análise dos resultados obtidos na simulação do ADI

As propriedades efetivas do ADI obtidas de ensaios mecânicos [Zhang et al., 1999] são de 187 GPa para o módulo de Young e 0,28 para o coeficiente de Poisson. Neste trabalho, a diferença das propriedades obtidas de bibliografia com as estimadas na análise aqui implementada são atribuídas principalmente ao modelo da microestrutura. Em primeiro lugar, esta se modelando um problema intrinsecamente tridimensional que implica interação de esferas como um problema em duas dimensões onde é modelada a interação de cilindros do mesmo

tamanho. Por outro lado, o nódulo de grafite é modelado como um furo. É razoável intuir que os efeitos hidrostáticos sobre a deformação de um furo são diferentes do efeito que ocorre na prática em um nódulo de grafite, onde se tem uma rigidez volumétrica significativa, embora a resistência ao cisalhamento seja muito baixa. Isso leva como consequência a um comportamento mais flexível (módulo de Young menor e Coeficiente de Poisson maior) no caso de se modelar os nódulos como furos. A mesma diferença nas propriedades estimadas é observado em Batista, 2005. Naquele trabalho, para se obter propriedades efetivas de 187 GPa para o módulo de Young é utilizado um $E_m = 250$ GPa para o material da matriz. O modelo de ADI de Batista, 2005 considera os nódulos de grafite como furos em duas dimensões e utiliza o Método dos Elementos Discretos. Nos últimos resultados de Batista, 2006 se observa uma diferença da ordem de 6% em propriedades estimadas como cilindros em duas dimensões e esferas em um modelo tridimensional.

5. PROJETO DE MATERIAIS COM ALGORÍTMOS NÃO DETERMINÍSTICOS

5.1. Introdução

A chave do êxito de muitos materiais modernos consiste em obter um comportamento específico para sua aplicação. Isto se consegue, fundamentalmente, a partir da manipulação de sua micro-estrutura. O objetivo deste trabalho está no estudo de materiais micro-porosos com distribuição aleatória, onde o algoritmo desenvolvido neste capítulo pode ser facilmente estendido para o projeto de materiais compostos em geral. A filosofia básica na construção de tais materiais é selecionar combinações de micro-constituintes para produzir propriedades macroscópicas ou efetivas desejadas. Por exemplo, em aplicações da engenharia estrutural a escolha clássica é uma fase de partículas mais dura que atua como agente rigidizante de um material dúctil empregado como matriz.

Existe uma variedade de dificuldades no projeto computacional de propriedades mecânicas efetivas de materiais com distribuição aleatória. Os três principais problemas são [Zohdi, 2002]: (i) o amplo conjunto de variáveis de decisão tal como a topologia das micro-heterogeneidades, a fração de volume do composto e as propriedades mecânicas das fases, o que conduz a funções objetivo altamente não convexas; (ii) as funções objetivo associadas não são continuamente diferenciáveis com respeito ao espaço de projeto, principalmente devido às restrições na micro-escala tal como limites na intensidade do campo local de tensões desejado; e (iii) a resposta efetiva de diversas amostras de tamanho finito de igual volume mas de diferentes distribuições das micro-heterogeneidades exibem flutuações (como foi estudado no Capítulo 4), resultando em ruído amplificado nas estratégias de otimização onde a sensibilidade ou comparações da função objetivo (FO) são necessárias. Claramente, os métodos de otimização determinísticos clássicos baseados em gradientes não são adequados para resolver este tipo de problemas. Uma alternativa eficiente é a utilização de algoritmos não determinísticos. Existe uma variedade de tais métodos como os chamados *Algoritmos Genéticos* (AG) formulados sobre a base de um conjunto de procedimentos e técnicas baseadas em princípios de seleção natural os quais utilizam o conceito de evolução das espécies (como reprodução, mutação e cruzamento).

A função objetivo para o problema de otimização é colocada como a diferença entre as propriedades mecânicas efetivas desejadas e aquelas resultantes da microestrutura otimizada. Como é assumido um comportamento isotrópico linear do material, o mesmo é completamente representado por duas constantes elásticas independentes, e a expressão para a função objetivo Π é escrita como [Zohdi, 2003]:

$$\Pi = \left| \omega_E \frac{(E^* - E_D^*)}{E_D^*} \right| + \left| \omega_V \frac{(V^* - V_D^*)}{V_D^*} \right| \quad (5.1)$$

onde o sub-índice D denota a constante elástica “desejada”. Os coeficientes ω_E e ω_V são fatores de peso que são estabelecidos pelo usuário em função da importância da correspondente propriedade que se quer projetar [Zohdi, 2003].

As propriedades mecânicas efetivas do material heterogêneo são calculadas seguindo o procedimento proposto no capítulo 4 o qual consiste em avaliar uma relação entre médias. As propriedades são calculadas com as expressões (4.13) ou (4.14) segundo corresponda pelas condições de contorno.

Neste trabalho apresenta-se a implementação de algoritmos genéticos para o projeto de materiais micro-porosos com distribuição aleatória. O AG é complementado com um algoritmo de *Busca Direta* (ver seção 5.3) numa última etapa da otimização para obter um ajuste fino das variáveis de decisão (operação que resulta computacionalmente cara para o AG). Ao mesmo tempo, é proposto e implementado um modelo aproximado da função objetivo visando acelerar o AG. O projeto do material implica na seleção do material base e da fração de volume para se obter as propriedades efetivas desejadas.

5.2. Algoritmos genéticos

Os AG são um conjunto de procedimentos e técnicas baseadas em princípios de seleção natural. Conforme Goldberg, 1999 a popularidade dos AG se deve principalmente a que: (i) não requerem continuidade e/ou diferenciabilidade da função objetivo, (ii) não requerem grande (re)formulação do problema, (iii) não são muito sensíveis ao procedimento de inicialização, (iv) são menos propensos a convergirem a ótimos locais, e (v) são naturalmente paralisáveis.

A idéia dos AG esta baseada no processo evolutivo dos organismos biológicos da natureza. Os indivíduos que têm mais sucesso para se adaptar ao meio ambiente teriam mais oportunidades de sobreviver e se reproduzir, em quanto que os menos aptos serão eliminados. A combinação de características de ancestrais bem ajustados pode produzir indivíduos que são bem mais adaptados do que seus pais. Os AG procuram simular este processo natural pela aplicação de operadores genéticos sobre uma população inicial e suas próximas gerações. Então, o AG repetidamente muda a população de possíveis soluções até satisfazer o critério de convergência. Os passos básicos de um AG são:

1. Gerar aleatoriamente ou com algum critério, uma população inicial.
2. O algoritmo cria uma seqüência de novas populações ou gerações. A cada passo, usam-se os indivíduos na geração atual para criar a próxima geração, segundo os seguintes passos:
 - a. Calcula-se o valor da função objetivo para cada indivíduo (vetor) da população.
 - b. Ordenam-se os indivíduos segundo seja o valor da função objetivo (“*ranking*”).
 - c. Seleciona-se os pais que tenham melhor valor da função objetivo (segundo seja o ranking).
 - d. Criam-se os filhos (*operação genética*). Os filhos podem ser criados fazendo mudanças aleatórias num pai (*mutação*), ou por combinação de um par de pais (*cruzamento*).
 - e. Substituem-se alguns ou todos os indivíduos da população pelos filhos.
3. Se o critério de convergência não for satisfeito retorna para o passo 2.
4. Fim

5.3. Método de busca direta

O *método de busca direta* (MBD) é usado após obter uma solução do algoritmo genético para melhorar a convergência e precisão. Estes métodos também não requerem informação nenhuma do gradiente da função objetivo.

O algoritmo utilizado faz parte do Toolbox “Genetic Algorithm and Direct Search” do MATLAB, 2004. Em cada iteração o algoritmo busca a solução do problema de otimização num conjunto de pontos que determinam uma malha ao redor do ponto atual. A malha é formada somando ao ponto atual um escalar múltiplo de um conjunto de vetores. A base de vetores independentes no caso de três variáveis de decisão é $\{[1\ 0\ 0], [0\ 1\ 0], [0\ 0\ 1], [-1\ 0\ 0], [0\ -1\ 0], [0\ 0\ -1]\}$. No algoritmo implementado todos os pontos da malha são avaliados em cada iteração. Também é implementada a opção de “cache”. Em uma iteração qualquer um ponto da malha pode coincidir com um ponto da malha de uma iteração prévia que já foi avaliada e que não é o ótimo do problema. Esta opção do MBD armazena a história de pontos já avaliados e o algoritmo antes de avaliar um novo ponto verifica se este não está próximo a eles com uma certa tolerância. Se o algoritmo encontra um ponto na malha que tem melhor valor da função objetivo que o atual, esse passa a ser o novo ponto atual da seguinte iteração. Se não, reduz o tamanho da malha. O algoritmo termina o processo quando se satisfaz algum critério de convergência.

5.4. Implementação

O algoritmo proposto é implementado com MATLAB, 2004 e a avaliação da função objetivo é realizada com a função *fobjetivo.m*. Um esquema desta função é ilustrado na Figura 5.1. As variáveis de decisão são a entrada desta função. A sub-rotina *gera_coord.m* gera em forma aleatória as coordenadas das posições do centro das in-homogeneidades, as quais são armazenadas no arquivo *Coordenadas_inclusões.dat*. A quantidade de in-homogeneidades que contém a amostra de material é constante e ao mesmo tempo independente da fração de volume ϕ . As in-homogeneidades apresentam sempre um valor de raio unitário que é usado para normalizar as dimensões da microestrutura. A sub-rotina *microestrutura.m* constrói o arquivo de entrada no código de MEC o qual resulta no arquivo *Problema_elástico.bem*. Este arquivo contém toda a informação necessária para resolver o problema elástico na microestrutura testada como coordenadas dos nós, conectividade dos elementos, condições de contorno, etc. Logo após o problema é resolvido com a formulação de elementos de contorno desenvolvida no capítulo 3 e a solução de trações e deslocamentos no contorno da microestrutura são tabuladas no arquivo *Solução_MEC.log*. Utilizando estes dados a sub-rotina *propriedades.m* computa as propriedades mecânicas efetivas segundo é mostrado no Capítulo 4 da presente dissertação. Finalmente a FO (5.1) é avaliada. Este esquema de avaliação da FO é usado junto com o Toolbox de MATLAB Genetic Algorithm and Direct Search para a otimização das propriedades do material.

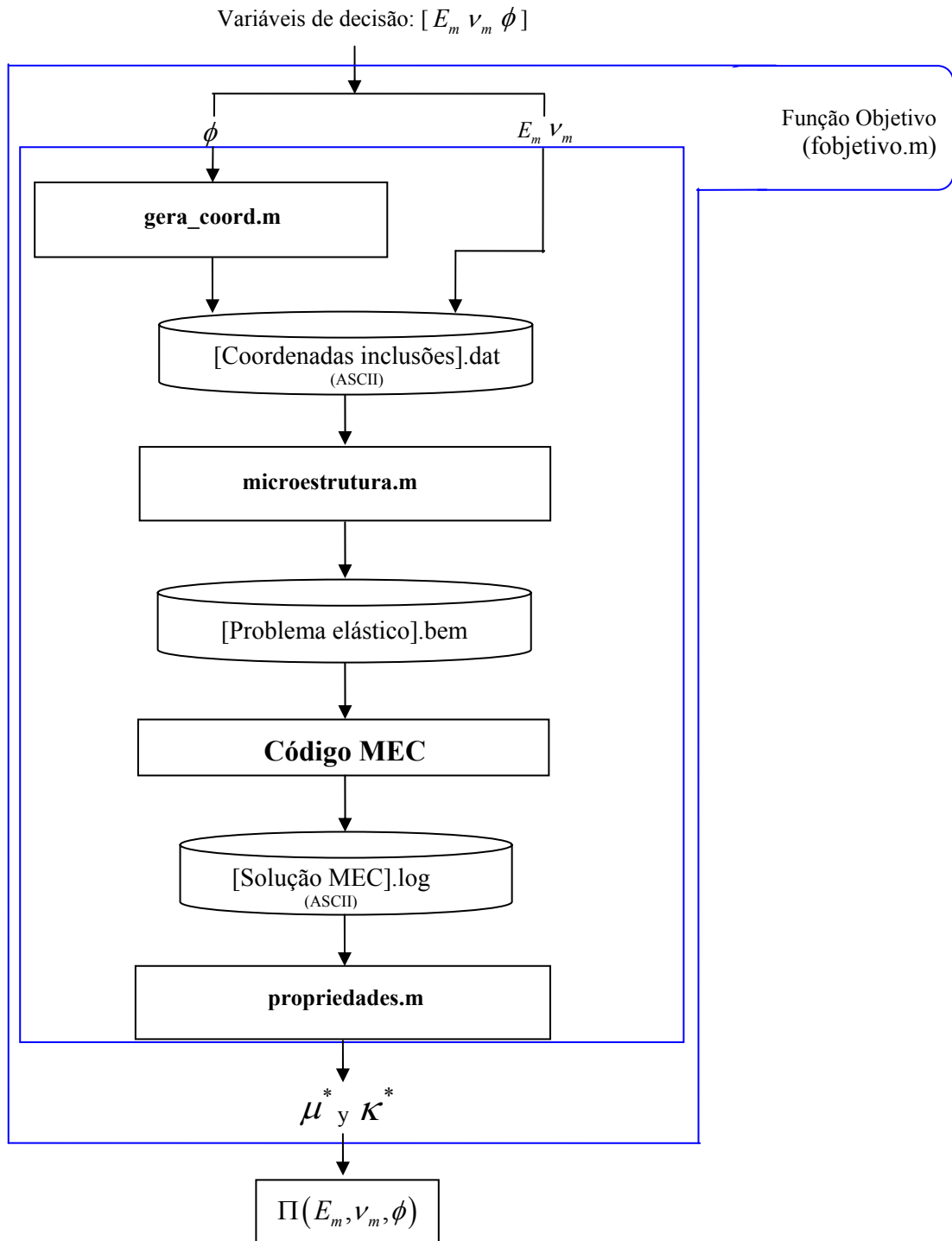


Figura 5.1 - Esquema da função fobjetivo.m

5.5. Exemplo de aplicação

Para efeito de demonstrar o desempenho e capacidades do algoritmo desenvolvido apresenta-se nesta seção os resultados de um exemplo de aplicação. Este consiste no projeto de um material micro-poroso com propriedades elásticas efetivas de $E_D^* = 160000$ MPa e $\nu_D^* = 0,32$

correspondendo ao problema inverso ao exemplo apresentado no Capítulo 4. Os coeficientes ω_E e ω_ν são fixados unitários. Logo a função objetivo (5.1) tem a forma:

$$\Pi(\phi, E_m, \nu_m) = \left| \frac{(E^* - 160000\text{MPa})}{160000\text{MPa}} \right| + \left| \frac{(\nu^* - 0,32)}{0,32} \right| \quad (5.2)$$

sabendo que $E^* = E^*(\phi, E_m, \nu_m)$ e $\nu^* = \nu^*(\phi, E_m, \nu_m)$. O módulo de Young E_m , o coeficiente de Poisson ν_m da matriz e a fração de volume ϕ do material são colocados como variáveis de projeto. Permite-se uma variação da fração de volume em uma faixa de $0,01 \leq \phi \leq 0,15$ escolhida arbitrariamente. As condições de estabilidade de Drucker que garantem que a matriz de elasticidade da matriz da microestrutura seja positiva definida completam as restrições do problema de otimização. O conjunto de restrições de desigualdade são impostas por penalidade. Assim, aos indivíduos que não satisfazem tais restrições, atribui-se um valor arbitrariamente elevado da FO sem ser avaliados com a função *fobjetivo.m*. Baseando-se nos resultados obtidos no Capítulo 4, o tamanho do EVR é fixado para conter 25 nódulos, e os raios dos micro-poros são iguais e unitários. Logo, a fração de volume é ajustada com o tamanho da matriz do material. O problema é modelado com a hipótese de EPT.

Os parâmetros do AG são resumidos na Tabela 5.1. O tamanho da população é escolhido de 30 indivíduos. O número de filhos elite é a quantidade de indivíduos da população que apresentam os melhores valores da FO da geração atual. Esses são automaticamente transferidos à próxima geração sem mudança nenhuma. Este parâmetro é selecionado com 3 (10% da população). O cruzamento dos indivíduos é realizado com a estratégia de ponto simples. Na operação de cruzamento por ponto simples é selecionado de forma aleatória um número inteiro n entre 1 e o número de genes que codificam ao indivíduo. O filho é criado com os n primeiros genes de um pai e os últimos (número total de genes - n) genes do outro pai. Assim, admitindo-se o ponto de cruzamento n igual a 5 e os pais representados por [a b c d e f g] e [1 2 3 4 5 6 7], resultam filhos como [a b c d e 6 7] e [1 2 3 4 5 f g]. A mutação é adotada como uniforme (probabilidade de 0,01). Como já foi mencionado, o módulo de Young E_m , o Coeficiente de Poisson ν_m da matriz, e a fração de volume do material ϕ são selecionados como variáveis de projeto.

Parâmetro	Valor
Tamanho da população	30
Critério de parada	8 gerações
Número de filhos elite	3
Número de filhos com mutação	Uniforme (0,01)
Número de variáveis de projeto	3
Cruzamento	Ponto simples

Tabela 5.1 - Parâmetros de entrada para o AG.

Na Figura 5.2 é apresentada a convergência do AG onde se indicam o valor médio e o melhor valor (o indivíduo melhor adaptado) de cada geração. Logo de 8 gerações o algoritmo resulta no vetor solução (8) sendo que a primeira componente corresponde ao módulo de Young E_m em MPa, a segunda ao coeficiente de Poisson ν_m da matriz e a terceira à fração de volume ϕ . A Figura 5.3 mostra o valor da FO para cada um dos indivíduos da última geração.

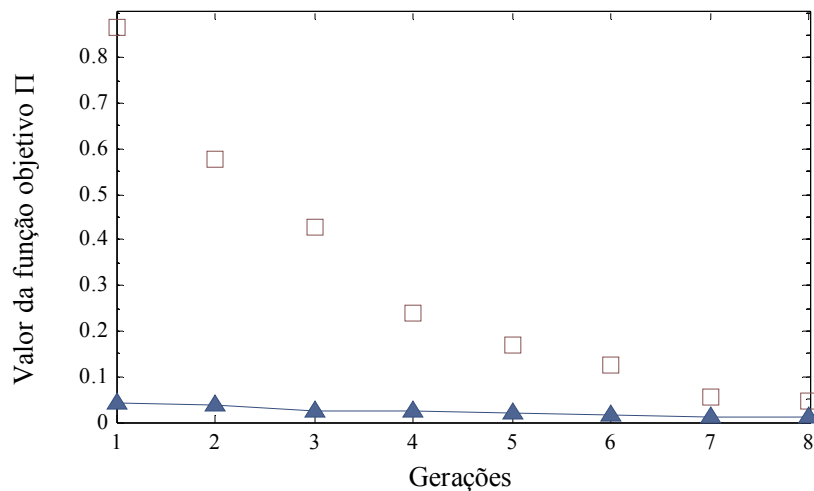


Figura 5.2 - Convergência do AG. Os triângulos correspondem aos valores médios da função objetivo e os círculos ao melhor valor em cada geração.

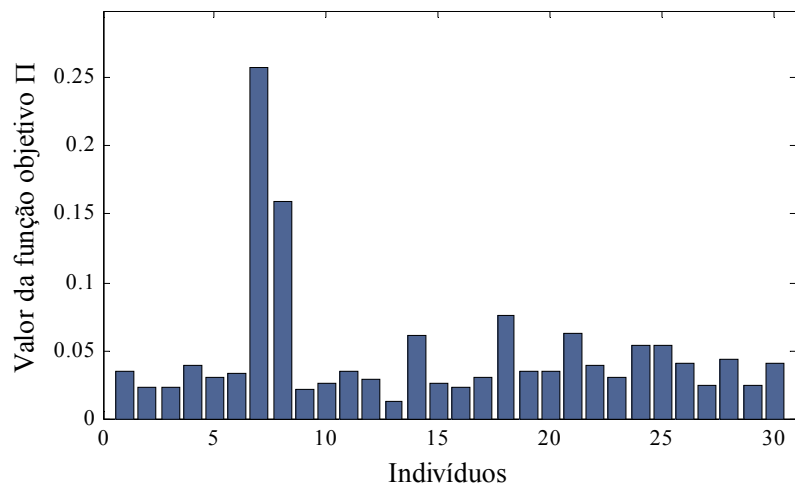


Figura 5.3 – Valor da FO de cada um dos indivíduos na última geração.

$$\Lambda_{AG} = [203310 \ 0,318 \ 0,0618] \quad (5.3)$$

O vetor solução Λ_{AG} corresponde aos seguintes valores da FO e propriedades efetivas mecânicas:

$$\Pi(\Lambda_{AG}) = 0,01275 \quad (5.4)$$

$$E^* = 161032 \text{ Mpa} \quad (5.5)$$

$$\nu^* = 0,322 \quad (5.6)$$

O vetor de variáveis de projeto inicial do MBD Λ_{MBD}^i é o mesmo vetor resultante do AG, Λ_{AG} . A Figura 5.4 mostra a convergência do método de busca direta, sendo que, é possível verificar que logo após de 18 iterações se obtém por este método o vetor resultante Λ_{MBD}^f :

$$\Lambda_{MBD}^f = [204383 \ 0,3216 \ 0,06961] \quad (5.7)$$

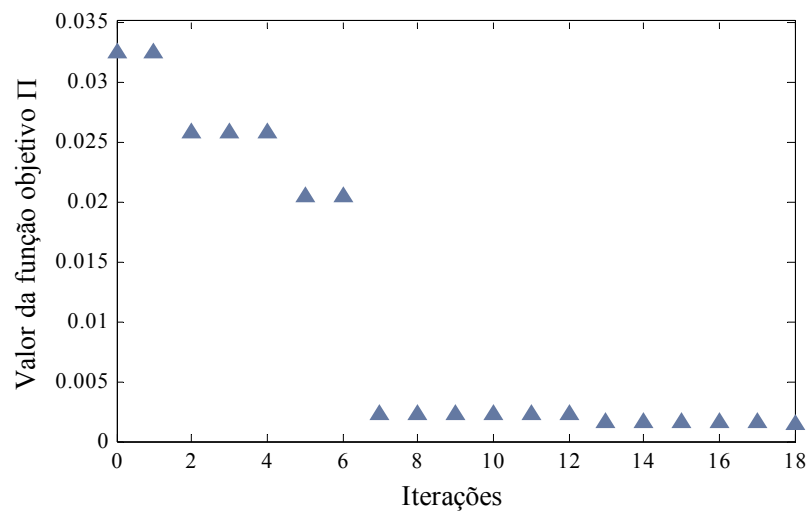


Figura 5.4 - Convergência do MBD.

O vetor de variáveis de projeto solução Λ_{MBD}^f corresponde aos seguintes valores da função objetivo e propriedades mecânicas efetivas.

$$\Pi(\Lambda_{MBD}^f) = 0,00076326 \quad (5.8)$$

$$E^* = 160090 \text{ MPa} \quad (5.9)$$

$$\nu^* = 0,3199 \quad (5.10)$$

As propriedades efetivas encontradas (5.9) e (5.10) representam um erro relativo às propriedades efetivas desejadas de 0,056% para o módulo de Young e 0,031% para o coeficiente de Poisson.

Finalmente, é importante notar que em situações práticas a possibilidade de fabricação do material depende que material da matriz apresente propriedades coincidentes com aquelas que resultam do problema de otimização.

5.6. Algoritmo genético com avaliação aproximada da função objetivo

Para acelerar os AG podem ser utilizados modelos aproximados para obter o valor da FO. A incorporação de modelos aproximados em computação evolutiva deveria assegurar a convergência a um ótimo global (ou próximo de ele) e a redução do custo computacional tanto quanto fosse possível. Quando o modelo aproximado é usado junto com a função original um *modelo de gerenciamento* ou *controle da evolução* é requerido. Assim, um indivíduo que é avaliado com a FO original é chamado *indivíduo controlado* e uma geração que é avaliada com a FO original é chamada *geração controlada*. Então o modelo de gerenciamento pode ser (Fonseca et al. 2004):

- *Sem Controle*: O modelo aproximado é de alta fidelidade e a FO original não é usada nas avaliações.
- *Controle de Evolução Fixo*: Dois esquemas podem ser usados: baseados em indivíduos e baseados em gerações. No controle baseado em indivíduos alguns destes são avaliados com o modelo aproximado e outros são avaliados com a FO original. No controle baseado em gerações toda a geração é tanto avaliada com o modelo aproximado ou com a FO original.
- *Controle de Evolução Adaptativo*: A frequência do controle de evolução depende da precisão observada no modelo aproximado.

Neste trabalho, um *Controle de Evolução Fixo* é empregado. A estratégia proposta usa tanto controle baseado em indivíduos como baseado em gerações. Gerações controladas e aproximadas são processadas alternativamente, ou seja, uma geração aproximada é sempre seguida por uma geração controlada. Ao mesmo tempo, uma pequena fração de indivíduos nas gerações aproximadas tem a sua atitude avaliada com a FO original (indivíduos controlados). O número de indivíduos controlados é especificado pela *fração de controle*, a qual é definida como a relação entre indivíduos controlados e o tamanho da população.

Indivíduos avaliados com o modelo aproximado herdam seu valor da FO dos pais. Este esquema é similar ao proposto por Fonseca et al., 2004. No presente trabalho é proposto que o valor da FO resulte da media ponderada dos valores dos pais, com os pesos dados pelo ponto de cruzamento. Assim, a FO resultante depende do número de genes que cada indivíduo herda dos pais. O diagrama da Figura 5.5 ilustra o esquema proposto o qual usa a estratégia de ponto simples.

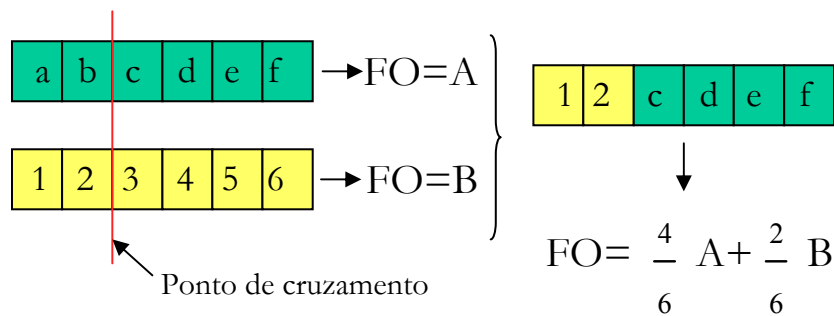


Figura 5.5 - Diagrama do esquema de herança da FO.

O procedimento descrito acima é implementado em MATLAB adaptando o Toolbox *Genetic Algorithm and Direct Search*. A função *ga.m* é modificada para incluir a nova variável *Fração de controle* como é mostrado na Figura 5.6.

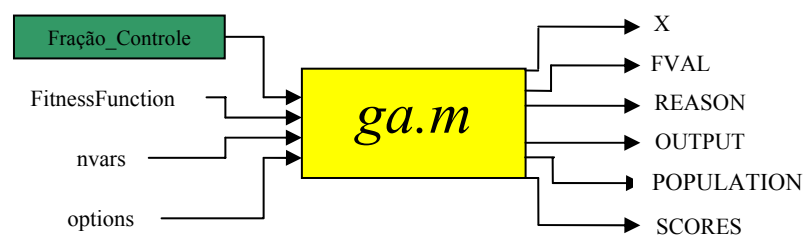


Figura 5.6 - Diagrama de variáveis da função *ga.m*.

Então, as variáveis de entrada para a função *ga.m* modificada são: a Fração de controle (*Fração controle*), a função objetivo (*FitnessFunction*), o número de variáveis (*nvars*) e alguns parâmetros opcionais (*options*). As variáveis de saída são: o indivíduo avaliado (*X*), o valor da FO do indivíduo avaliado (*FVAL*) e algumas outras informações. Durante o esquema de otimização a primeira geração é sempre controlada. A segunda geração é aproximada, cujo número de indivíduos é controlado conforme a fração de controle. O processo continua alternando gerações controladas e aproximadas.

A função *stepGA.m* do Toolbox de MATLAB computa os valores da FO dos novos indivíduos. Esta função (a qual é chamada por *ga.m*) é também adaptada para inserir o modelo aproximado da FO. Assim, duas novas variáveis são incluídas: *Fração_Control* e *Control*. Esta última serve para indicar se a geração é controlada ou aproximada. A função *stepGA.m* computa a FO dos novos indivíduos usando a função *fval.m* e *crossoversinglepoint.m*. A última há sido adaptada para incluir o cálculo dos pesos no modelo aproximado. Os pesos calculados são armazenados no vetor *pesosPonder*. A Figura 5.7 ilustra o diagrama com as mudanças introduzidas na função *stepGA.m*.

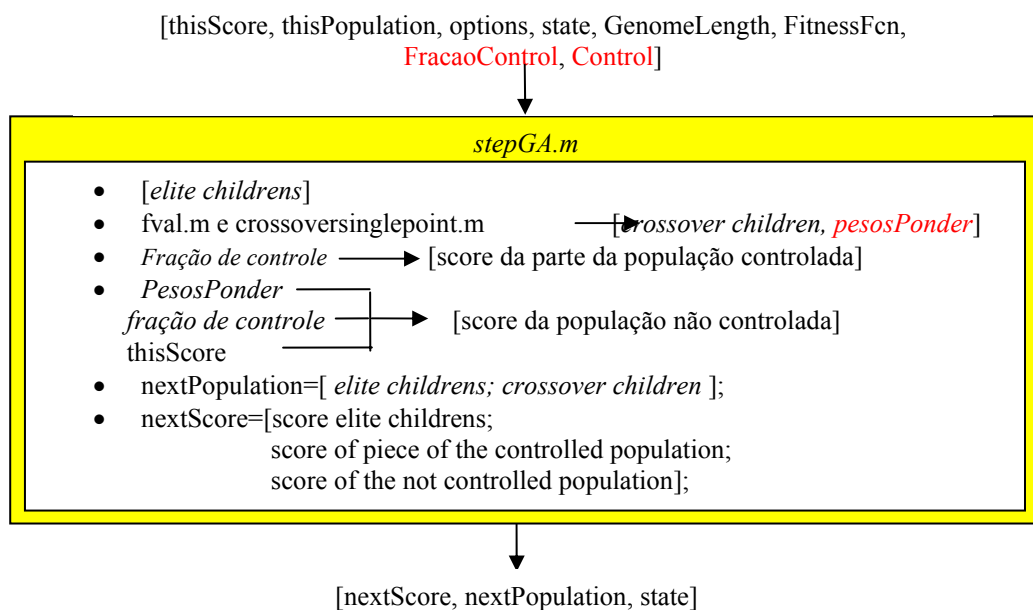


Figura 5.7 - Esquema da função *stepGA.m* modificada.

5.7. Exemplo de aplicação do AG com modelo aproximado

A performance e capacidade do algoritmo desenvolvido são ilustradas nesta seção resolvendo o mesmo exemplo de aplicação da seção 6.5. Os parâmetros do AG são os mesmos do exemplo em questão e são resumidos na Tabela 5.1. A fração de controle é de 20% (5 indivíduos) para as gerações aproximadas.

O problema é resolvido usando duas configurações diferentes do AG. A primeira corresponde à avaliação aproximada da FO com o esquema de pesos ponderados pelo ponto de cruzamento proposto neste trabalho. A outra configuração corresponde ao esquema onde a FO aproximada é calculada como a média aritmética do valor da FO dos pais (Fonseca et al. 2004). O critério de parada é selecionado arbitrariamente de 8 gerações em todos os casos. Este valor é

escolhido depois de realizar uma série de testes preliminares os quais mostram que 8 gerações são suficientes para alcançar resultados com menos que o 2% em E^* e ν^* (no valor da FO).

Os resultados obtidos são apresentados na Figura 5.8 e na Tabela 5.2 junto com os resultados obtidos na seção 6.5 com o AG convencional. Na Tabela 5.2 é apresentada uma rodada adicional com o AG convencional. Pode ser observado que os dois algoritmos aproximados se comportam de forma similar, produzindo resultados com menos do que 3% de erro. A redução no tempo computacional para os AG aproximados é em torno de 30%.

AG	Módulo de Young da matriz [MPa]	Coefficiente de Poisson da matriz	Fração de volume	Função Objetivo	Tempo [seg]
Convencional 1	203310	0,318	0,0618	0,01275	90763
Convencional 2	235210	0,285	0,1048	0,0963	91456
Aproximado média	203310	0,3116	0,0579	0,0284	58646
Aproximado ponderada	203310	0,3116	0,0579	0,0234	64896

Tabela 5.2 – Resultados dos AG convencionais e AG com as duas configurações aproximadas que são consideradas.

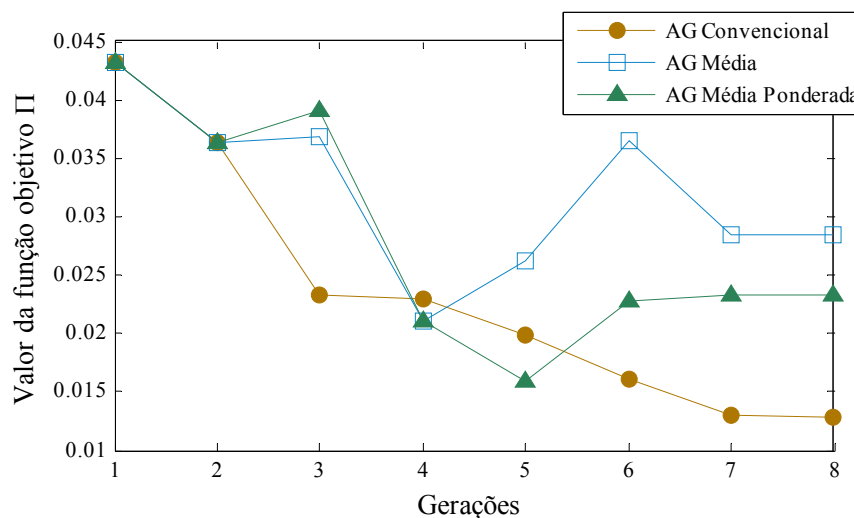


Figura 5.8 - Convergência do AG convencional e dos AG com as configurações aproximadas.

5.8. Considerações finais

Neste capítulo é desenvolvido um procedimento geral para o projeto computacional de materiais compostos micro-heterogêneos. O procedimento combina algoritmos genéticos e de busca direta com uma formulação de elementos de contorno desenvolvida na presente dissertação. Quanto aos resultados obtidos nos exemplos analisados é conveniente fazer algumas considerações. Na Figura 5.2 pode ser observado que já na primeira geração se obtém um indivíduo com um valor da FO de 0,043 o qual corresponde a uma diferença de 4,3 % entre as

propriedades efetivas obtidas e as desejadas. Note-se que o valor médio da FO da geração é da ordem dos 85%. Lembrando-se os resultados do Capítulo 4, a diferença entre o módulo de Young máximo e o mínimo que é obtido nos 50 testes computacionais realizados com 25 nódulos, representa 2,5% do valor médio. E para o coeficiente de Poisson o valor correspondente é de 6,46%. Isto significa que no exemplo apresentado, a solução na primeira geração é menor que a faixa de flutuação da resposta macroscópica.

A estratégia de aproximação do AG mostra grandes ganhos no tempo computacional, enquanto a convergência é mais lenta que no AG convencional, e não é monotônica.

6. CONCLUSÕES

Este trabalho abordou essencialmente os seguintes pontos:

- Foi desenvolvida uma formulação de elementos de contorno para modelar microestruturas de materiais compostos em duas dimensões com furos e inclusões cilíndricas de materiais distintos e raio variável. Nessa formulação, a inhomogeneidade não é discretizada na forma convencional, mas utilizando um único elemento. Este elemento emprega funções de forma de base trigonométrica para interpolar as variáveis físicas e geométricas. Isto resulta em uma formulação mais eficiente computacionalmente que a formulação convencional de elementos de contorno. A estratégia de discretização da microestrutura é simples, bastando discretizar o contorno da mesma com elementos convencionais e indicar a posição do centro de cada uma das inhomogeneidades, o raio e a ordem do elemento. A formulação foi apresentada em uma forma geral, possibilitando a modelagem de diferentes coeficientes de Poisson entre a matriz e inclusões. Como vantagem a ser explorada na modelagem e projeto de materiais com distribuição aleatória foi apresentada uma condensação estática do sistema de equações. Essa técnica permite armazenar a matriz de coeficientes que correspondem à integração nos elementos do contorno da matriz de material quando se faz colocação nesses mesmos elementos. Assim, não é necessário recalcular esta matriz quando a distribuição de inhomogeneidades na matriz é alterada.
- Foi proposto e implementado um procedimento de regularização das integrais fortemente singulares no *elemento de furo* utilizando o método direto. O estudo do método direto para regularizar os núcleos fortemente singulares do elemento de furo permitiu reconhecer nas integrais da forma $\int_{-1}^{+1} F_{ij} [x(\eta), \xi(p)] \phi_a(\eta) J(\eta) d\eta$ quais são efetivamente singulares e quais as regulares. Uma das contribuições deste trabalho foi o desenvolvimento analítico dos termos F_{-1}^{12} e F_{-1}^{21} da expansão de Laurent que regularizam as integrais para os elementos de furo e inclusão. Os experimentos numéricos apresentados no Capítulo 3 mostraram que a colocação no contorno fictício torna as funções menos comportadas e muito mais difíceis de se integrar numericamente à medida que o ponto de colocação se aproxima do elemento de furo.
- Foram propostas funções de interpolação de base trigonométrica para desenvolver elementos de alta ordem com 4, 5 e 6 nós.

- Com o objetivo de melhorar a precisão dos resultados quando um furo interage com outros furos, foram desenvolvidos *elementos de furo* de ordem superior que utilizam as funções de forma propostas. Esses elementos podem modelar configurações deformadas mais complexas que as do tipo elíptico que são obtidas com o elemento de 3 nós. Foi mostrado que esses novos elementos descrevem o campo de deslocamentos com maior precisão que o elemento original de 3 nós, como era de esperar. Aliás, com o elemento de 4 nós se consegue melhoras consideráveis na precisão dos resultados dos exemplos analisados, sem um aumento significativo do custo computacional. Os elementos de 4, 5 e 6 nós utilizam funções de forma mais complexas resultando em núcleos mais difíceis de se integrar. O sistema de equações final do MEC com esses elementos de ordem superior resultaram mal condicionados para relações onde o diâmetro do furo é maior que 80% do comprimento do lado da placa. Além disso, é ressaltada a importância de se implementar procedimentos mais eficazes para o cálculo de integrais quase-singulares em trabalhos futuros.
- A ferramenta computacional desenvolvida foi utilizada na modelagem de materiais micro-porosos com distribuição aleatória para se obter propriedades mecânicas elásticas efetivas. Foram obtidas expressões para calcular o módulo de Young e o coeficiente de Poisson de materiais isotrópicos ou transversalmente isotrópicos, tanto para as hipóteses de EPT como de EPD, sob condições de contorno de deslocamento linear. Foi realizada uma análise estatística para determinar o EVR de um material com propriedades e distribuição estatística de micro-furos tomados da microestrutura de *ferro fundido nodular ferrítico* e considerando a hipótese de EPT. Nesse problema, onde a resposta macroscópica apresenta flutuações, a análise estatística possibilita a determinação da quantidade de inhomogeneidades necessária para se obter propriedades efetivas.
- Foi desenvolvido um procedimento geral para o projeto de materiais micro-heterogêneos que combina AG com o MBD e a formulação de elementos de contorno desenvolvida. O mesmo foi implementado para resolver o problema inverso de determinar as características microestruturais para se obter as propriedades efetivas do material modelado anteriormente. A implementação apresentada neste trabalho se limita à análise de materiais com comportamento elástico linear. O algoritmo de projeto de materiais proposto é flexível e pode ser facilmente estendido a problemas em três dimensões, topologias complexas das partículas e leis de comportamento não-linear. Ao mesmo tempo pode-se considerar restrições de projeto no nível da micro-

escala, tal como limites na intensidade dos campos de tensões. Esse tipo de restrições é de suma importância no projeto de materiais de alta resistência onde algum critério de falha é assumido em função dos campos internos.

- Visando acelerar o AG uma estratégia para aproximar o valor da função objetivo também foi proposta. No modelo aproximado o valor da função objetivo de um indivíduo é estimada como a média ponderada do valor dos pais de acordo com o ponto de cruzamento. Esta estratégia combina controle baseado em gerações com controle baseado em indivíduos. Os resultados obtidos mostram importantes melhoras no tempo computacional com poucas perdas na precisão. Considera-se necessário realizar mais testes com distintos exemplos.

6.1. Sugestões para continuidade do trabalho

Um número de tópicos complementam ou dão continuidade à linha de pesquisa iniciada com este trabalho. Na presente implementação é conveniente estudar os casos que a matriz do sistema de equações final do MEC resultara mal condicionada e estudar uma forma eficiente de se integrar os núcleos quase-singulares. Também é interessante comparar os resultados obtidos para propriedades efetivas com soluções analíticas existentes. É conveniente estender o número de exemplos analisados e considerar casos em que a resposta macroscópica é anisotrópica. A ferramenta implementada pode ser utilizada para modelar materiais com propriedades macroscópicas gradualmente variáveis (*Functionally Graded Materials*). Como possíveis futuros tópicos de pesquisa se sugerem:

- Implementar a formulação para o caso inclusões materiais, além de furos.
- Estender a formulação a três dimensões para fibras com isotropia transversal.
- Estender a formulação a três dimensões para esferas com as funções harmônicas esféricas como sugere Crouch, 2004.
- Implementar procedimentos de integração mais efetivos para os elementos descontínuos quadráticos (método direto) e para as integrais quase-singulares.
- Estender a formulação para estudar materiais inelásticos ainda sob a hipótese de deformações infinitesimais como no caso de fases com comportamento visco-elástico.
- Estender a formulação a termo-elasticidade para estudar propriedades termo-elásticas macroscópicas.
- Estudar interfaces de um outro material entre matriz e inclusões.
- Estudar o efeito de distintos parâmetros e técnicas do AG no projeto de materiais.

- Desenvolver um elemento de furo com interface coesiva para modelar o fenômeno de dano em problemas envolvendo descolamento (*debonding*).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aidun J. B., Lo D. C. S., Trucano T.G. & Fye R. M., 1999. *Representative Volume Size: A comparison of Statistical Continuum Mechanics and Statistical Physics*. **Sandia National Laboratories Report**. SAND99-1176.

Bakhvalov, N., Panasenko, G., 1984. “**Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media**”. Kluwer, New York.

Banerjee P. K., 1994. “**The Boundary Element Methods in Engineering**”, Mc Graw-Hill Book Company.

Banerjee P. K. & Butterfield R., 1981. “**Boundary Element Methods in Engineering Science**”, Mc Graw-Hill Book Company.

Banerjee P. K. & Henry D. P., 1992. *Elastic Analysis of Three-dimensional Solids with Small Holes by BEM*, **International Journal of Solids and Structures**, vol. 29, pp. 2423-2440.

Batista R. G., 2005. *Exame de Qualificação a Doutorado*. **Universidade Federal do Rio Grande do Sul**. Porto Alegre. Brasil.

Batista R. G., 2006. *Comunicação pessoal*. Porto Alegre. Brasil.

Batista R. G., Iturrioz I. & Cisilino A., 2003. *Aplicación del Método de los Elementos Discretos a la Homogenización de las Propiedades Mecánicas de Materiales Microporosos*. **ENIEF 2003 XIII Congreso Sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones**, Bahía Blanca. Argentina. *Mecánica Computacional*, v. XXII.

Beer G. & Watson J. O., 1992. “**Introduction to Finite and Boundary Element Methods for Engineers**”, John Willey & Sons.

Berdin C., Dong M. J., Prioul C., 2001. *Local Approach of damage and fracture toughness for nodular cast iron*. **Engineering Fracture Mechanics**, vol. 68, pp. 1107-1117.

Böhm H. J., 2004. “**A Short Introduction to Basic Aspects of Continuum micromechanics**”, Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics. Vienna University of Technology. CDL-FMD-Report.

Brebbia C. A. & Dominguez J., 1992. “**Boundary Elements. An Introductory Course**” Second Edition. Computational Mechanics Publications. Southampton Boston – Mc Graw-Hill Book Company.

Cowin S. C. & Mehrabadi M. M., 1992. *The Structure of the Linear Anisotropic Elastic Symmetries*. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**. vol. 40, pp. 1459-1471.

Crouch S.L., 2004. *Computational Modeling of Composite and Functionally Graded Materials*. **U.S. – South America Workshop Mechanics and Advanced Materials Research and Education**, Rio de Janeiro, Brazil August 2 – 6.

Dong C. Y. & Lee K. Y., 2004. *Stress Analysis of an Infinite Anisotropic Elastic Medium Containing Inclusions Using the Boundary Point Method*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 28, pp. 1293–1302.

Dong C. Y., Lo S. H. & Cheung Y. K., 2002. *Application of the Boundary-domain Integral Equation in Elastic Inclusion Problems*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 26, pp. 471–477.

Dong C. Y., Lo S. H. & Cheung Y. K., 2003. *Stress Analysis of Inclusion Problems of Various Shapes in an Infinite Anisotropic Elastic Medium*. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 192, pp. 683-696.

Drugan W. J. & Willis J. R., 1996. *A Micromechanics-based Nonlocal Constitutive Equation and Estimates of Representative Volume Element Size for Elastic Composites*. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**. vol. 44, pp. 497-524.

Fonseca, L. G., Barbosa, H. J. C., Lemonge, A. C. C. 2004. *A Genetic Algorithm with Aproximate Fitness Evaluation for Structural Optimization*. **XXV CILAMCE Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**.

gera_coord, 2004. “**Guía del Usuario**”. División Soldadura y Fractomecánica. INTEMA. Universidad Nacional de Mar del Plata.

Goldberg, D. E. 1999, “**Genetic algorithms in search optimization & machine learning**”. Addison Wesley Longman.

Guiggiani M., 1998. *Formulation and Numerical Treatment of Boundary Integral Equations with Hypersingular Kernels*. V. Sladek and J. Sladek, eds. **Singular Integrals in B. E. Methods, Computational Mechanics Publications**, Chapter 3, pp. 85-124.

Guiggiani M. & Casalini P., 1987. *Direct Computation of Cauchy Principal Value integrals in Advanced Boundary Elements*. **International Journal of Numerical Methods in Engineering**. vol. 24, pp. 1711-1720.

Guiggiani M. & Casalini P., 1989. *Rigid-body Translation with Curved Boundary Elements*, **Applied Mathematical Modeling**, Vol. 13, pp. 365-368.

Guiggiani M. & Gigante A., 1990. *A General Algorithm for Multidimensional Cauchy Principal Value integrals in the Boundary element Method*. **Journal of Applied Mechanics**, vol. 57, pp. 906-915.

Guiggiani M., Krishnasamy G., Rudolphi T. J & Rizzo F. J., 1992. *A General Algorithm for the Numerical Solution of Hypersingular Boundary Integral Equations*. **Journal of Applied Mechanics**, vol. 59, pp. 604-614.

Hashin Z., 1983. *Analysis of Composite Materials. A Survey*. **Journal of Applied Mechanics**. Vol. 50, pp. 481-505.

Henry D. P. & Banerjee P. K., 1991. *Elastic Analysis of Three-dimensional Solids with small Holes by BEM*, **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 31, pp. 369-384.

Hill R., 1963. *New Derivations of Some Elastic Extremum Principles*. **Applied Mechanics**, Prager Anniversary Volume, New York, pp. 91-106.

Hollister S. & Kikuchi N., 1997. “**Lecture Notes – Computational Methods in Biomechanics**”. ME/BIOE 599 –University of Michigan.

Hori M. & Nemat-Nasser S., 1999. *On Two Micromechanics Theories for Determining Micro-Macro Relations on Heterogeneous Solids*. **Mechanics of Materials**, vol. 31, pp. 667-682.

Hu N., Wang B., Tan G. W., Yao Z. H. & Yuan W. F., 2000. *Effective Elastic Properties of 2-D Solids with Circular holes: Numerical Simulations*. **Composites Science and Technology**, vol. 60, pp. 1811-1823.

Kelvin L., 1848. *Note on the Integration of the Equation of Equilibrium of an Elastic Solid*. **Mathematical and Physical papers**, vol. 1 97-98. Cambridge University Press.

Knight M. G., Wrobel L. C. & Henshall J. L., 2003. *Micromechanical Response of Fibre-reinforced Materials Using the Boundary Element Technique*. **Composite Structures**, vol. 62, pp. 341-352.

Kouznetsova V. G., 2002, *Computational Homogenization for the Multi-scale Analysis of Multi-phase Materials*. PhD Thesis, **Technische Universiteit Eindhoven Holanda**.

Mackerle J., 2002. *Metal Matrix Composites: Finite Element and Boundary Element Analysis. A Bibliography (1997-2000)*. **Finite Elements in Analysis and Design**. vol. 38, pp. 659-667.

Malvern L. E., 1969. **Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium**, Prentice-Hall.

Maple, 2003. “**User’s Guide version 9.01**”. The Maplesoft, Waterloo Maple Inc.

Marczak R. J. & Creus G. J., 2002. *Direct Evaluation of Singular Integrals in Boundary Element Analysis of Thick Plates*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 26, pp. 653–665.

MATLAB, 2004. “**User’s Guide version 7.0**”. The MathWorks, Inc.

Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L., 2001. *A Galerkin boundary integral method for multiple circular elastic inclusions*. **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 52, pp. 1069–106.

Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L., 2002. *A Galerkin boundary integral method for multiple circular elastic inclusions with homogeneously imperfect interfaces*. **International Journal of Solids and Structures**, vol. 39, pp. 4723–46.

Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L., 2004. *A Galerkin boundary integral method for multiple circular elastic inclusions with uniform interphase layers*. **International Journal of Solids and Structures**, vol. 41, pp. 1285–311.

Mura T., 1993. “**Micromechanics of defects in solids**”. 2nd Edición. Kluwer Academic Publishers.

Nemat-Nasser S. and Hori M., 1999. “**Micromechanics: overall properties of heterogeneous solids**”. 2nd Edition, Elsevier.

Ortiz J., Cisilino A. P. & Otegui J. L., 2001. *Effect of Microcracking on the Micromechanics of Fatigue Crack Growth in Austempered Ductile Iron*. **Fatigue & Fracture of Engineering Material & Structure**, vol. 24, pp. 591-605.

Paris F., 1998. “**Teoría de la Elasticidad**”, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad de Sevilla.

Pedersen P., 1994. *Concurrent Engineering Design of and with Advanced Materials*. **Internal Report. Department of Solid Mechanics. The Technical University of Denmark.**

Pundale, S.H., Rogers, R.J. & Nadkarni, G.R., 1998. *Finite Element Modeling of Elastic Modulus in Ductile Irons: Effect of Graphite Morphology*, **American Foundrymen's Society Transactions**, Vol. 106, pp. 99-105.

Q-S. Yang & Qin Q-H., 2004. *Micro-mechanical analysis of composite materials by BEM*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 28, pp. 919–926.

Sanchez-Palencia, E., 1981. “**Non-homogeneous Media and Vibration Theory**”, Lecture Note in Physics 127, Springer, Berlin.

Stroud, A. H. & Secrest D., 1966. “**Gaussian Quadrature Formulas**”, Prentice-Hall.

Suquet P. M., 1985. “**Local and global aspects in the mathematical theory of plasticity**”, *Plasticity today: modeling, methods and applications*, Sawczuk, A. and Bianchi, G., editors, London. Elsevier Applied Science Publishers, pp. 279–310.

Telles J. C. F., 1987. *A Self-adaptive Co-ordinate Transformation for Efficient Numerical Evaluation of General Boundary Element Integrals*. **International Journal of Numerical Methods in Engineering**. vol. 24, pp. 959-973.

Ting T. C. T., 2003. *Generalized Cowin-Mehrabadi Theorems and a Direct Proof that the Number of Linear Elastic Symmetries is Eight*. **International Journal of Solids and Structures**, vol. 40, pp. 7129-7142.

Wang J., Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L., 2001. *A Galerkin Boundary Integral Method for Nonhomogeneous Materials with Cracks*. Elsworth D, Tinucci J, Heasley K, editors. **Rock mechanics in the national interest**. Lisse: Balkema; p. 1453–60.

Wang J., Crouch S.L. & Mogilevskaya S.G. 2003a. *A Complex Boundary Integral Method for Multiple Circular Holes in an Infinite Plane*. **Eng Anal Bound Elem**, vol. 27, pp. 789–802.

Wang J., Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L., 2003b. *Benchmark Results for the Problem of Interaction Between a Crack and Circular Inclusion*. **Journal of Applied Mechanics**, vol. 70, pp. 619–21.

Wang J., Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L. 2003c. *A Numerical Procedure for Multiple Circular Holes and Elastic Inclusions in a Finite Domain with a Circular Boundary*. **Computational Mechanics**, vol. 32, pp. 250–258.

Wang J., Crouch S.L. & Mogilevskaya S.G. 2005a *A Fast and Accurate Algorithm for a Galerkin Boundary Integral Method*. **Computational Mechanics**, vol. 37, pp. 96-109.

Wang J., Mogilevskaya S.G. & Crouch S.L. 2005b. *An Embedding Method for Modeling Micromechanical Behavior and Macroscopic Properties of Composite Materials*. **International Journal of Numerical Methods in Engineering**, vol. 42, pp. 4588–612.

Wang Y. B. & Chau K. T., 2001. *A New Boundary Element Method for Mixed Boundary Value Problems Involving Cracks and Holes: Interactions Between Rigid Inclusions and Cracks*. **International Journal of Fracture**. vol. 110, pp. 387-406.

Weinberger C., Cai W. & Barnett D., 2005. “**Lecture Notes – Elasticity of Microscopic Structures**”. ME340 – Stanford University.

Yang Q-S. & Qin Q-H., 2004. *Micro-mechanical Analysis of Composite Materials by BEM*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol.28, pp. 919-926.

Yao Z., Kong F., Wang H. & Wang P., 2004. *2D Simulation of Composite Materials Using BEM*, **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol.28, pp. 927-935.

Zhang K. S., Bai J. B. & François D., 1999. *Ductile Fracture of Materials with High Void Volume Fraction*. **International Journal of Solid and Structures**, vol. 36. pp. 3407-3425.

Zienkiewicz O. C. & Taylor R. L., 2000. “**The Finite Element Method**” volume 1, The Basis. 5 Edition. Mc Graw-Hill.

Zohdi T. I., 2002. “**Computational modeling and design of new random microheterogeneous materials**”. CISM Course notes, Udine Italia.

Zohdi T. I. 2003. *Genetic design of solids possessing a random-particulate microstructure*. **The Royal Society. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A** 361, 1021–1043.

Zohdi T. I. 2005. *Statistical Ensemble Error Bounds for Homogenized Microheterogeneous Solids*. **Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP**, vol. 56, pp. 497–515.

APÊNDICE A

BANDAS SOBRE O ERRO NA ANÁLISE EVR LINEAR

Considerando-se uma estrutura periódica. Segundo o Princípio de Mínima Energia Potencial, de todas as deformações admissíveis que satisfazem o equilíbrio, o estado de deformação correto é aquele que minimiza a energia potencial do corpo. Para uma análise EVR linear usando condições de contorno de deslocamento, desconsiderando condições de contorno externas sobre o EVR, bem como as forças de corpo, o funcional de energia potencial pode ser escrito:

$$\Pi_{CBD} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij}^M C_{ijkl}^{*CBD} \varepsilon_{km}^M d\Omega \quad (\text{A.1})$$

onde C_{ijkl}^{*CBD} é o tensor de elasticidade efetivo calculado numa análise de EVR com suposição de condições de contorno de deslocamento. Por outro lado, o funcional de energia potencial para condições de contorno *in-situ* pode ser escrito como:

$$\Pi = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij}^M C_{ijkl}^* \varepsilon_{km}^M d\Omega \quad (\text{A.2})$$

onde a energia elástica e o tensor de elasticidade são agora válidos para condições de contorno *in-situ*. Note-se que as condições de contorno de deslocamento linear usadas para calcular o tensor de elasticidade efetivo são todas admissíveis, pois satisfazem o equilíbrio. Porém, se os deslocamentos do contorno *in-situ* são distintos às condições de contorno de deslocamento linear $u_i|_{\Gamma} = \mathcal{E}_{ij} x_j$, o Princípio de Mínima Energia Potencial estabelece que:

$$\Pi_{CBD} > \Pi \quad (\text{A.3})$$

O que leva a concluir que a rigidez efetiva calculada com condições de contorno de deslocamento linear é maior que o comportamento efetivo *in-situ* do EVR:

$$C_{ijkl}^{*CBD} > C_{ijkl}^* \quad (\text{A.4})$$

Agora, considere-se o caso onde são usadas condições de contorno de tração. O funcional de Energia Potencial Complementar Π_{CBT}^C , na ausência de forças de corpo e outras condições de contorno externas é:

$$\Pi_{CBT}^C = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{ij}^M S_{ijkl}^{*CBT} \sigma_{km}^M d\Omega \quad (\text{A.5})$$

onde S_{ijkl}^{*CBT} é o tensor de complacência efetivo calculado em uma análise de EVR com suposição de condições de contorno de tração. Da mesma forma que antes, a energia potencial complementar com condições de contorno *in-situ* é escrita como:

$$\Pi^C = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{ij}^M S_{ijkl}^* \sigma_{km}^M d\Omega \quad (\text{A.6})$$

Segundo o Princípio de Mínima Energia Complementar, as trações no contorno admissíveis geram energia complementar maior que as trações *in-situ*. É claro que condições de contorno de tensão uniforme $t_i|_{\Gamma} = \mathcal{L}_j n_j$ são admissíveis, mas distintas das condições *in-situ*. Então se tem que:

$$\Pi_{CBT}^C > \Pi^C \quad (\text{A.7})$$

o que leva a concluir que a complacência efetiva calculada com condições de contorno de tensão uniforme é maior que a complacência efetiva real no EVR:

$$S_{ijkl}^{*CBT} > S_{ijkl}^* \quad (\text{A.8})$$

Notando que a complacência é a inversa da rigidez se tem:

$$C_{ijkl}^{*CBT} < C_{ijkl}^* \quad (\text{A.9})$$

Estes dois resultados estabelecem uma característica da análise EVR. Quando se usa condições de contorno de deslocamento linear se obtém uma banda superior sobre a rigidez efetiva real do material. Da mesma forma, quando se usa condições de contorno de tensão uniforme se obtém uma banda inferior sobre a rigidez efetiva real do material. É importante notar que este resultado não fornece indicativos da proximidade da solução real em relação à análise de EVR, tanto para as propriedades efetivas como para a distribuição de tensões e deformações locais.

Este trabalho deu origem às seguintes publicações científicas:

- [1] F. C. Buroni, H. M. Gomes & A. P. Cisilino. *Acceleration of Genetic Algorithms for the Design of Random Micro-heterogeneous Materials*. 18th International Congress of Mechanical Engineering COBEM 2005. Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil. Nov. 2005
- [2] F. C. Buroni & A. P. Cisilino. *Diseño Computacional de Materiales Compuestos Micro-heterogéneos*. VIII Congreso Argentino de Mecánica Computacional MECOM 2005. Buenos Aires. Argentina. Nov. 2005

Artigos submetidos a congressos:

- [3] F. C. Buroni & R. J. Marczak. *A Hole Element for Modeling Micro-porous Materials with Boundary Element Methods*. In: Proceedings of the XXVII Iberian Latin American Congress On Computational Methods In Engineering (CILAMCE 2006). Belém-PA. Brasil. Sep. 2006
- [4] F. C. Buroni & R. J. Marczak. *Effective Properties of Random Micro-porous Materials with a Boundary Element Formulation*. In: Proceedings of the XXVII Iberian Latin American Congress On Computational Methods In Engineering (CILAMCE 2006). Belém-PA. Brasil. Sep. 2006
- [5] F. C. Buroni & R. J. Marczak. *Direct Evaluation of Singular Integrals in a Hole and Inclusion Boundary Element for Modeling Micro-heterogeneous Materials*. XV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones (ENIEF 2006). Santa Fé. Argentina. Nov. 2006
- [6] F. C. Buroni & R. J. Marczak. *A Boundary Element Formulation for Modeling Micro-heterogeneous Materials*. XV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones (ENIEF 2006). Santa Fé. Argentina. Nov. 2006

Artigos em elaboração:

- [7] F. C. Buroni & R. J. Marczak. *A Family of Hole Boundary Element for Modeling Materials with Cylindrical Micro-voids*. Engineering Analysis with Boundary Elements.
- [8] F. C. Buroni, A. P. Cisilino & R. J. Marczak. *Effective Properties of Solids with Random Micro-cavities Using a Special Hole Boundary Element*. Engineering Analysis with Boundary Elements
- [9] F. C. Buroni, A. P. Cisilino & R. J. Marczak. *Computational Modeling and Design of Random Micro-porous Materials with a Boundary Element Formulation*. Latin American Journal of Solid and Structures.
- [10] F. C. Buroni, A. P. Cisilino & R. J. Marczak. *Effective Elastic Properties of Random Micro-porous Materials with a Special Boundary Element Formulation*. Composites science and technology/ Composite Structures/ Mechanics of Materials/ Computational Materials Science.