

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

MÉTODO MULTIESCALA PARA MODELAGEM DA CONDUÇÃO DE CALOR
TRANSIENTE COM GERAÇÃO DE CALOR: TEORIA E APLICAÇÃO

por

Gustavo Roberto Ramos

Tese para a obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, novembro de 2015

MÉTODO MULTIESCALA PARA MODELAGEM DA CONDUÇÃO DE CALOR
TRANSIENTE COM GERAÇÃO DE CALOR: TEORIA E APLICAÇÃO

por

Gustavo Roberto Ramos
Mestre em Engenharia e Ciência dos Materiais

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Mecânica dos Sólidos

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Rossi

Aprovada por:

Prof. Dr. Rogério José Marczak (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Ignacio Iturrioz (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Samir Maghous (PPGEC/UFRGS)

Prof. Dr. Marcelo Krajnc Alves (POSMEC/UFSC)

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 9 de novembro de 2015

À Jalma, por seu amor, alegria e otimismo contagiantes.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro; ao meu orientador, Prof. Dr. Rodrigo Rossi, cuja orientação tranquila e competente tornaram o trabalho possível; aos colegas de laboratório: Rudimar, Martin e Tiago, pela amizade e, em especial, ao Tiago, pelas discussões sobre este trabalho; aos meus amigos, que tornam os desafios da vida menos árduos. Por fim, agradeço à minha família, pelo incentivo e apoio irrestritos em todos os momentos da minha vida.

RESUMO

O presente trabalho trata da modelagem da condução de calor transiente com geração de calor em meios heterogêneos, e tem o objetivo de desenvolver um modelo multiescala adequado a esse fenômeno. Já existem modelos multiescala na literatura relacionados ao problema proposto, e que são válidos para os seguintes casos: (a) o elemento de volume representativo tem tamanho desprezível quando comparado ao comprimento característico macroscópico (e como consequência, a microescala tem inércia térmica desprezível); ou (b) a geração de calor é homogênea na microescala. Por outro lado, o modelo proposto nesta tese, o qual é desenvolvido utilizando uma descrição variacional do problema, pode ser aplicado a elementos de volume representativos finitos e em condições em que a geração de calor é heterogênea na microescala. A discretização temporal (diferenças finitas) e as discretizações espaciais na microescala e na macroescala (método dos elementos finitos) são apresentadas em detalhes, juntamente com os algoritmos necessários para implementar a solução do problema. Nesta tese são apresentados casos numéricos simples, procurando verificar não só o modelo teórico multiescala desenvolvido, mas também a implementação feita. Para tanto, são analisados, por exemplo, (a) casos em que considera-se a microescala um material homogêneo, tornando possível a comparação da solução multiescala com a solução convencional (uma única escala) pelo método dos elementos finitos, e (b) um caso em um material heterogêneo para o qual a solução completa, isto é, modelando diretamente os constituintes no corpo macroscópico, é obtida, tornando possível a comparação com a solução multiescala. A solução na microescala para vários casos analisados nesta tese sofre grande influência da inércia térmica da microescala. Para demonstrar o potencial de aplicação do modelo multiescala, simula-se a cura de um elastômero carregado com negro de fumo. Embora a simulação demonstre que a inércia térmica não precise ser considerada para esse caso em particular, a aplicação da presente metodologia torna possível modelar a cura do elastômero diretamente sobre a microescala, uma abordagem até então não utilizada no contexto de métodos multiescala. Essa metodologia abre a possibilidade para futuros aperfeiçoamentos da modelagem do estado de cura.

Palavras-chave: condução de calor transiente; geração de calor; método multiescala; método dos elementos finitos; cura de elastômeros.

ABSTRACT

This work deals with the modeling of transient heat conduction with heat generation in heterogeneous media, and its objective is to develop a proper multiscale model for this phenomenon. There already exist multiscale models in the literature related to this proposed problem, and which are valid for the following cases: (a) the representative volume element has a negligible size when compared to the characteristic macroscopic size (and, as a consequence, the microscale has a negligible thermal inertia); or (b) the heat generation is homogeneous at the microscale. On the other hand, the model proposed in this thesis, which is developed using a variational description of the problem, can be applied to finite representative volume elements and in conditions in which the heat generation is heterogeneous at the microscale. The time discretization (finite difference) and the space discretizations at both the microscale and the macroscale (finite element method) are presented in details, together with the algorithms needed for implementing the solution of the problem. In this thesis, simple numerical cases are presented, aiming to verify not only the theoretical multiscale model developed, but also its implementation. For this, it is analyzed, for instance, (a) cases in which the microscale is taken as a homogeneous material, making it possible the comparison of the multiscale solution with the conventional solution (one single scale) by the finite element method, and (b) a case in a heterogeneous material for which the full solution, that is, modeling all constituents directly on the macroscale, is obtained, making it possible the comparison with the multiscale solution. The solution at the microscale for several cases analyzed in this thesis suffers a large influence of the microscale thermal inertia. To demonstrate the application potential of the multiscale model, the cure of a carbon black loaded elastomer is simulated. Although the simulation shows that the thermal inertia does not have to be considered for this case in particular, the application of the present methodology makes it possible to model the cure of the elastomer directly at the microscale, an approach not used in multiscale methods context until now. This methodology opens the possibility for future improvements of the state of cure modeling.

Keywords: transient heat conduction; heat generation; multiscale method; finite element method, elastomers cure.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	MECÂNICA E TERMODINÂMICA DO CONTÍNUO.....	5
2.1	Considerações gerais.....	5
2.2	Cinemática.....	5
2.2.1	Operadores materiais e espaciais	6
2.2.2	Derivadas temporais.....	7
2.3	Princípios mecânicos	7
2.3.1	Forma espacial local	8
2.3.2	Forma referencial local.....	8
2.4	Princípios termodinâmicos	9
2.4.1	Primeira lei da termodinâmica	9
2.4.2	Segunda lei da termodinâmica	10
2.4.3	Forma espacial local	11
2.4.4	Forma referencial local.....	11
2.4.5	Forma espacial local para o problema puramente térmico	12
3	CONDUÇÃO DE CALOR EM SÓLIDOS.....	14
3.1	Equação diferencial.....	14
3.2	Condição inicial.....	15
3.3	Condições de contorno	15
4	MODELAGEM MULTIESCALA.....	17
4.1	Propriedades efetivas	18
4.1.1	Princípio de Hill-Mandel	19
4.2	Métodos computacionais multiescala.....	20
4.2.1	Princípio de Hill-Mandel em termos de grandezas macroscópicas.....	21

4.3	Microescala usualmente modelada com $\text{div } \mathbf{q} = 0$	21
4.4	Desenvolvimento do modelo multiescala: Preliminares.....	22
4.5	Desenvolvimento do modelo multiescala: Extensão do princípio de Hill-Mandel para o problema de condução de calor transiente com geração de calor	28
4.6	Resumo do modelo multiescala.....	38
5	IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO MULTIESCALA	40
5.1	Solução do problema na microescala	40
5.2	Solução do problema na macroescala.....	41
5.3	Cálculo dos operadores tangentes.....	43
5.4	Cálculo das sensibilidades correspondentes à flutuação de temperatura ...	45
5.5	Solução do problema na microescala pelo método dos elementos finitos ...	46
5.6	Solução dos problemas de sensibilidade pelo método dos elementos finitos .	49
5.7	Solução do problema na macroescala pelo método dos elementos finitos ...	51
5.8	Integração	54
5.9	Linearizações	54
5.9.1	Cálculo de ϕ'	54
5.9.2	Cálculo de \mathbf{K} e \mathbf{Y}	54
5.10	Algoritmo.....	54
5.10.1	Oscilações espúrias devidas a um passo de tempo inadequado	61
5.10.2	Paralelização	62
6	VERIFICAÇÃO DO MODELO MULTIESCALA.....	63
6.1	Problema linear de condução de calor	64
6.2	Problema não-linear de condução de calor	66
6.3	Problema linear de condução de calor com geração de calor	69
6.4	Influência da inércia térmica da microescala	73
7	APLICAÇÃO: CURA DE ELASTÔMEROS CARREGADOS ...	103

7.1	Cura de elastômeros carregados	103
7.2	Cinética Química	108
7.2.1	Conversão e taxa da reação química	108
7.2.2	Determinação do calor liberado pela reação de cura	109
7.2.3	Tempo de indução	110
7.2.4	Modelo cinético de Kamal e Sourour	110
7.2.5	Determinação dos parâmetros do modelo	111
7.2.6	Cálculo de r'	112
7.2.7	Solução do problema de cinética química	112
7.2.8	Algoritmo para a solução do problema de cinética química	113
7.3	Problema acoplado de condução de calor e cinética química: verificações do modelo	115
7.4	Simulação da cura de um elastômero carregado com negro de fumo	124
8	CONCLUSÕES	135
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	137
	APÊNDICE A – Notação	143
	APÊNDICE B – Consequências de um EVR infinitamente pequeno	145

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Representação esquemática de uma possível aplicação do modelo multiescala a ser desenvolvido nesta tese.	3
Figura 3.1	Corpo \mathcal{B}_t sujeito a temperatura $\hat{\theta}$ e fluxo de calor $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ prescritos na sua fronteira $\partial\mathcal{B}_t$. O vetor \mathbf{n} é unitário e normal à superfície $\partial\mathcal{B}_t$	15
Figura 4.1	Representação esquemática dos corpos (a) real e (b) homogeneizado, conectados pelo (c) elemento de volume representativo associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$. As condições de contorno usual e homogeneizada também estão apresentadas, bem como as temperaturas e suas variações em termos, respectivamente, dos conjuntos admissíveis e dos espaços das variações admissíveis.	24
Figura 4.2	Representação esquemática da temperatura na macro e na micro-escala para um problema unidimensional, em que o EVR consiste em dois materiais com condutividades térmicas κ_1 e κ_2 . O produto $\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})$ foi escrito como $\bar{g}(x - \bar{x})$. A flutuação da temperatura microscópica, θ^\sim , está de acordo com a futura definição do conjunto \mathcal{H}^\sim (ver Eq. (4.73)). Adaptado de Larsson <i>et al.</i> , 2010.	26
Figura 5.1	Temperatura θ normalizada pela temperatura inicial θ_0 em $x = 0,6L_p$ para uma placa $0 < x < L_p$, sem geração de calor, com fluxo nulo em $x = 0$ e temperatura nula em $x = L_p$. A solução foi computada com 5 elementos lineares iguais e utilizou-se o esquema de integração no tempo de <i>backward Euler</i> com um passo de tempo de $0,025h^2/k$, onde h é o tamanho do elemento e k é a difusividade térmica. A solução analítica também está apresentada. Adaptado de Harari, 2004.	62
Figura 6.1	Representação esquemática e malhas do corpo macroscópico e do elemento de volume representativo para o Problema 6.1.	65
Figura 6.2	Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução analítica para o Problema 6.1.	67
Figura 6.3	Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 6.1.	68
Figura 6.4	Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 6.2.	70

Figura 6.5	Convergência do resíduo macroscópico para o Problema 6.2 para alguns instantes de tempo selecionados. A tolerância para o erro no vetor resíduo macroscópico é de 4×10^{-10} e está indicada pela linha tracejada.	71
Figura 6.6	Representação esquemática e malha do corpo macroscópico para o Problema 6.3.	72
Figura 6.7	Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução analítica para o Problema 6.3.	74
Figura 6.8	Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 6.3.	75
Figura 6.9	Células unitárias utilizadas nas simulações realizadas por Jiang <i>et al.</i> , 2002. Retirado de Jiang <i>et al.</i> , 2002.	76
Figura 6.10	Representação esquemática e malhas do corpo macroscópico e do elemento de volume representativo para o Problema 6.4.	77
Figura 6.11	Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.4, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.	78
Figura 6.12	Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.4 para o primeiro incremento de tempo ($t = 4.000$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.	80
Figura 6.13	Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.5, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.	81
Figura 6.14	Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.5 para o primeiro incremento de tempo ($t = 12$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.	82
Figura 6.15	Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 6.10c) associado ao ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, para o Problema 6.5.	83

Figura 6.16	Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.6, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.	85
Figura 6.17	Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.6 para o primeiro incremento de tempo ($t = 12$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.	86
Figura 6.18	Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 6.10c) associado ao ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, para o Problema 6.6.	87
Figura 6.19	Representação esquemática de um elemento finito macroscópico quadrilateral bilinear, definido pelas coordenadas $\bar{\xi}$ e $\bar{\eta}$, e parte de outros dois elementos finitos adjacentes. Os quatro nós desse elemento estão apresentados na figura. Os EVRs, representados pelos quadrados menores, têm um tamanho tal que quando colocados lado a lado, a posição de cada ponto de integração macroscópico (indicado em azul) praticamente coincide com o centro de um desses EVRs, como por exemplo, aqueles indicados por A e B. O Problema 6.7 pode ser modelado, por exemplo, pela faixa de EVRs mostrados em vermelho, quando estendida ao longo de todo o corpo macroscópico.	89
Figura 6.20	Comparação entre a solução convencional por elementos finitos (solução completa) correspondente ao Problema 6.7 e as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.8, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário. Para a solução completa, as curvas são obtidas em $\bar{x}_2 = 0$	90
Figura 6.21	Representação esquemática de um elemento finito macroscópico quadrilateral quadrático incompleto, definido pelas coordenadas $\bar{\xi}$ e $\bar{\eta}$, e parte de outros dois elementos finitos adjacentes. Os oito nós desse elemento estão apresentados na figura. Os EVRs, representados pelos quadrados menores, têm um tamanho tal que quando colocados lado a lado, um ponto de integração com coordenada $\bar{\xi} = 0$ coincide com o centro de um desses EVRs, tal como aquele indicado por A. Novamente, o Problema 6.7 pode ser modelado, por exemplo, pela faixa de EVRs mostrados em vermelho, quando estendida ao longo de todo o corpo macroscópico.	92

Figura 6.22	Comparação entre a solução convencional por elementos finitos (solução completa) correspondente ao Problema 6.7 e as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.9, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.	93
Figura 6.23	Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 6.10c) associado aos pontos macroscópicos $\bar{\mathbf{x}} = (0,925, 0,025)$ m (curvas inferiores) e $\bar{\mathbf{x}} = (0,975, 0,025)$ m (curvas superiores), para o Problema 6.9. A solução completa nos nós correspondes também estão apresentadas.	94
Figura 6.24	Comparação dos mapas de temperatura em $t = 12$ s para a solução convencional por elementos finitos (solução completa) e para a solução multiescala com a consideração da inércia térmica da microescala.	95
Figura 6.25	Representação esquemática e malha macroscópica para o Problema 6.10. A malha microscópica é igual à da Fig. 6.10c.	97
Figura 6.26	Comparação entre as soluções macroscópicas do Problema 6.10, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário sem geração de calor ($\text{div } \mathbf{q} = 0$). A solução apresentada diz respeito ao nó em $\bar{\mathbf{x}} = (0, 0)$	98
Figura 6.27	Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.10 para o primeiro incremento de tempo ($t = 2$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário sem geração de calor. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,0106, 0,0106)$ m.	99
Figura 6.28	Malha utilizada na solução convencional por elementos finitos do Problema 6.10.	100
Figura 6.29	Soluções do Problema 6.10 no nó frio (nó central do EVR) e no nó quente (nó central da inclusão) para o EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,0106, 0,0106)$ m. Para a microescala em regime estacionário sem geração de calor, a solução é igual para todos os nós do EVR em cada instante de tempo. A forma pela qual se obtém a solução convencional é descrita no texto.	101
Figura 6.30	Comparação entre as soluções do Problema 6.10 para o instante de tempo $t = 8$ s.	102
Figura 7.1	Estrutura química do <i>cis</i> -poliisopreno.	104

Figura 7.2	Modelo molecular do processo de cura de um elastômero carregado. Adaptado de André e Wriggers, 2005.	104
Figura 7.3	Reômetro de disco oscilatório. Adaptado de Coran, 2005, p. 326. ...	105
Figura 7.4	Três tipos de respostas distintas observadas nas medidas obtidas em um reômetro de disco oscilatório. Adaptado de Hamed, 2001, p. 21. .	106
Figura 7.5	Representação esquemática de como o estado de cura evolui com o tempo nas temperaturas θ_1 e $\theta_2 > \theta_1$	109
Figura 7.6	Representação esquemática e malha do corpo macroscópico para o Problema 7.1.	116
Figura 7.7	Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 7.1. Apenas 1 a cada 10 pontos está apresentado.	117
Figura 7.8	Representação esquemática e malha macroscópica para o Problema 7.2.	118
Figura 7.9	Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas para a microescala em regime transiente ou com $\text{div } \mathbf{q} = 0$ para o Problema 7.2.	120
Figura 7.10	Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 7.11) associado ao ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$, para o Problema 7.2.	121
Figura 7.11	Comparação entre o estado de cura para o Problema 7.2 para $t = 60$ s, com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário sem geração de calor. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.	122
Figura 7.12	Estado de cura no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 7.11) associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, para o Problema 7.2.	123
Figura 7.13	Dimensões relevantes do negro de fumo. Adaptado de Leblanc, 2002.	125
Figura 7.14	Elemento de volume representativo, de lado igual a 900 nm, do Problema 7.3. O subdomínio em cinza representa a matriz elastomérica, enquanto os subdomínios em azul representam as inclusões de negro de fumo, com diâmetro de 150 nm.	129
Figura 7.15	Soluções até 80 s para o Problema 7.3. Apenas 1 a cada 2 pontos está marcado.	130

Figura 7.16	Representação esquemática e malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.4.	131
Figura 7.17	Mapas de temperatura macroscópica para os primeiros incrementos de tempo para o Problema 7.4.	132
Figura 7.18	Mapa de temperatura em um EVR específico para o Problema 7.4. . .	133
Figura 7.19	Mapas de estado de cura em um EVR específico para o Problema 7.4.	134

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.1	66
Tabela 6.2	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.2	69
Tabela 6.3	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.3	71
Tabela 6.4	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.4	76
Tabela 6.5	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.5	79
Tabela 6.6	Propriedades térmicas e características da malha de elementos finitos para o Problema 6.7	84
Tabela 6.7	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.8	88
Tabela 6.8	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.9	91
Tabela 6.9	Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.10	96
Tabela 7.1	Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.1	115
Tabela 7.2	Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.2	119
Tabela 7.3	Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.3	128
Tabela 7.4	Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.4	129

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

API	Interface de Programação de Aplicativos, do inglês <i>Application Programming Interface</i>
DSC	Calorimetria Exploratória Diferencial, do inglês <i>Differential Scanning Calorimetry</i>
ESR	Elemento de Superfície Representativo
EVR	Elemento de Volume Representativo
FE ²	Método dos Elementos Finitos Multinível
FEF	<i>Fast Extrusion Furnace</i>
MEF	Método dos Elementos Finitos
SAF	<i>Super Abrasion Furnace</i>
SBR	Borracha de estireno-butadieno
SOC	Estado de cura, do inglês <i>State Of Cure</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Romanos

A	Região material
A	Área de $\partial\mathcal{B}_t^c$, m^2
A_i	i -ésimo reagente ou produto de uma reação química, —
\mathbf{A}	Campo tensorial em termos do qual o divergente é definido
\mathcal{A}_t	Região que <i>se move em convecção com o corpo</i>
$\underline{\underline{A}}$	Matriz tangente de elementos finitos microscópica, $J m^{-3} K^{-1}$
$\overline{\underline{\underline{A}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, $J K^{-1}$
B	Corpo na configuração de referência
\overline{B}	Corpo macroscópico na configuração de referência
$\overline{\underline{B}}$	Operador tangente definido por $\partial\overline{\phi}/\partial\overline{\mathbf{g}}$, $J m^{-2} K^{-1}$
$\widehat{\underline{B}}$	Operador tangente definido por $\partial\overline{\Phi}/\partial\overline{\mathbf{g}}$, $J m^{-1} K^{-1}$
$\underline{\underline{B}}$	Matriz gradiente das funções de forma microscópicas, m^{-1}
$\overline{\underline{\underline{B}}}$	Matriz gradiente (macroscópico) das funções de forma macroscópicas, m^{-1}
\mathcal{B}_t	Corpo deformado (no tempo t)
$\overline{\mathcal{B}}_t$	Corpo macroscópico deformado (no tempo t)
$\underline{\underline{B}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, $J K^{-1}$
$\widehat{\underline{\underline{B}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, $J K^{-1}$
\mathbf{b}	Força de corpo por unidade de volume, $N m^{-3}$
\mathbf{b}_r	Força de corpo por unidade de volume na configuração de referência, $N m^{-3}$
\overline{C}	Operador tangente definido por $\partial\overline{\phi}/\partial\overline{\theta}$, $J m^{-3} K^{-1}$
$\widehat{\overline{C}}$	Operador tangente definido por $\partial\overline{\Phi}/\partial\overline{\theta}$, $J m^{-2} K^{-1}$
$\underline{\underline{C}}$	Matriz tangente de elementos finitos microscópica, $J m^{-3} K^{-1}$
$\overline{\underline{\underline{C}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, $J K^{-1}$

$\hat{\underline{\underline{C}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, J K^{-1}
c	Calor específico, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
\mathbf{D}	Tensor taxa de deformação, s^{-1}
$\overline{\mathbf{D}}$	Operador tangente definido por $\partial\bar{\mathbf{r}}/\partial\bar{\mathbf{g}}$, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
$\hat{\mathbf{D}}$	Operador tangente definido por $\partial\bar{\mathbf{r}}/\partial\bar{\mathbf{g}}$, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
$\underline{\underline{\mathbf{D}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, W K^{-1}
$\hat{\underline{\underline{\mathbf{D}}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, W K^{-1}
d	Comprimento característico da inclusão do elemento de volume representativo (EVR), m
da	Elemento de área, m^2
$d\bar{a}$	Elemento de área macroscópico, m^2
dv	Elemento de volume, m^3
$d\bar{v}$	Elemento de volume macroscópico, m^3
dv_r	Elemento de volume na configuração de referência, m^3
E	Energia de ativação de uma reação química, J mol^{-1}
\bar{E}	Operador tangente definido por $\partial\bar{\mathbf{r}}/\partial\bar{\theta}$, $\text{W m}^{-3} \text{K}^{-1}$
\mathbf{E}	Tensor constante utilizado na definição da condição de contorno deslocamento linear, —
$\hat{\mathbf{E}}$	Operador tangente definido por $\partial\bar{\mathbf{r}}/\partial\bar{\theta}$, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
\mathcal{E}	Energia interna de \mathcal{P}_t , J
$\underline{\underline{\mathbf{E}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, W K^{-1}
$\hat{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, W K^{-1}
e_G	Erro no resíduo da equação da taxa de reação química, —
$e_{\mathbf{r}}$	Erro no vetor resíduo microscópico, J
$e_{\bar{\mathbf{r}}}$	Erro no vetor resíduo macroscópico, J
\mathbf{e}_i	Vetor unitário, na direção i , da base que define o sistema de coordenadas, —

$elem$	Elemento finito macroscópico, —
\mathbf{F}	Tensor gradiente de deformação, —
$\bar{\mathbf{F}}$	Tensor gradiente de deformação macroscópico, —
\mathcal{F}	Fator de forma em termos do qual o coeficiente de transferência de calor por radiação é escrito, —
f	Termo dependente de α e em termos do qual a taxa de reação química é escrita, —
\bar{f}_r	Termo que representa todas as quantidades escalares presentes na descrição macroscópica do problema mecânico com forças de corpo e inércia, N m^{-3}
G	Resíduo da equação da taxa de reação química, —
G'	Diferencial do resíduo da equação da taxa de reação química, s^{-1}
\mathbf{G}	Vetor constante utilizado na definição da condição de contorno de temperatura linear, K m^{-1}
\mathbf{g}	Gradiente de temperatura, K m^{-1}
\mathbf{g}^h	Gradiente de temperatura aproximado de acordo com o método dos elementos finitos, K m^{-1}
$\bar{\mathbf{g}}$	Gradiente de temperatura macroscópico, K m^{-1}
$\bar{\mathbf{g}}^h$	Gradiente de temperatura macroscópico aproximado de acordo com o método dos elementos finitos, K m^{-1}
\mathcal{H}	Conjunto das temperaturas admissíveis
\mathcal{H}	Produção líquida de entropia em \mathcal{P}_t , W K^{-1}
\mathcal{H}_0	Espaço das variações admissíveis das temperaturas
\mathcal{H}^1	Espaço de Sobolev de ordem 1
\mathcal{H}'	Conjunto das temperaturas microscópicas lineares admissíveis
\mathcal{H}'_0	Espaço das variações admissíveis das temperaturas microscópicas lineares
\mathcal{H}^\sim	Conjunto das flutuações das temperaturas microscópicas admissíveis
$\mathcal{H}^{\sim h}$	Espaço de elementos finitos das flutuações das temperaturas microscópicas admissíveis
\mathcal{H}^\sim_0	Espaço das variações admissíveis das flutuações das temperaturas microscópicas

\mathcal{H}_0^h	Espaço de elementos finitos das variações admissíveis das flutuações das temperaturas microscópicas
\mathcal{H}_0^*	Espaço definido no problema mecânico de forma que os postulados $\bar{\mathbf{u}} = \langle \mathbf{u} \rangle_{\square}$ e $\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\square}$ sejam respeitados
$\mathcal{H}_0^{\sim*}$	Espaço das variações admissíveis das flutuações dos deslocamentos microscópicos
$\bar{\mathcal{H}}$	Conjunto das temperaturas macroscópicas admissíveis
$\bar{\mathcal{H}}^h$	Espaço de elementos finitos das temperaturas macroscópicas admissíveis
$\bar{\mathcal{H}}_0$	Espaço das variações admissíveis das temperaturas macroscópicas
$\bar{\mathcal{H}}_0^h$	Espaço de elementos finitos das variações admissíveis das temperaturas macroscópicas
h	Entalpia específica, J kg^{-1}
h	Tamanho de um elemento finito, m
h_c	Coefficiente local de transferência de calor por convecção, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
h_m	Coefficiente médio de transferência de calor por convecção, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
h_r	Coefficiente de transferência de calor por radiação, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
\mathcal{I}	Intervalo de tempo de interesse, s
\mathcal{I}_n	Intervalo de tempo definido por (t_{n-1}, t_n) , s
i	Índice associado ao laço de um algoritmo, —
i	Índice em termos do qual se denota o subdomínio (i, j, k) de um EVR, —
J	Jacobiano volumétrico do mapeamento $\boldsymbol{\chi}_t$ no ponto material \mathbf{X} , —
\mathcal{J}	Taxa na qual a entropia é transferida a \mathcal{P}_t , W K^{-1}
j	Densidade de fornecimento de entropia, $\text{W m}^{-3} \text{K}^{-1}$
j	Índice associado ao laço de um algoritmo, —
j	Índice em termos do qual se denota o subdomínio (i, j, k) de um EVR, —
\mathbf{j}	Fluxo de entropia, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
K	Iteração associada à solução do problema macroscópico, —

K	Termo dependente de θ e em termos do qual a taxa de reação química é escrita, s^{-1}
$K_{m\acute{a}x}$	Número máximo de iterações na solução do problema macroscópico em um dado instante de tempo, —
\mathbf{K}	Notação compacta para $-\partial\mathbf{q}/\partial\mathbf{g}$, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
$\overline{\mathbf{K}}$	Operador tangente definido por $-\partial\overline{\mathbf{q}}/\partial\overline{\mathbf{g}}$, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
\mathcal{K}	Energia cinética de \mathcal{P}_t , J
$\underline{\underline{\mathbb{K}}}$	Matriz tangente de elementos finitos microscópica, $\text{W m}^{-3} \text{K}^{-1}$
$\overline{\underline{\underline{\mathbb{K}}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, W K^{-1}
k	Constante de velocidade da reação química
k	Difusividade térmica, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
k	Iteração associada à solução do problema microscópico, —
k	Índice em termos do qual se denota o subdomínio (i, j, k) de um EVR, —
k_0	Fator pré-exponencial em termos do qual a constante de velocidade de uma reação química é escrita
$k_{m\acute{a}x}$	Número máximo de iterações na solução do problema microscópico em um dado instante de tempo, —
L	Comprimento característico macroscópico, m
L_f	Comprimento característico fenomenológico, m
L_g	Comprimento característico associado à geometria do corpo macroscópico, m
L_p	Espessura de uma placa, ou metade da espessura de uma placa
l	Tamanho da célula no método de homogeneização assintótica, m
l	Tamanho do elemento de volume representativo (EVR), m
m	Índice de um somatório
N	Número de passos de tempo na solução do problema multiescala, —
N	Número de subdomínios do EVR ao longo de cada dimensão cartesiana, —
N_{elem}	Número de elementos finitos da malha macroscópica, —
N_i	i -ésima função de forma microscópica, —

$N_{nós}$	Número de nós da malha de elementos finitos macroscópica, —
N_{pi}	Número de pontos de integração em cada elemento da malha macroscópica, —
\bar{N}_I	I -ésima função de forma macroscópica, —
$\underline{\mathbf{N}}$	Vetor funções de forma microscópico, —
$\bar{\mathbf{N}}$	Vetor funções de forma macroscópico, —
n	Dimensão cartesiana, —
n	Ordem da reação, —
n	Passo de tempo, —
n_{dim}	Número de dimensões do problema, —
n_{elem}	Número de elementos finitos da malha microscópica, —
n_i	Número de moles da substância A_i no tempo t , mol
n_i^0	Número de moles da substância A_i no tempo $t = 0$, mol
$n_{nós}$	Número de nós da malha de elementos finitos microscópica, —
n_{pi}	Número de pontos de integração em cada elemento da malha microscópica, —
\mathbf{n}	Vetor unitário perpendicular e externo a $\partial\mathcal{B}_t$, —
\mathbf{n}	Vetor unitário perpendicular e externo a $\partial\mathcal{P}_t$, —
$\bar{\mathbf{n}}$	Vetor unitário perpendicular e externo a $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$, —
\mathbf{o}	Origem do sistema de coordenadas
pi	Ponto de integração macroscópico, —
\mathbf{Q}	Vetor constante utilizado na definição da condição de contorno de fluxo uniforme, W m^{-2}
\mathcal{Q}	Taxa na qual a energia, na forma de calor, é transferida a \mathcal{P}_t , W
$\underline{\underline{\mathcal{Q}}}$	Matriz tangente de elementos finitos microscópica, $\text{W m}^{-3} \text{K}^{-1}$
\hat{q}	Fluxo de calor normal prescrito, W m^{-2}
q_c	Parcela do fluxo de calor normal transferida por convecção, W m^{-2}
q_n	Fluxo de calor líquido que cruza a superfície e em termos do qual a resistência térmica interfacial é definida, W m^{-2}

q_n	Fluxo de calor normal à superfície, $W m^{-2}$
q_r	Parcela do fluxo de calor normal transferida por radiação, $W m^{-2}$
\bar{q}	Fluxo de calor macroscópico normal prescrito, $W m^{-2}$
\mathbf{q}	Fluxo de calor, $W m^{-2}$
\mathbf{q}_r	Fluxo de calor na configuração de referência, $W m^{-2}$
$\bar{\mathbf{q}}$	Fluxo de calor macroscópico, $W m^{-2}$
$\bar{\mathbf{q}}^*$	Fluxo de calor macroscópico não-usual, $W m^{-2}$
$\bar{\mathbf{q}}_r$	Fluxo de calor macroscópico na configuração de referência, $W m^{-2}$
R	Constante dos gases ideais, $J mol^{-1} K^{-1}$
R_K	Resistência térmica interfacial, $m^2 K W^{-1}$
\mathcal{R}_{\square}	Resíduo associado à forma semi-discreta da microescala, $J K m^{-3}$
\mathcal{R}'_{\square}	Varição do resíduo associado à forma semi-discreta da microescala, $J K m^{-3}$
$\bar{\mathcal{R}}$	Resíduo associado à forma semi-discreta da macroescala, $J K m^{-3}$
$\bar{\mathcal{R}}'$	Varição do resíduo associado à forma semi-discreta da macroescala, $J K m^{-3}$
r	Densidade de fornecimento de calor, $W m^{-3}$
r'	Notação compacta para $dr/d\theta$, $W m^{-3} K^{-1}$
r_r	Densidade de fornecimento de calor na configuração de referência, $W m^{-3}$
\bar{r}	Densidade de fornecimento de calor macroscópica, $W m^{-3}$
\mathbf{r}	Vetor posição, m
$\bar{\mathbf{r}}$	Densidade de fornecimento de calor macroscópica ponderada, $W m^{-2}$
$\underline{\mathbf{r}}$	Vetor resíduo de elementos finitos microscópico, $J m^{-3}$
$\bar{\underline{\mathbf{r}}}$	Vetor resíduo de elementos finitos macroscópico, J
reg	Variável lógica que define se os dados do problema da microescala devem ser registrados, —
S	Torque lido no reômetro, $N m$
$S_{máx}$	Torque máximo lido no reômetro, $N m$

$S_{mín}$	Torque mínimo lido no reômetro, N m
\mathcal{S}	Entropia interna líquida de \mathcal{P}_t , J K ⁻¹
\mathbf{T}	Tensor tensão de Cauchy, Pa
\mathbf{T}_r	Tensor tensão de Piola, Pa
$\bar{\mathbf{T}}$	Tensor tensão de Cauchy macroscópico, N m ⁻²
$\bar{\mathbf{T}}_r$	Tensor tensão de Piola macroscópico, N m ⁻²
t	Tempo, s
t^*	Tempo definido por $t - t_i$, s
t_0	Parâmetro do material em termos do qual o tempo de indução na reação de cura isotérmica é escrito, s
t_0	Tempo inicial, s
t_f	Tempo final, s
t_I	Tempo de indução na reação de cura não-isotérmica, s
t_i	Tempo de indução na reação de cura isotérmica, s
\mathbf{t}	Vetor tração, Pa
tol_G	Tolerância para o erro no resíduo da equação da taxa de reação química, —
$tol_{\underline{\mathbf{r}}}$	Tolerância para o erro no vetor resíduo microscópico, J
$tol_{\bar{\mathbf{r}}}$	Tolerância para o erro no vetor resíduo macroscópico, J
\mathbf{u}	Deslocamento, m
$\bar{\mathbf{u}}$	Deslocamento macroscópico, m
v	Função em termos da qual o espaço \mathcal{H}_0 é definido, K
$v\prime$	Função em termos da qual o espaço $\mathcal{H}_0\prime$ é definido, K
$v\sim$	Função em termos da qual o espaço $\mathcal{H}_0\sim$ é definido, K
\bar{v}	Função em termos da qual o espaço $\bar{\mathcal{H}}_0$ é definido, K
\mathbf{v}	Velocidade, m s ⁻¹
\mathbf{v}	Campo vetorial em termos do qual o gradiente e o divergente são definidos

$\underline{\mathbf{v}}$	Vetor arbitrário, K
$\bar{\underline{\mathbf{v}}}$	Vetor macroscópico arbitrário, K
\mathcal{W}	Potência externa, W
\mathbf{X}	Ponto material, m
$\bar{\mathbf{X}}$	Ponto material macroscópico, m
\mathbf{x}	Ponto espacial, m
$\mathbf{x}_{(i,j,k)}$	Centro de um subdomínio do EVR, m
$\bar{\mathbf{x}}$	Ponto espacial macroscópico, m
$\bar{\mathbf{x}}^*$	Ponto espacial macroscópico arbitrário, m
\mathbf{Y}	Notação compacta para $\partial \mathbf{q} / \partial \theta$, W m ⁻² K ⁻¹
$\bar{\mathbf{Y}}$	Operador tangente definido por $\partial \bar{\mathbf{q}} / \partial \bar{\theta}$, W m ⁻² K ⁻¹
$\underline{\underline{\mathbf{Y}}}$	Matriz tangente de elementos finitos microscópica, W m ⁻³ K ⁻¹
$\bar{\underline{\underline{\mathbf{Y}}}}$	Matriz tangente de elementos finitos macroscópica, W K ⁻¹
Z	Índice cujo valor unitário define o início da reação de cura, —

Símbolos Gregos

α	Conversão de uma reação química, —
α	Grau, ou estado, de cura ou vulcanização, —
Γ	Densidade de produção de entropia, W K ⁻¹ m ⁻³
Γ_r	Densidade de produção de entropia na configuração de referência, W K ⁻¹ m ⁻³
$\Delta t_{máx}$	Valor máximo para o incremento de tempo, acima do qual a solução pelo método dos elementos finitos torna-se instável, s
$\Delta \theta$	Salto na temperatura na interface, K
ϵ	Parâmetro de separação de escalas no método de homogeneização assintótica, —
ϵ	Energia interna específica, J kg ⁻¹
ϵ_r	Densidade de energia interna na configuração de referência, J m ⁻³

ε	Deformação infinitesimal, —
η	Entropia específica, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
η_r	Densidade de entropia na configuração de referência, $\text{J m}^{-3} \text{K}^{-1}$
θ	Temperatura absoluta, K
$\hat{\theta}$	Temperatura prescrita em $\partial\mathcal{B}_t^\theta$, K
θ_0	Parâmetro do material em termos do qual o tempo de indução na reação de cura isotérmica é escrito, K
θ_0	Temperatura inicial, K
θ_a	Temperatura que pertence ao conjunto \mathcal{H} , K
θ_b	Temperatura que pertence ao conjunto \mathcal{H} , K
θ_c	Temperatura do ambiente na transferência de calor por convecção, K
θ^h	Temperatura microscópica aproximada de acordo com o método dos elementos finitos, K
θ_I	Temperatura nodal macroscópica, K
θ_i	Temperatura nodal microscópica, K
θ_r	Temperatura da fonte radiativa, K
θ_{ref}	Temperatura de referência para o cálculo da energia interna, K
θ^\prime	Parcela suave (linear) da temperatura microscópica, K
θ_a^\prime	Temperatura que pertence ao conjunto \mathcal{H}^\prime , K
θ_b^\prime	Temperatura que pertence ao conjunto \mathcal{H}^\prime , K
θ^\sim	Flutuação da temperatura microscópica, K
θ_a^\sim	Temperatura que pertence ao conjunto \mathcal{H}^\sim , K
θ_b^\sim	Temperatura que pertence ao conjunto \mathcal{H}^\sim , K
$\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{(i)}$	Notação compacta para $\partial\theta^\sim/\partial\bar{g}_i$, m
$\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^\sim$	Notação compacta para $\partial\theta^\sim/\partial\bar{\theta}$, —
$\bar{\theta}$	Temperatura (absoluta) macroscópica, K
$\bar{\theta}_a$	Temperatura que pertence ao conjunto $\bar{\mathcal{H}}$, K

$\bar{\theta}_b$	Temperatura que pertence ao conjunto $\bar{\mathcal{H}}$, K
$\bar{\theta}^h$	Temperatura macroscópica aproximada de acordo com o método dos elementos finitos, K
$\underline{\theta}$	Vetor temperatura microscópico, K
$\hat{\underline{\theta}}_1$	Vetor com componentes unitárias, —
$\underline{\theta}'$	Vetor com as variáveis nodais correspondentes a θ' , K
$\hat{\underline{\theta}}'$	Matriz com as variáveis nodais associadas a $x_j - \bar{x}_j$, m
$\hat{\underline{\theta}}_{\underline{\mathbf{g}}}^{\sim}$	Matriz com as variáveis nodais correspondentes às sensibilidades $\hat{\theta}_{\underline{\mathbf{g}}}^{\sim(i)}$, m
$\hat{\underline{\theta}}_{\bar{\theta}}^{\sim}$	Vetor com as variáveis nodais correspondentes às sensibilidades $\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim}$, —
$\bar{\underline{\theta}}$	Vetor temperatura macroscópico, K
\bar{t}	Representa todas as quantidades escalares presentes na descrição macroscópica do problema de condução de calor transiente com geração de calor, W m^{-3}
κ	Condutividade térmica, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
ν_i	Número de moles de A_i que participam da reação química, mol
ρ	Densidade mássica, kg m^{-3}
ρ_r	Densidade mássica na configuração de referência, kg m^{-3}
σ	Constante de Stefan-Boltzmann, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$
τ	Tensor constante utilizado na definição da condição de contorno de tração uniforme, Pa
ϕ	Densidade de energia interna, J m^{-3}
ϕ'	Notação compacta para $d\phi/d\theta$, $\text{J m}^{-3} \text{K}^{-1}$
ϕ_0	Densidade de energia interna inicial, J m^{-3}
$\bar{\phi}$	Densidade de energia interna macroscópica, J m^{-3}
$\bar{\Phi}$	Densidade de energia interna macroscópica ponderada, J m^{-2}
φ	Função escalar, vetorial ou tensorial
χ	Função movimento, m
$\ddot{\chi}$	Aceleração na configuração de referência, m s^{-2}

χ_t	Deformação, m
$\bar{\chi}$	Função movimento macroscópica, m
ψ	Energia livre de Helmholtz específica, J kg ⁻¹
ψ_r	Energia livre de Helmholtz por unidade de volume na configuração de referência, J m ⁻³
ω	Variável utilizada na definição da função erro

Operadores

$\dot{\bullet}$	Derivada material de \bullet
$d_t \bullet$	Derivada material de \bullet
$\bullet : \circ$	Produto interno de dois tensores, \bullet e \circ , de segunda ordem
$\langle \bullet \rangle_{\square}(\bar{\mathbf{x}})$	Média de \bullet no EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$
$\langle \bullet \rangle_{\gamma}(\bar{\mathbf{x}})$	Média de \bullet no ESR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$
$d\bullet$	Atualização de \bullet
$\Delta\bullet$	Incremento de \bullet
$\text{Div}\bullet$	Divergente de \bullet em relação a \mathbf{X}
$\text{div}\bullet$	Divergente de \bullet em relação a \mathbf{x}
$\overline{\text{Div}}\bullet$	Divergente de \bullet em relação a $\bar{\mathbf{X}}$
$\overline{\text{div}}\bullet$	Divergente de \bullet em relação a $\bar{\mathbf{x}}$
$\nabla\bullet$	Gradiente de \bullet em relação a \mathbf{X}
$\text{grad}\bullet$	Gradiente de \bullet em relação a \mathbf{x}
$\overline{\nabla}\bullet$	Gradiente de \bullet em relação a $\bar{\mathbf{X}}$
$\overline{\text{grad}}\bullet$	Gradiente de \bullet em relação a $\bar{\mathbf{x}}$
$\bullet \cup \circ$	União dos conjuntos \bullet e \circ
$\bullet \cap \circ$	Intersecção dos conjuntos \bullet e \circ
$\bullet \otimes \circ$	Produto tensorial entre \bullet e \circ

$\|\bullet\|_\infty$ Norma infinito de \bullet

Sobrescritos

- \bullet^l Componentes de \bullet associados aos nós livres da malha de elementos finitos
- $\bullet^{(i)}$ Coluna i da matriz \bullet
- \bullet^K Valor de \bullet na iteração K da solução do problema macroscópico
- \bullet^k Valor de \bullet na iteração k da solução do problema microscópico
- $\bullet^{l,l}$ Submatriz formada por linhas e colunas associadas aos nós livres da malha de elementos finitos
- $\bullet^{l,p}$ Submatriz formada por linhas associadas aos nós livres e por colunas associadas aos nós prescritos da malha de elementos finitos
- \bullet^p Componentes de \bullet associados aos nós prescritos da malha de elementos finitos

Subscritos

- \bullet_n Valor de \bullet associado ao passo de tempo n

Outros Símbolos

- $\hat{\bullet}(\circ)$ Forma funcional, em que $\bullet = \hat{\bullet}(\circ)$
- $\partial\bullet$ Fronteira da região \bullet
- $\partial\mathcal{B}_t^\perp$ Região de $\partial\mathcal{B}_t^q$ em que se prescreve um fluxo de calor normal específico
- $\partial\mathcal{B}_t^c$ Região de $\partial\mathcal{B}_t^q$ em que ocorre transferência de calor por convecção
- $\partial\mathcal{B}_t^q$ Região de $\partial\mathcal{B}_t$ em que o fluxo de calor normal é prescrito
- $\partial\bar{\mathcal{B}}_t^q$ Região de $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$ em que o fluxo de calor macroscópico normal é prescrito
- $\partial\mathcal{B}_t^r$ Região de $\partial\mathcal{B}_t^q$ em que ocorre transferência de calor por radiação
- $\partial\mathcal{B}_t^\theta$ Região de $\partial\mathcal{B}_t$ em que a temperatura é prescrita
- $\partial\bar{\mathcal{B}}_t^\theta$ Região de $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$ em que a temperatura macroscópica é prescrita
- \curlywedge Elemento de superfície representativo (ESR)
- \boxplus Elemento de volume representativo (EVR)
- $\theta(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}})$ Notação utilizada para tornar clara a separação de escalas, K

1 INTRODUÇÃO

O objetivo inicial deste trabalho era aplicar alguma metodologia multiescala para o problema de condução de calor já disponível na literatura à solução do problema acoplado de condução de calor e cinética química em materiais heterogêneos, tal como a cura de elastômeros carregados. O estado de cura¹ em um dado ponto do material depende da história térmica local; o calor liberado na reação de cura, por sua vez, depende da derivada temporal do estado de cura. Disso resulta o acoplamento entre os problemas. O elastômero, macio e pegajoso quando não curado (não vulcanizado), tem o módulo de elasticidade e o limite de resistência à tração melhorados (aumentados) com a cura. A magnitude do módulo de elasticidade é diretamente proporcional à densidade de ligações cruzadas [Callister e Rethwisch, 2009, p. 589], as quais são formadas durante a cura.

O fenômeno mencionado é transiente. De acordo com a pesquisa bibliográfica feita pelo autor, dentre os chamados métodos computacionais multiescala, pode-se citar o trabalho de Özdemir *et al.*, 2008, como o primeiro a tratar do problema de condução de calor transiente. Porém, além de o método não considerar a geração de calor, a microescala é considerada em regime estacionário. Essa hipótese, assumida pelo fato de presumir-se um Elemento de Volume Representativo² (EVR) de tamanho desprezível, pode parecer, a princípio, um tanto controversa. De fato, porém, há demonstrações de que a relação $\text{div } \mathbf{q} = 0$ deve ser respeitada na microescala [Temizer, 2012], mesmo para um problema intrinsecamente transiente e com geração de calor. As referidas demonstrações advêm do método de homogeneização assintótica, aplicado na sua forma clássica a materiais periódicos.

O método de homogeneização assintótica já foi, inclusive, aplicado ao problema da cura de materiais compósitos periódicos e com propriedades independentes da temperatura [Meliani e Paoli, 2004, 2007; Amosov e Panasenko, 2012]. Como resultado, o tensor de condutividade térmica efetivo é determinado a partir de um problema de célula independente do tempo, enquanto a variação da energia interna, a geração de calor e a evolução do estado de cura do material são descritas apenas macroscopicamente, a partir das informações microscópicas. Ocorre que os resultados de homogeneização assintótica surgem ao tomar o limite, tendendo a zero, da relação entre o tamanho do elemento de volume representativo (ou célula, nesse caso, por se tratar de um material periódico) e o comprimento característico macroscópico³. Esse limite, porém, não condiz com a realidade física [Auriault *et al.*, 2009, pág. 101]. Além disso, a cinética química é um fenômeno intrinsecamente associado à microescala e, desse modo, a compreensão e o aperfeiçoamento na modelagem do fenômeno (tal como o acoplamento com técnicas de mais baixo nível,

¹Uma descrição mais precisa do problema de cura de elastômeros carregados será apresentada no Cap. 7; o estado de cura diz basicamente qual a fração do fenômeno de cura que já se processou.

²Para o significado de elemento de volume representativo, veja a Definição 4.4 na pág. 22.

³Para o significado de comprimento característico macroscópico, veja a Definição 4.4 na pág. 22.

como dinâmica molecular) parecem inconsistentes com uma modelagem macroscópica.

Por outro lado, recentemente surgiram métodos que procuram descrever o problema microscópico de forma completa, ou seja, as equações de difusão de calor ou de balanço do momento linear, em se tratando de um problema mecânico, são consideradas em sua forma completa na microescala, em oposição aos métodos mais tradicionais, que consideram $\text{div } \mathbf{q} = 0$ ou $\text{Div } \mathbf{T}_r = \mathbf{0}$. Para fazer referência a um problema mecânico cuja equação de balanço de momento linear (veja a Eq. (2.26)) na microescala é considerada em sua forma completa, pode-se dizer, sem alteração de significado, que as forças de inércia e de corpo estão sendo consideradas na microescala. Quanto ao problema de condução de calor, parece não haver uma terminologia adequada. Nesta tese, será utilizada a expressão *inércia térmica da microescala*⁴ quando considerar-se a equação de difusão de calor na sua forma completa na microescala. No que diz respeito aos métodos que consideram essa descrição completa da microescala, pode-se citar os trabalhos de Larsson *et al.*, 2010, e de Souza Neto *et al.*, 2015, dentro do contexto de métodos computacionais multiescala, o primeiro dizendo respeito ao problema de condução de calor e o segundo ao problema mecânico. Cabe ressaltar, no entanto, que o modelo de Larsson *et al.*, 2010, supõe uma geração de calor homogênea na microescala. Algumas das vantagens dos métodos computacionais multiescala é que pode-se considerar materiais não-lineares, não-periódicos, com geometrias complexas.

Como mencionado por Larsson *et al.*, 2010, seus resultados numéricos indicam que quando o tamanho do EVR tende a zero, a importância de considerar-se todos os termos na descrição microscópica torna-se desprezível. Ou seja, o resultado rigoroso obtido pelo método de homogeneização assintótica é recuperado quando o tamanho do EVR é diminuído. Assim, os trabalhos de Larsson *et al.*, 2010, e de Souza Neto *et al.*, 2015, são especialmente adequados a problemas nos quais o EVR tem *tamanho finito*, embora sejam aplicáveis a problemas nos quais o EVR tem tamanho desprezível (quando comparado ao comprimento característico macroscópico).

A inovação dos trabalhos recém citados é relevante, uma vez que propõem extensões ao princípio de Hill-Mandel [Hill, 1963, 1972; Mandel, 1972], muito utilizado na área de homogeneização. Há uma grande correlação entre os dois trabalhos, conforme será demonstrado nesta tese. Os dois utilizam uma abordagem variacional e contêm termos não-usuais na descrição macroscópica, que surgem justamente do fato de considerar-se as equações microscópicas na sua forma completa. Percebeu-se, ao estudar esse problema de forma mais detalhada, que a contribuição desta tese poderia iniciar no desenvolvimento do método multiescala propriamente dito, para então propor-se o acoplamento com a cinética química.

⁴Embora o objetivo seja fazer menção não só à taxa de variação da energia interna, mas também à geração de calor (veja a Eq. (3.2)).

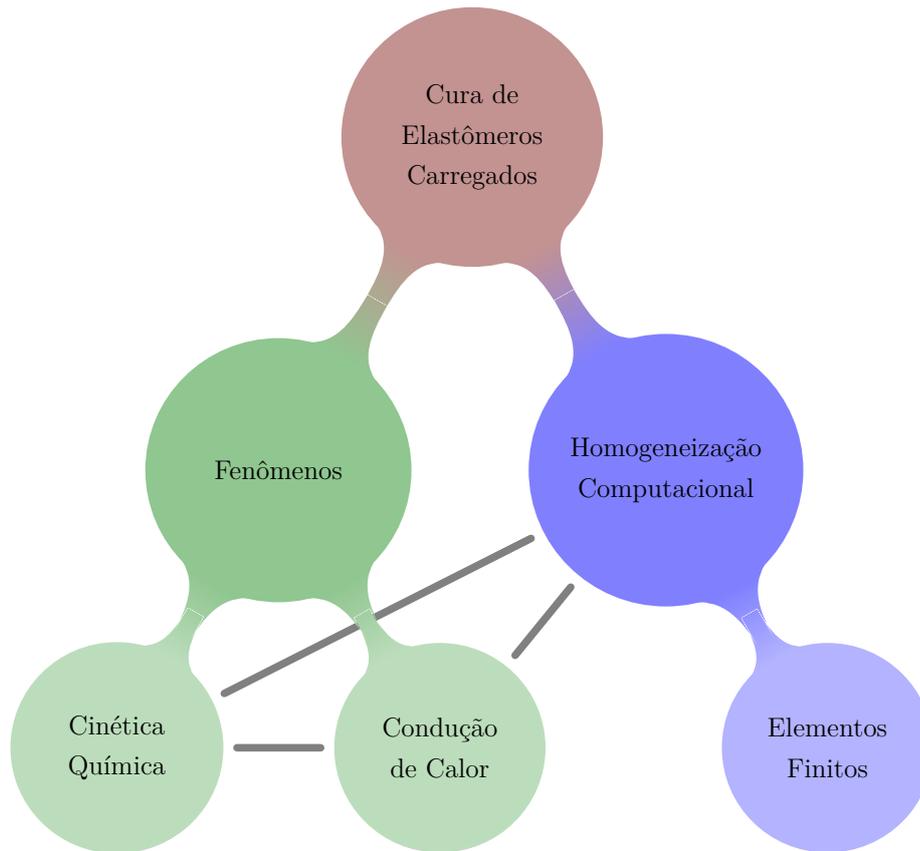


Figura 1.1 – Representação esquemática de uma possível aplicação do modelo multiescala a ser desenvolvido nesta tese.

Nesse contexto, o objetivo do presente trabalho é *desenvolver um modelo multiescala para o problema de condução de calor transiente com geração de calor* que possa ser aplicado concomitantemente a:

- problemas em que a inércia térmica da microescala não pode ser desprezada (o que geralmente está associado a um EVR com tamanho não desprezível quando comparado ao comprimento característico macroscópico, conforme será mostrado ao longo deste trabalho);
- materiais cujas propriedades podem variar com a temperatura;
- materiais possivelmente não-periódicos;

e, em particular, à cura de materiais compósitos. Para implementar o modelo descrito, será utilizado o Método dos Elementos Finitos Multinível (FE²), que consiste em utilizar o Método dos Elementos Finitos (MEF) para resolver tanto o problema macroscópico quanto o problema microscópico. Desse modo, uma possível aplicação para o modelo multiescala a ser desenvolvido nesta tese é aquela apresentada na Fig. 1.1.

Este documento está organizado da maneira a seguir descrita. No próximo capítulo serão enunciados os fundamentos da mecânica e termodinâmica do contínuo. A necessidade de enunciar os fundamentos termodinâmicos é evidente. Embora a modelagem

mecânica não seja o foco desta tese, os fundamentos da mecânica do contínuo, por sua vez, serão tratados pelo fato de que em determinados pontos do texto será feita referência à homogeneização de problemas mecânicos e termomecânicos. No Cap. 3, o problema de condução de calor em sólidos será descrito com certo detalhamento. No capítulo seguinte, os conceitos de homogeneização serão introduzidos e o modelo multiescala será desenvolvido utilizando uma abordagem variacional. Na introdução desse capítulo é apresentada uma revisão estendida de métodos de homogeneização computacional. Mais adiante, no Cap. 5, as estratégias para a implementação da solução numérica do problema multiescala serão apresentadas, tanto no que diz respeito às discretizações espacial e temporal, quanto à apresentação de algoritmos com um certo nível de detalhamento. Logo a seguir, no Cap. 6, serão realizadas verificações do modelo desenvolvido, isto é, serão realizadas comparações de resultados da modelagem multiescala com soluções analíticas e soluções convencionais pelo método de elementos finitos para casos simples que indicam a correta implementação do modelo multiescala; nesse mesmo capítulo também serão avaliadas condições em que a consideração da inércia térmica da microescala tem importância fundamental sobre a solução do problema. No Cap. 7, o modelo multiescala proposto será aplicado à cura de um material elastomérico carregado. No último capítulo serão feitas as conclusões. Por fim, o Apêndice A contém as definições quanto à notação utilizada neste trabalho, enquanto o Apêndice B contém a descrição macroscópica decorrente de um EVR infinitesimal.

A implementação do modelo, a ser descrita no Cap. 5, foi feita em um *software* próprio desenvolvido em linguagem de programação Fortran [Metcalf *et al.*, 2011; Markus, 2012; Clerman e Spector, 2011]. A escolha por desenvolver um *software* próprio deve-se aos seguintes fatos:

- Seria particularmente difícil realizar as implementações não-convencionais necessárias ao modelo multiescala em um *software* comercial;
- É importante ter controle sobre todos os aspectos numéricos relacionados à implementação de um problema como o tratado nesta tese.

2 MECÂNICA E TERMODINÂMICA DO CONTÍNUO

2.1 Considerações gerais

Antes de abordar o assunto propriamente dito, é importante definir-se os seguintes termos, para indicar quando uma grandeza está dada por unidade de massa e quando está dada por unidade de volume.

DEFINIÇÃO 2.1: O termo *específica* é utilizado para indicar que uma dada grandeza deve ser normalizada pela massa. Exemplo: energia interna específica significa energia interna por unidade de massa.

DEFINIÇÃO 2.2: O termo *densidade* é empregado para indicar que uma certa grandeza deve ser normalizada pelo volume. Exemplo: densidade de energia interna significa energia interna por unidade de volume.

Para que a definição seja unívoca, é necessário indicar se a grandeza (assim como a massa, ou o volume) deve ser calculada na configuração espacial ou na configuração de referência, a serem definidas mais adiante. Por exemplo, a expressão *densidade de energia interna na configuração de referência* define completamente a grandeza, e deve ser calculada pela razão entre a energia interna e o volume, ambos medidos na configuração de referência. Quando não houver indicação sobre qual configuração deva ser utilizada, subentende-se que se trate da configuração espacial. Por exemplo, *entropia específica* indica a razão entre a entropia e a massa, ambas calculadas na configuração espacial.

Em realidade, não há necessidade de diferenciar as configurações espacial e de referência para abordar um problema puramente térmico. Entretanto, com o propósito de tornar mais claras as discussões e comparações com problemas mais gerais tratados na literatura, torna-se conveniente introduzir essas definições, o que é feito mais adiante.

As expressões apresentadas neste capítulo, bem como a notação utilizada, têm como base Gurtin *et al.*, 2010.

2.2 Cinemática

Nesta seção serão feitas algumas considerações sobre o movimento de um corpo no espaço Euclidiano. Na sua configuração de referência, ou original, o corpo é identificado por meio da região $B \in \mathbb{R}^3$ que ele ocupa (inicialmente).

DEFINIÇÃO 2.3: Um ponto \mathbf{X} em B é denominado *ponto material*. O *ponto espacial* ocupado pelo ponto material \mathbf{X} no tempo t é dado por

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t), \quad (2.1)$$

onde $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ é denominada *função movimento*. A função

$$\boldsymbol{\chi}_t(\mathbf{X}) := \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) \quad (2.2)$$

é denominada deformação, com o corpo deformado sendo denotado por

$$\mathcal{B}_t := \boldsymbol{\chi}_t(\mathcal{B}). \quad (2.3)$$

DEFINIÇÃO 2.4: Uma região do espaço Euclidiano formada por pontos materiais é denominada *região material*. Diz-se que a região \mathcal{A}_t *se move em convecção com o corpo*¹ se há uma região material A tal que

$$\mathcal{A}_t = \boldsymbol{\chi}_t(A) \quad \forall t. \quad (2.4)$$

2.2.1 Operadores materiais e espaciais

Tendo em vista que o gradiente e o divergente de uma função podem ser definidos tanto em relação ao ponto material \mathbf{X} quanto em relação ao ponto espacial \mathbf{x} , torna-se necessário diferenciá-los.

DEFINIÇÃO 2.5: Denota-se por ∇ e Div , respectivamente, o *gradiente material* e o *divergente material*, ou seja, com relação a \mathbf{X} . Por outro lado, denota-se por grad e div , respectivamente, o *gradiente espacial* e o *divergente espacial*, isto é, com relação a \mathbf{x} .

DEFINIÇÃO 2.6: O gradiente de um campo é definido em termos da expansão em série de Taylor do referido campo, assumindo que tal expansão exista. Dados um campo escalar $\varphi(\mathbf{y})$ e um campo vetorial $\mathbf{v}(\mathbf{y})$, seus gradientes são definidos, respectivamente, por meio das expressões

$$\varphi(\mathbf{y} + \mathbf{h}) - \varphi(\mathbf{y}) = [\text{grad } \varphi(\mathbf{y})] \cdot \mathbf{h} + o(|\mathbf{h}|) \quad \text{quando } |\mathbf{h}| \rightarrow 0, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{y} + \mathbf{h}) - \mathbf{v}(\mathbf{y}) = [\text{grad } \mathbf{v}(\mathbf{y})] \mathbf{h} + o(|\mathbf{h}|) \quad \text{quando } |\mathbf{h}| \rightarrow 0. \quad (2.6)$$

Pode-se mostrar, com alguma manipulação algébrica, que a Definição 2.6 implica em

$$\text{grad } \varphi(\mathbf{y}) = \frac{\partial \varphi(\mathbf{y})}{\partial y_i} \mathbf{e}_i, \quad (2.7)$$

$$\text{grad } \mathbf{v}(\mathbf{y}) = \frac{\partial v_i(\mathbf{y})}{\partial y_j} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (2.8)$$

DEFINIÇÃO 2.7: Dados um campo vetorial $\mathbf{v}(\mathbf{y})$ e um campo tensorial $\mathbf{A}(\mathbf{y})$, seus divergentes são definidos, respectivamente, por

$$\text{div } \mathbf{v}(\mathbf{y}) := \frac{\partial v_i(\mathbf{y})}{\partial y_i}, \quad (2.9)$$

¹A expressão *se move em convecção com o corpo* foi traduzida livremente da expressão em inglês *convects with the body* utilizada por Gurtin *et al.*, 2010.

$$\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{y}) := \frac{\partial A_{ij}(\mathbf{y})}{\partial y_j} \mathbf{e}_i. \quad (2.10)$$

DEFINIÇÃO 2.8: O tensor gradiente de deformação é denotado por

$$\mathbf{F} := \nabla \boldsymbol{\chi} \quad (2.11)$$

e o seu determinante por

$$J := \det \mathbf{F}, \quad (2.12)$$

o qual é denominado Jacobiano volumétrico do mapeamento $\boldsymbol{\chi}_t$ no ponto material \mathbf{X} .

2.2.2 Derivadas temporais

Existem duas definições possíveis para a derivada temporal de um campo φ . É importante, portanto, diferenciá-las.

DEFINIÇÃO 2.9: Dado um campo φ , sua *derivada* (espacial) é denotada por

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (\text{mantendo } \mathbf{x} \text{ fixo}), \quad (2.13)$$

enquanto sua *derivada material* é denotada por

$$\dot{\varphi}(\mathbf{X}, t) := \frac{\partial \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \quad (\text{mantendo } \mathbf{X} \text{ fixo}). \quad (2.14)$$

A notação

$$d_t(\varphi) = d_t \varphi := \dot{\varphi} \quad (2.15)$$

é utilizada como alternativa para a derivada material.

A notação introduzida na Eq. (2.15) é particularmente útil para expressar a derivada de uma grandeza formada pela soma e/ou produto de outras.

2.3 Princípios mecânicos

Nesta seção serão enunciados os princípios mecânicos para um meio contínuo, a saber, o balanço de massa, o balanço de momento linear e o balanço de momento angular. Esses princípios serão enunciados na forma global para regiões que se movem em convecção com o corpo e apenas depois as formas locais serão apresentadas, como consequência da formulação integral.

Seja uma região espacial \mathcal{P}_t que se move em convecção com o corpo, de forma que $\mathcal{P}_t = \boldsymbol{\chi}_t(\mathbf{P})$ para alguma região material \mathbf{P} . Então, os seguintes princípios são formulados.

PRINCÍPIO 2.1: O balanço de massa é expresso requerendo-se que a relação

$$\int_{\mathbf{P}} \rho_r \, dv_r = \int_{\mathcal{P}_t} \rho \, dv \quad (2.16)$$

seja satisfeita para cada região material P , onde ρ é a densidade mássica, ρ_r é a densidade mássica na configuração de referência, dv é o elemento de volume e dv_r é o elemento de volume na configuração de referência.

PRINCÍPIO 2.2: O balanço de momento linear, dado por

$$\int_{\partial\mathcal{P}_t} \mathbf{t}(\mathbf{n}) \, da + \int_{\mathcal{P}_t} \mathbf{b} \, dv = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \rho \mathbf{v} \, dv, \quad (2.17)$$

deve ser satisfeito para todo tempo t e para todas as regiões espaciais \mathcal{P}_t que se movem em convecção com o corpo, onde \mathbf{t} é o vetor tração, \mathbf{n} é um vetor unitário perpendicular e externo a $\partial\mathcal{P}_t$, \mathbf{b} é a força de corpo por unidade de volume e $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ é a velocidade.

PRINCÍPIO 2.3: O balanço de momento angular, expresso por meio de

$$\int_{\partial\mathcal{P}_t} \mathbf{r} \times \mathbf{t}(\mathbf{n}) \, da + \int_{\mathcal{P}_t} \mathbf{r} \times \mathbf{b} \, dv = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \mathbf{r} \times (\rho \mathbf{v}) \, dv, \quad (2.18)$$

deve ser satisfeito para todo tempo t e para todas as regiões espaciais \mathcal{P}_t que se movem em convecção com o corpo, onde $\mathbf{r} := \mathbf{x} - \mathbf{o}$ é o vetor posição.

A existência do tensor tensão de Cauchy, \mathbf{T} , é demonstrada como uma consequência do balanço de momento linear no teorema de Cauchy, segundo o qual a relação

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \mathbf{T}\mathbf{n}. \quad (2.19)$$

deve ser satisfeita.

2.3.1 Forma espacial local

É possível mostrar, com alguma manipulação algébrica, que os Princípios 2.1, 2.2 e 2.3, juntamente com a Eq. (2.19), implicam nas seguintes formas (espaciais) locais:

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (\text{balanço de massa}), \quad (2.20)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{b} = \rho \dot{\mathbf{v}} \quad (\text{balanço de momento linear}), \quad (2.21)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^\top \quad (\text{balanço de momento angular}). \quad (2.22)$$

2.3.2 Forma referencial local

Antes de obter as formas referenciais locais, é interessante definir as seguintes grandezas.

DEFINIÇÃO 2.10: O tensor tensão de Piola e a força de corpo por unidade de volume de B são definidos, respectivamente, por

$$\mathbf{T}_r := J\mathbf{T}\mathbf{F}^{-\top}, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{b}_r := J\mathbf{b}. \quad (2.24)$$

É possível demonstrar, após algumas manipulações algébricas, que os Princípios 2.1, 2.2 e 2.3, a Eq. (2.19) e a Definição 2.10 implicam nas seguintes formas referenciais locais:

$$\rho_r = J\rho \quad (\text{balanço de massa}), \quad (2.25)$$

$$\rho_r \ddot{\boldsymbol{\chi}} = \text{Div} \mathbf{T}_r + \mathbf{b}_r \quad (\text{balanço de momento linear}), \quad (2.26)$$

$$\mathbf{T}_r \mathbf{F}^\top = \mathbf{F} \mathbf{T}_r^\top \quad (\text{balanço de momento angular}), \quad (2.27)$$

sendo $\ddot{\boldsymbol{\chi}}$ a aceleração na configuração de referência.

2.4 Princípios termodinâmicos

2.4.1 Primeira lei da termodinâmica

Antes de enunciar a primeira lei da termodinâmica, os conceitos de energia cinética e potência externa são definidos.

DEFINIÇÃO 2.11: A energia cinética de \mathcal{P}_t é definida por

$$\mathcal{K}(\mathcal{P}_t) := \int_{\mathcal{P}_t} \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 dv. \quad (2.28)$$

DEFINIÇÃO 2.12: A potência externa é definida por

$$\mathcal{W}(\mathcal{P}_t) := \int_{\partial\mathcal{P}_t} \mathbf{T}\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} da + \int_{\mathcal{P}_t} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dv. \quad (2.29)$$

PRINCÍPIO 2.4: A primeira lei da termodinâmica assume que

$$\frac{d}{dt} [\mathcal{E}(\mathcal{P}_t) + \mathcal{K}(\mathcal{P}_t)] = \mathcal{W}(\mathcal{P}_t) + \mathcal{Q}(\mathcal{P}_t), \quad (2.30)$$

onde $\mathcal{E}(\mathcal{P}_t)$ é a energia interna de \mathcal{P}_t e $\mathcal{Q}(\mathcal{P}_t)$ é a taxa na qual a energia, na forma de calor, é transferida a \mathcal{P}_t .

Agora, as seguintes hipóteses² em torno de $\mathcal{E}(\mathcal{P}_t)$ e $\mathcal{Q}(\mathcal{P}_t)$ são enunciadas.

HIPÓTESE 2.1: Há um campo escalar ε , denominado energia interna específica, tal que

$$\mathcal{E}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}_t} \rho \varepsilon dv. \quad (2.31)$$

HIPÓTESE 2.2: A taxa na qual a energia, na forma de calor, é transferida a \mathcal{P}_t pode ser escrita como

$$\mathcal{Q}(\mathcal{P}_t) = - \int_{\partial\mathcal{P}_t} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} da + \int_{\mathcal{P}_t} r dv, \quad (2.32)$$

²Neste texto, o termo *hipótese* é utilizado com um significado amplo: tanto para indicar uma suposição a partir da qual são deduzidas consequências lógicas quanto para fazer referência a uma suposição admitida para explicar dados experimentais, a qual, em sentido estrito, deixaria de ser chamada de hipótese após sua confirmação.

onde \mathbf{q} é o fluxo de calor e r é a densidade de fornecimento de calor.³

Por meio das Hipóteses 2.1 e 2.2, a primeira lei da termodinâmica, Eq. (2.30), pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 \right) dv = - \int_{\partial \mathcal{P}_t} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} da + \int_{\mathcal{P}_t} r dv + \int_{\partial \mathcal{P}_t} \mathbf{Tn} \cdot \mathbf{v} da + \int_{\mathcal{P}_t} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dv. \quad (2.33)$$

2.4.2 Segunda lei da termodinâmica

PRINCÍPIO 2.5: A segunda lei da termodinâmica estabelece que a produção líquida de entropia,

$$\mathcal{H}(\mathcal{P}_t) := \frac{d\mathcal{S}(\mathcal{P}_t)}{dt} - \mathcal{J}(\mathcal{P}_t), \quad (2.34)$$

onde $\mathcal{S}(\mathcal{P}_t)$ é a entropia interna líquida de \mathcal{P}_t e $\mathcal{J}(\mathcal{P}_t)$ é a taxa na qual a entropia é transferida a \mathcal{P}_t , deve ser não-negativa em cada região espacial \mathcal{P}_t :

$$\mathcal{H}(\mathcal{P}_t) \geq 0. \quad (2.35)$$

De forma semelhante ao realizado para a primeira lei da termodinâmica, são enunciadas hipóteses que resultam em uma descrição integral que mais adiante será utilizada na obtenção das formas locais da segunda lei da termodinâmica.

HIPÓTESE 2.3: Há um campo escalar η , denominado entropia específica, tal que

$$\mathcal{S}(\mathcal{P}_t) = \int_{\mathcal{P}_t} \rho \eta dv. \quad (2.36)$$

HIPÓTESE 2.4: A taxa na qual a entropia é transferida a \mathcal{P}_t pode escrita como

$$\mathcal{J}(\mathcal{P}_t) = - \int_{\partial \mathcal{P}_t} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} da + \int_{\mathcal{P}_t} j dv, \quad (2.37)$$

onde \mathbf{j} é o fluxo de entropia e j é a densidade de fornecimento de entropia.

HIPÓTESE 2.5: Há um campo escalar

$$\theta > 0, \quad (2.38)$$

denominado temperatura absoluta, tal que

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{q}}{\theta}, \quad (2.39)$$

$$j = \frac{r}{\theta}. \quad (2.40)$$

Utilizando as Hipóteses 2.3–2.5, a segunda lei da termodinâmica, dada pelas Eqs. (2.34) e (2.35), pode ser reescrita na forma a seguir, conhecida como desigualdade de

³A expressão *geração de calor* será utilizada ao longo do trabalho com o mesmo significado de *fornecimento de calor*.

Clausius-Duhem:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{P}_t} \rho \eta \, dv \geq - \int_{\partial \mathcal{P}_t} \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot \mathbf{n} \, da + \int_{\mathcal{P}_t} \frac{r}{\theta} \, dv. \quad (2.41)$$

2.4.3 Forma espacial local

É possível mostrar, com alguma manipulação algébrica, que as Eqs. (2.33) e (2.41) implicam nas seguintes formas (espaciais) locais:

$$\rho \dot{\varepsilon} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r \quad (\text{primeira lei — balanço de energia}), \quad (2.42)$$

$$\Gamma = \rho \dot{\eta} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{q}}{\theta} \right) - \frac{r}{\theta} \geq 0 \quad (\text{segunda lei — desigualdade de entropia}), \quad (2.43)$$

onde

$$\mathbf{D} := \frac{1}{2} [\operatorname{grad} \mathbf{v} + (\operatorname{grad} \mathbf{v})^\top] \quad (2.44)$$

é o tensor taxa de deformação e Γ representa a densidade de produção de entropia.

DEFINIÇÃO 2.13: A energia livre (de Helmholtz) específica é definida por

$$\psi := \varepsilon - \theta \eta. \quad (2.45)$$

Utilizando a primeira lei da termodinâmica, Eq. (2.42), e a Eq. (2.45) na Eq. (2.43), obtém-se uma forma alternativa para a segunda lei da termodinâmica:

$$\rho (\dot{\psi} + \eta \dot{\theta}) - \mathbf{T} : \mathbf{D} + \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \operatorname{grad} \theta = -\theta \Gamma \leq 0, \quad (2.46)$$

onde $\theta \Gamma$ representa a dissipação por unidade de volume.

2.4.4 Forma referencial local

DEFINIÇÃO 2.14: A densidade de energia interna, ε_r , a densidade de entropia, η_r , o fluxo de calor, \mathbf{q}_r , a densidade de fornecimento de calor, r_r , e a densidade de produção de entropia, Γ_r , todos relativos à configuração de referência, são definidos por

$$\varepsilon_r := \rho_r \varepsilon, \quad (2.47)$$

$$\eta_r := \rho_r \eta, \quad (2.48)$$

$$\mathbf{q}_r := J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}, \quad (2.49)$$

$$r_r := J r, \quad (2.50)$$

$$\Gamma_r := J \Gamma. \quad (2.51)$$

É possível mostrar, com alguma manipulação algébrica, que as Eqs. (2.33) e (2.41) e a Definição 2.14 implicam nas seguintes formas referenciais locais:

$$\dot{\varepsilon}_r = \mathbf{T}_r : \dot{\mathbf{F}} - \operatorname{Div} \mathbf{q}_r + r_r \quad (\text{primeira lei — balanço de energia}), \quad (2.52)$$

$$\Gamma_r = \dot{\eta}_r + \text{Div} \left(\frac{\mathbf{q}_r}{\theta} \right) - \frac{r_r}{\theta} \geq 0 \quad (\text{segunda lei — desigualdade de entropia}). \quad (2.53)$$

DEFINIÇÃO 2.15: A energia livre (de Helmholtz) por unidade de volume na configuração de referência é definida por

$$\psi_r := \rho_r \psi. \quad (2.54)$$

Utilizando a primeira lei da termodinâmica, Eq. (2.52), bem como as Eqs. (2.45), (2.47), (2.48) e (2.54) na Eq. (2.53), obtém-se uma forma alternativa para a segunda lei da termodinâmica:

$$\left(\dot{\psi}_r + \eta_r \dot{\theta} \right) - \mathbf{T}_r : \dot{\mathbf{F}} + \frac{1}{\theta} \mathbf{q}_r \cdot \nabla \theta = -\theta \Gamma_r \leq 0. \quad (2.55)$$

2.4.5 Forma espacial local para o problema puramente térmico

Ao tratar de um problema puramente térmico, ou seja, um problema no qual o termo $\mathbf{T} : \mathbf{D}$ é nulo, a forma alternativa da segunda lei da termodinâmica, Eq. (2.46), se reduz a

$$\rho \left(\dot{\psi} + \eta \dot{\theta} \right) + \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \text{grad} \theta = -\Gamma \theta \leq 0. \quad (2.56)$$

Ao considerar relações constitutivas da forma

$$\psi = \hat{\psi}(\theta, \mathbf{g}), \quad (2.57)$$

$$\eta = \hat{\eta}(\theta, \mathbf{g}), \quad (2.58)$$

$$\mathbf{q} = \hat{\mathbf{q}}(\theta, \mathbf{g}), \quad (2.59)$$

onde

$$\mathbf{g} := \text{grad} \theta, \quad (2.60)$$

tem-se

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \hat{\psi}(\theta, \mathbf{g})}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \hat{\psi}(\theta, \mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \cdot \dot{\mathbf{g}} \quad (2.61)$$

e, então,

$$\rho \left[\frac{\partial \hat{\psi}(\theta, \mathbf{g})}{\partial \theta} + \hat{\eta}(\theta, \mathbf{g}) \right] \dot{\theta} + \rho \frac{\partial \hat{\psi}(\theta, \mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \cdot \dot{\mathbf{g}} + \frac{1}{\theta} \hat{\mathbf{q}}(\theta, \mathbf{g}) \cdot \mathbf{g} = -\Gamma \theta \leq 0 \quad (2.62)$$

para todos os campos de temperatura θ .

Dado um ponto qualquer em \mathcal{B}_t e um tempo qualquer, é possível encontrar um campo de temperatura tal que θ , \mathbf{g} , $\dot{\theta}$ e $\dot{\mathbf{g}}$ tenham valores prescritos arbitrariamente no ponto e tempo mencionados. Assim, os termos que multiplicam $\dot{\theta}$ e $\dot{\mathbf{g}}$ devem ser iguais a zero, pois, caso contrário, poder-se-ia violar a desigualdade acima. Essa constatação leva às seguintes conclusões:

(a) A energia livre e a entropia não dependem do gradiente de temperatura;

(b) A entropia depende da energia livre por meio de

$$\hat{\eta}(\theta) = -\frac{d\hat{\psi}(\theta)}{d\theta}. \quad (2.63)$$

(c) A desigualdade de condução de calor,

$$\hat{\mathbf{q}}(\theta, \mathbf{g}) \cdot \mathbf{g} \leq 0, \quad (2.64)$$

deve ser respeitada para todo (θ, \mathbf{g}) .

3 CONDUÇÃO DE CALOR EM SÓLIDOS

Das equações apresentadas no capítulo anterior, a mais importante para o presente trabalho é a primeira lei da termodinâmica, Eq. (2.42), que será aplicada a um material infinitamente rígido, isto é, um material para o qual o produto $\mathbf{T} : \mathbf{D}$ é nulo. Neste capítulo serão definidas a condição inicial e as condições de contorno que podem ser aplicadas à referida equação diferencial. Também será descrita uma possível relação constitutiva entre o fluxo de calor e a temperatura, a saber, a Lei de Fourier, embora o método multiescala que será desenvolvido no Cap. 4 não esteja restrito a uma relação constitutiva em particular. Boa parte deste capítulo baseia-se em Reddy e Gartling, 2000.

3.1 Equação diferencial

DEFINIÇÃO 3.1: O intervalo de tempo de interesse é denotado por

$$\mathcal{I} := \{t \in (t_0, t_f] : t_0 \geq 0\}. \quad (3.1)$$

A Fig. 3.1 mostra o corpo \mathcal{B}_t , em um instante de tempo $t \in \mathcal{I}$ arbitrário, ao qual pode-se associar um campo de temperaturas $\theta(\mathbf{x}, t)$. Considerando o corpo como sendo infinitamente rígido, o balanço de energia na forma local, Eq. (2.42), assume a forma

$$-\operatorname{div} \mathbf{q} + r - \rho \dot{\varepsilon} = 0 \quad \text{em } \mathcal{B}_t \times \mathcal{I}. \quad (3.2)$$

Nesse problema em específico, o calor transferido a um elemento de volume no interior do corpo \mathcal{B}_t pode ter duas origens distintas: (a) transferência de calor das vizinhanças por condução; ou (b) fornecimento de calor, tal como na liberação de energia de uma reação química exotérmica ou na dissipação de calor por efeito Joule que se observa em uma resistência elétrica.¹

A fim de facilitar as manipulações algébricas no desenvolvimento do método multiescala (Cap. 4), define-se a seguir a densidade de energia interna.

DEFINIÇÃO 3.2: A densidade de energia interna é definida por²

$$\phi := \rho \varepsilon. \quad (3.3)$$

Com o auxílio da Definição 3.2, a Eq. (3.2) é reescrita como

$$-\operatorname{div} \mathbf{q} + r - \dot{\phi} = 0 \quad \text{em } \mathcal{B}_t \times \mathcal{I}, \quad (3.4)$$

uma vez que, considerando $\dot{\rho} = 0$, tem-se $\dot{\phi} = d_t(\rho \varepsilon) = \rho \dot{\varepsilon} + \dot{\rho} \varepsilon = \rho \dot{\varepsilon}$.

¹No caso de haver fornecimento de calor propriamente dito, $r > 0$. Por outro lado, $r < 0$ implica na existência de um sorvedouro de calor.

² $\phi = \varepsilon_r$ para um meio infinitamente rígido.

Em geral, o fluxo de calor é descrito por meio da Lei de Fourier, dada por

$$\mathbf{q} = -\boldsymbol{\kappa} \text{grad} \theta, \quad (3.5)$$

em que $\boldsymbol{\kappa}$ é o tensor condutividade térmica do material, embora, conforme já comentado, o modelo multiescala desenvolvido mais adiante não esteja restrito a essa relação constitutiva.

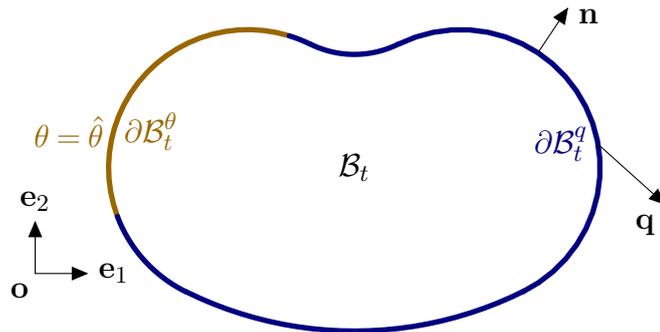


Figura 3.1 – Corpo \mathcal{B}_t sujeito a temperatura $\hat{\theta}$ e fluxo de calor $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ prescritos na sua fronteira $\partial \mathcal{B}_t$. O vetor \mathbf{n} é unitário e normal à superfície $\partial \mathcal{B}_t$.

3.2 Condição inicial

A condição inicial do problema é expressa por

$$\theta(\mathbf{x}, 0) = \theta_0(\mathbf{x}) \quad \text{em } \mathcal{B}_t. \quad (3.6)$$

3.3 Condições de contorno

No que diz respeito às condições de contorno, em cada ponto da superfície $\partial \mathcal{B}_t$ é possível prescrever a temperatura ou o fluxo de calor normal. Denota-se por $\partial \mathcal{B}_t^\theta$ a região da superfície em que a temperatura é prescrita e por $\partial \mathcal{B}_t^q$ a região em que o fluxo de calor é prescrito (ver Fig. 3.1). Tem-se, então,

$$\partial \mathcal{B}_t^\theta \cup \partial \mathcal{B}_t^q = \partial \mathcal{B}_t, \quad (3.7)$$

$$\partial \mathcal{B}_t^\theta \cap \partial \mathcal{B}_t^q = \emptyset. \quad (3.8)$$

A temperatura é prescrita mediante

$$\theta(\mathbf{x}, t) = \hat{\theta}(\mathbf{x}, t) \quad \text{em } \partial \mathcal{B}_t^\theta \times \mathcal{I}, \quad (3.9)$$

ao que se denomina condição de contorno essencial. O fluxo de calor pode ser prescrito

mediante a equação [Reddy e Gartling, 2000, p. 19]

$$q_n := \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = q_c + q_r + \hat{q} \quad \text{em } \partial\mathcal{B}_t^q \times \mathcal{I}, \quad (3.10)$$

em que:

- q_n é o fluxo de calor normal à superfície;
- q_c é a parcela do fluxo de calor transferida por convecção;
- q_r é a parcela do fluxo de calor transferida por radiação;
- \hat{q} é um fluxo de calor prescrito.

O fluxo de calor por convecção geralmente pode ser expresso por meio da Lei de Newton de resfriamento:

$$q_c = h_c(\theta - \theta_c) \quad \text{em } \partial\mathcal{B}_t^c \times \mathcal{I}, \quad (3.11)$$

em que $\partial\mathcal{B}_t^c$ é a região de $\partial\mathcal{B}_t^q$ em que ocorre transferência de calor por convecção, h_c é o coeficiente local de transferência de calor por convecção³ e θ_c é a temperatura do ambiente.

Já o fluxo de calor transferido por radiação é descrito em termos da expressão

$$q_r = h_r(\theta - \theta_r) \quad \text{em } \partial\mathcal{B}_t^r \times \mathcal{I}, \quad (3.12)$$

em que $\partial\mathcal{B}_t^r$ é a região de $\partial\mathcal{B}_t^q$ em que ocorre transferência de calor por radiação, θ_r é a temperatura da fonte radiativa e o coeficiente de transferência de calor por radiação é dado por

$$h_r = \mathcal{F}\sigma(\theta + \theta_r)(\theta^2 + \theta_r^2), \quad (3.13)$$

onde $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzmann e \mathcal{F} é um fator de forma.⁴

Em geral, as expressões

$$\partial\mathcal{B}_t^c \cap \partial\mathcal{B}_t^r \neq \emptyset, \quad (3.14)$$

$$\partial\mathcal{B}_t^c \cap \partial\mathcal{B}_t^\perp \neq \emptyset, \quad (3.15)$$

$$\partial\mathcal{B}_t^r \cap \partial\mathcal{B}_t^\perp \neq \emptyset \quad (3.16)$$

são válidas, em que $\partial\mathcal{B}_t^\perp$ é a região de $\partial\mathcal{B}_t^q$ em que \hat{q} é prescrito.

³É comum se utilizar um coeficiente médio de transferência de calor por convecção dado por

$$h_m = \frac{1}{A} \int_A h_c \, da,$$

em que A é a área de $\partial\mathcal{B}_t^c$.

⁴Na Eq. (3.13), em particular, observa-se a necessidade de se expressar a temperatura em K .

4 MODELAGEM MULTIESCALA

No presente capítulo, algumas questões a respeito de homogeneização serão apresentadas e, posteriormente, o método multiescala será desenvolvido.

Materiais compósitos, isto é, materiais heterogêneos compostos por dois ou mais diferentes constituintes [Ortolano *et al.*, 2013], são vastamente utilizados em engenharia, uma vez que permitem obter vantagem das diferentes propriedades desses materiais constituintes, bem como de suas estruturas geométricas e da interação entre eles. Grande parte dos materiais tem uma característica multiescala intrínseca, no sentido de que é possível diferenciar uma escala macroscópica (macroescala), e as escalas inferiores, denominadas microscópicas (microescala) [Kanouté *et al.*, 2009].

Em tese, seria possível resolver um problema envolvendo um material compósito, tal como a condução de calor, considerando diretamente a microescala [Kanouté *et al.*, 2009], ou seja, modelando todas as características da microestrutura ao longo de todo o corpo sob análise. No entanto, essa abordagem é em geral inviável, considerando-se os recursos computacionais atualmente disponíveis. Diante disso, torna-se necessária a utilização de modelos homogeneizados em praticamente todos os ramos das ciências físicas. Em geral, obtém-se propriedades homogeneizadas, as quais são utilizadas posteriormente na análise macroscópica.

Dentre as técnicas descritas na literatura, pode-se citar os esquemas de homogeneização de campo médio, os quais assumem determinadas hipóteses a respeito da interação entre os constituintes. Em geral, esses esquemas têm como base soluções analíticas do problema de valor de contorno no nível da microescala [Ortolano *et al.*, 2013]. As propriedades efetivas podem ser consideradas por meio dos limites de Voigt, Reuss ou Hashin-Shtrikman [Hashin e Shtrikman, 1963], ou por meio das estimativas obtidas a partir de métodos como *Dilute*, Mori-Tanaka, etc., derivados do trabalho pioneiro de Eshelby [Eshelby, 1957], o qual é válido para inclusões elipsoidais e assume uma perfeita união entre os constituintes [Ortolano *et al.*, 2013]. As propriedades efetivas determinadas com esses modelos dependem de parâmetros que caracterizam a microestrutura, tais como as razões volumétricas e as propriedades dos constituintes. Efeitos de percolação, por exemplo, não são capturados com esses métodos [Ortolano *et al.*, 2013].

Outra técnica de homogeneização clássica é o método de homogeneização assintótica [Bensoussan *et al.*, 1978; Sanchez-Palencia, 1980], aplicada principalmente a problemas lineares com duas escalas [Kanouté *et al.*, 2009] envolvendo estruturas periódicas. Essa técnica é, em geral, baseada em uma expansão assintótica do campo de interesse em termos de um parâmetro pequeno $\epsilon := l/L$, onde l é o tamanho da célula e L é o comprimento característico macroscópico (o menor dentre o comprimento característico associado à geometria do corpo macroscópico e o comprimento característico fenomenológico, esse último associado aos gradientes do campo de interesse). Como consequência,

obtém-se um conjunto de equações diferenciais parciais com condições de contorno periódicas. Esse sistema de equações diferenciais pode ser resolvido, por exemplo, por meio do método de elementos finitos [Ortolano *et al.*, 2013]. Dentre as técnicas de homogeneização, essa é a mais rigorosa do ponto de vista matemático. Porém, é estritamente válida somente para materiais periódicos. Além disso, segundo Auriault *et al.*, 2009, pág. 101, existe um abismo entre o ponto de vista matemático — onde $\epsilon \rightarrow 0$ e a descrição macroscópica é infinitamente exata — e a realidade física, em que tem-se um elemento de volume representativo finito, para o qual $0 < \epsilon \ll 1$.

Atualmente as técnicas computacionais multiescala têm sido muito utilizadas, em particular o método FE². Junto a esses métodos sempre há associado o conceito de elemento de volume representativo¹, que deve ser estatisticamente representativo do material, o que significa que deve conter um grande número de heterogeneidades [Ortolano *et al.*, 2013]. No método FE², a escala macroscópica é discretizada de acordo com o método dos elementos finitos, e para cada ponto de integração da malha macroscópica se associa um EVR, onde um problema de valor de contorno é resolvido novamente por meio do método dos elementos finitos [Ortolano *et al.*, 2013]. As informações obtidas a partir da solução do problema associado ao EVR servem para retroalimentar o problema macroscópico, de forma que tem-se uma solução aninhada.

4.1 Propriedades efetivas

As propriedades efetivas de um material heterogêneo periódico podem ser determinadas por meio da técnica de homogeneização assintótica, válida na sua forma clássica para materiais periódicos. Em outro contexto, válido para materiais periódicos ou não, as propriedades efetivas podem ser determinadas por meio da solução de problemas definidos em um elemento de volume representativo da microescala, denotado aqui por \square .² Nesse contexto são assumidas determinadas condições de contorno e tem sido usual considerar

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = 0 \quad \text{em } \square \quad (4.1)$$

para o problema térmico e

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = 0 \quad \text{ou} \quad \operatorname{Div} \mathbf{T}_r = 0 \quad \text{em } \square \quad (4.2)$$

para o problema mecânico ao determinar-se tais propriedades efetivas, conforme observar-se, por exemplo, nos trabalhos de Auriault *et al.*, 2009, e Castaneda, 2004.

No âmbito mecânico, Castaneda, 2004, argumenta que uma propriedade básica de um material homogêneo é que uma deformação uniforme é produzida quando uma condição de contorno de deslocamento linear é aplicada sobre $\partial \square$, isto é, quando

¹O Elemento de Volume Representativo é definido mais rigorosamente na pág. 22.

²Para o significado mais preciso de EVR (denotado por \square), veja a Definição 4.4 na pág. 22.

$$\mathbf{u} = \mathbf{E}\mathbf{x} \quad \text{em } \partial\Box, \quad (4.3)$$

sendo \mathbf{E} um tensor constante. Como o autor define o EVR como um material *macroscopicamente uniforme*, espera-se que o EVR produza uma tensão macroscópica uniforme quando a referida condição de contorno é aplicada. E isso, por sua vez, sugere a definição das propriedades efetivas como a relação entre os campos uniformes de tensão e deformação.

Argumentos similares podem ser utilizados quando se aplica, no lugar da condição de contorno de deslocamento linear, a condição de contorno de tração uniforme, dada por

$$\mathbf{T}\mathbf{n} = \boldsymbol{\tau}\mathbf{n} \quad \text{em } \partial\Box, \quad (4.4)$$

sendo $\boldsymbol{\tau}$ um tensor constante.

No que diz respeito ao problema de condução de calor, as propriedades efetivas podem ser determinadas a partir da solução de problemas no EVR com condições de contorno de temperatura linear,

$$\theta = \mathbf{G} \cdot \mathbf{x} \quad \text{em } \partial\Box, \quad (4.5)$$

ou fluxo uniforme,

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{n} \quad \text{em } \partial\Box, \quad (4.6)$$

onde \mathbf{G} e \mathbf{Q} são vetores constantes.

4.1.1 Princípio de Hill-Mandel

Dentro do contexto dos métodos que utilizam o conceito de EVR, surge o *princípio de Hill-Mandel* [Hill, 1963, 1972; Mandel, 1972], estabelecido originalmente para problemas mecânicos. Esse princípio assume formas variadas, dependendo do problema específico. Duas das mais utilizadas são³

$$\langle \mathbf{T}_r : \mathbf{F} \rangle_{\Box} = \langle \mathbf{T}_r \rangle_{\Box} : \langle \mathbf{F} \rangle_{\Box} \quad (4.7)$$

e⁴

$$\langle \mathbf{T} : \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\Box} = \langle \mathbf{T} \rangle_{\Box} : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\Box}, \quad (4.8)$$

onde $\boldsymbol{\varepsilon}$ é a deformação infinitesimal.

No que diz respeito ao problema de condução de calor, o princípio de Hill-Mandel é dado por [Ostoja-Starzewski, 2002; Auriault *et al.*, 2009]

$$\langle \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \rangle_{\Box} = \langle \mathbf{q} \rangle_{\Box} \cdot \langle \mathbf{g} \rangle_{\Box}. \quad (4.9)$$

³A notação $\langle \bullet \rangle_{\Box}$ indica a média de \bullet sobre o EVR, conforme a Definição 4.6.

⁴O mesmo símbolo está sendo utilizado para a deformação infinitesimal e para a energia interna específica. Entretanto, a deformação infinitesimal só será considerada em sua forma tensorial, escrita em negrito.

Em parte da literatura, encontra-se menções ao *lema de Hill-Mandel*, em vez de o *princípio de Hill-Mandel*. De fato, desde que se assuma um campo de tensão ou fluxo de calor com divergente nulo e uma das condições de contorno mencionadas anteriormente⁵, o princípio de Hill-Mandel torna-se o lema de Hill-Mandel, já que pode ser demonstrado. Ranganathan e Ostoja-Starzewski, 2009, por exemplo, utilizam o princípio de Hill-Mandel em uma forma que denominam *condição de Hill*, a partir da qual extraem as condições de contorno (4.5) e (4.6), além das condições de contorno mistas-ortogonais, menos usuais.

4.2 Métodos computacionais multiescala

As técnicas computacionais multiescala são baseadas na solução de dois problemas de valor de contorno aninhados [Pham *et al.*, 2013], um associado à microescala e outro à macroescala, e permitem a consideração de constituintes com geometria arbitrária, bem como relações constitutivas arbitrárias [Kanouté *et al.*, 2009]. Dentre esses métodos, pode-se citar o método dos elementos finitos multiescala, abreviado por FE² [Feyel, 1999; Feyel e Chaboche, 2000], de acordo com o qual a cada ponto de integração da malha de elementos finitos macroscópica se associa um EVR, cujo problema associado também é resolvido pelo método de elementos finitos. Esse método não requer a especificação de relações constitutivas macroscópicas [Kanouté *et al.*, 2009].

A partir deste ponto do texto, em que vai se lidar simultaneamente com grandezas na macroescala e com grandezas na microescala, torna-se importante definir certas grandezas associadas à macroescala, de modo a distingui-las claramente das suas contrapartes microscópicas, as quais, por sua vez, continuam sendo denotadas pela forma usual.

DEFINIÇÃO 4.1: O gradiente e o divergente macroscópicos (na configuração espacial) são denotados, respectivamente, por $\overline{\text{grad}}$ e $\overline{\text{div}}$. Na configuração de referência, o gradiente e o divergente macroscópicos são denotados por $\overline{\nabla}$ e $\overline{\text{Div}}$, respectivamente.

DEFINIÇÃO 4.2: A temperatura na macroescala, denominada temperatura macroscópica, é denotada por $\overline{\theta}$. O fluxo de calor na macroescala, ou fluxo de calor macroscópico, é denotado por $\overline{\mathbf{q}}$. Na configuração de referência, o fluxo de calor macroscópico é denotado por $\overline{\mathbf{q}}_r$. O gradiente de temperatura na macroescala, também denominado gradiente de temperatura macroscópico, é denotado por

$$\overline{\mathbf{g}} := \overline{\text{grad}} \overline{\theta}. \quad (4.10)$$

DEFINIÇÃO 4.3: O tensor tensão de Piola macroscópico é denotado por $\overline{\mathbf{T}}_r$. O tensor tensão de Cauchy macroscópico é denotado por $\overline{\mathbf{T}}$. O gradiente de deformação macroscópico é denotado por

$$\overline{\mathbf{F}} := \overline{\nabla} \overline{\mathbf{x}}, \quad (4.11)$$

⁵Em verdade, as condições de contorno periódicas, descritas na pág. 32, também podem ser utilizadas.

onde $\bar{\chi}$ é a função movimento macroscópica.

4.2.1 Princípio de Hill-Mandel em termos de grandezas macroscópicas

Os modelos multiescala em geral consideram a microescala, por meio do seu EVR, sob a condição (4.1) para o problema térmico ou (4.2) para o problema mecânico. Além disso, assume-se em geral que os fluxos e os gradientes macroscópicos sejam dados pelas médias de suas contrapartes microscópicas:

$$\bar{\mathbf{q}} = \langle \mathbf{q} \rangle_{\square}, \quad (4.12)$$

$$\bar{\mathbf{g}} = \langle \mathbf{g} \rangle_{\square}, \quad (4.13)$$

e

$$\bar{\mathbf{T}}_r = \langle \mathbf{T}_r \rangle_{\square}, \quad (4.14)$$

$$\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\square}. \quad (4.15)$$

Dessa forma, o princípio de Hill-Mandel para os problemas mecânico e de condução de calor pode ser escrito, respectivamente, como

$$\langle \mathbf{T}_r : \mathbf{F} \rangle_{\square} = \langle \mathbf{T}_r \rangle_{\square} : \langle \mathbf{F} \rangle_{\square} = \bar{\mathbf{T}}_r : \bar{\mathbf{F}} \quad (4.16)$$

e

$$\langle \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} \rangle_{\square} = \langle \mathbf{q} \rangle_{\square} \cdot \langle \mathbf{g} \rangle_{\square} = \bar{\mathbf{q}} \cdot \bar{\mathbf{g}}. \quad (4.17)$$

4.3 Microescala usualmente modelada com $\text{div } \mathbf{q} = \mathbf{0}$

Mesmo para problemas transientes alguns autores como Özdemir *et al.*, 2008, e Fish *et al.*, 2012, consideram a microescala em estado estacionário⁶, o que pode ser justificado quando “o menor comprimento de onda característico é várias vezes maior que o comprimento característico de cada fase microestrutural” [Pham *et al.*, 2013]. Consequentemente, na ausência de forças de corpo e de geração de calor, as equações (4.1) e (4.2) podem ser tomadas como válidas na microescala. Em Özdemir *et al.*, 2008, a mudança da energia interna na microescala não é considerada por meio da justificativa de um EVR de tamanho pequeno. Essa consideração juntamente com a ausência de geração de calor leva à hipótese $\text{div } \mathbf{q} = \mathbf{0}$ em \square , enquanto $\overline{\text{div}} \bar{\mathbf{q}} \neq \mathbf{0}$ em $\bar{\mathcal{B}}_t$. Um outro exemplo, no contexto termomecânico, é dado em Temizer e Wriggers, 2011, no qual as relações $\text{Div } \mathbf{q}_r = \mathbf{0}$ e $\text{Div } \mathbf{T}_r = \mathbf{0}$ são assumidas em \square ⁷ sob a justificativa de preservar somente a resposta intrínseca do material, enquanto $\overline{\text{Div}} \bar{\mathbf{q}}_r \neq \mathbf{0}$ e $\overline{\text{Div}} \bar{\mathbf{T}}_r \neq \mathbf{0}$ em $\bar{\mathcal{B}}$.

⁶Ou seja, não há variação de energia interna para a condução de calor e não há variação de momento linear para o problema mecânico.

⁷O EVR \square , no referido trabalho, está definido na configuração de referência. Daqui por diante, o contexto definirá em qual configuração \square está definido.

De fato, Temizer, 2012, demonstrou a validade da relação $\text{Div} \mathbf{q}_r = 0$ em \square para um problema de condução de calor transiente com geração de calor ao utilizar a primeira lei da termodinâmica e condições de contorno periódicas dentro do contexto de homogeneização assintótica. O autor também demonstrou a validade da relação $\text{Div} \mathbf{T}_r = \mathbf{0}$ em \square para um problema mecânico com forças de corpo e de inércia, utilizando o balanço de momento linear e condições de contorno periódicas. Porém, é importante observar que esses resultados são válidos apenas para $\epsilon \rightarrow 0$.

Vale ainda ressaltar que, mesmo no caso em que $\epsilon \rightarrow 0$, a inclusão de termos adicionais na expansão assintótica para corrigir a solução em instantes iniciais dá origem a problemas de célula *transientes* (veja [Matine *et al.*, 2015]), contrastando com o caráter estacionário recém descrito.

De acordo com Germain *et al.*, 1983, se a temperatura não pode ser assumida como aproximadamente constante no EVR⁸ ou se o tempo característico no EVR e na macroescala são da mesma ordem, então a relação $\text{div} \mathbf{q} = 0$ em \square não é válida, uma vez que os efeitos de inércia devem ser levados em consideração. A consequência de um fluxo de calor com divergente não-nulo na microescala é que é o princípio de Hill-Mandel na sua forma usual não mais se aplica.

Trabalhos que propõem uma descrição mais detalhada do EVR⁹ são aqueles de Larsson *et al.*, 2010, no contexto de homogeneização computacional de condução de calor transiente, e de de Souza Neto *et al.*, 2015, e Pham *et al.*, 2013, no contexto de mecânica de corpos deformáveis com efeitos de inércia e de forças de corpo na microescala. Tais trabalhos são de especial interesse para esta tese.

Na seção a seguir será proposta uma extensão para o princípio de Hill-Mandel aplicado à homogeneização de problemas de condução de calor transientes com geração de calor, o qual incorpora efeitos de inércia térmica que surgem da consideração de um EVR finito.

4.4 Desenvolvimento do modelo multiescala: Preliminares

Uma representação esquemática dos corpos real e homogeneizado pode ser observada na Fig. 4.1, que também apresenta as condições de contorno usuais e homogeneizadas, sendo as últimas derivadas ao longo deste trabalho. As temperaturas e suas variações também são definidas em termos dos conjuntos admissíveis e dos espaços das variações. A definição de tais conjuntos e espaços é feita mais adiante.

DEFINIÇÃO 4.4: O EVR, denotado neste trabalho por \square e apresentado na Fig. 4.1, tem um tamanho l que é assumido (i) várias vezes maior que o comprimento característico, d ,

⁸Os autores usam o termo *célula* em vez de EVR, uma vez que lidam com materiais periódicos.

⁹Por *descrição mais detalhada do EVR* faz-se menção à incorporação das força de inércia e de corpo no contexto mecânico e de geração de calor e variação da energia interna no contexto de condução de calor.

de cada inclusão e (ii) muito pequeno quando comparado ao comprimento característico macroscópico, L , que é o menor dentre o comprimento característico associado à geometria do corpo macroscópico, L_g , e o comprimento característico fenomenológico, L_f .

Mais adiante será feita menção ao Elemento de Superfície Representativo (ESR), denotado por γ , que é o análogo superficial do EVR. No contexto de homogeneização, o problema real, que consiste no corpo heterogêneo (real) \mathcal{B}_t sujeito às condições de contorno $\theta = \hat{\theta}$ em $\partial\mathcal{B}_t^\theta$ e $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \hat{q}$ em $\partial\mathcal{B}_t^q$ (Fig. 4.1), é substituído por um problema que consiste de um corpo homogeneizado $\bar{\mathcal{B}}_t$ sujeito às condições de contorno $\bar{\theta} = \langle \hat{\theta} \rangle_\gamma$ em $\partial\bar{\mathcal{B}}_t^\theta$ e $\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \bar{\mathbf{n}} = \bar{q}$ em $\partial\bar{\mathcal{B}}_t^q$, em que os significados dessas quantidades serão tornados claros no decorrer do trabalho. A heterogeneidade do corpo real é levada em consideração na descrição macroscópica ao associar-se a cada ponto $\bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t$ um EVR adequado (Fig. 4.1c) e a cada ponto $\bar{\mathbf{x}} \in \partial\bar{\mathcal{B}}_t$ um ESR adequado, nos quais os constituintes são modelados. Conforme observado por Larsson *et al.*, 2010, quando o EVR tem um tamanho finito, os EVRs associados a dois pontos macroscópicos suficientes próximos se sobrepõem. Como será visto ao longo do trabalho, (i) as quantidades macroscópicas serão escritas em termos de médias apropriadas das quantidades na microescala e (ii) a temperatura macroscópica e seu gradiente definem o problema do EVR. Dessa forma, o problema original é substituído pelos problemas macroscópico e do EVR, que são resolvidos de maneira aninhada.

Algumas definições essenciais são agora enunciadas:

DEFINIÇÃO 4.5: O volume¹⁰ do EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$ é denotado por

$$|\square(\bar{\mathbf{x}})| := \int_{\square} dv, \quad \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.18)$$

DEFINIÇÃO 4.6: A média de um campo φ no EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$ é denotada por

$$\langle \varphi \rangle_{\square}(\bar{\mathbf{x}}) := \frac{1}{|\square(\bar{\mathbf{x}})|} \int_{\square} \varphi(\mathbf{x}) dv, \quad \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \square. \quad (4.19)$$

DEFINIÇÃO 4.7: A área¹¹ do ESR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$ é denotada por

$$|\gamma(\bar{\mathbf{x}})| := \int_{\gamma} da, \quad \bar{\mathbf{x}} \in \partial\bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.20)$$

DEFINIÇÃO 4.8: A média de um campo φ no ESR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$ é denotada por

$$\langle \varphi \rangle_{\gamma}(\bar{\mathbf{x}}) := \frac{1}{|\gamma(\bar{\mathbf{x}})|} \int_{\gamma} \varphi(\mathbf{x}) dv, \quad \bar{\mathbf{x}} \in \partial\bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \gamma. \quad (4.21)$$

DEFINIÇÃO 4.9: A notação $\theta(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}})$ é utilizada para tornar clara a separação de escalas.

¹⁰Ou área, no caso de modelagem plana.

¹¹Ou comprimento, no caso de modelagem plana.

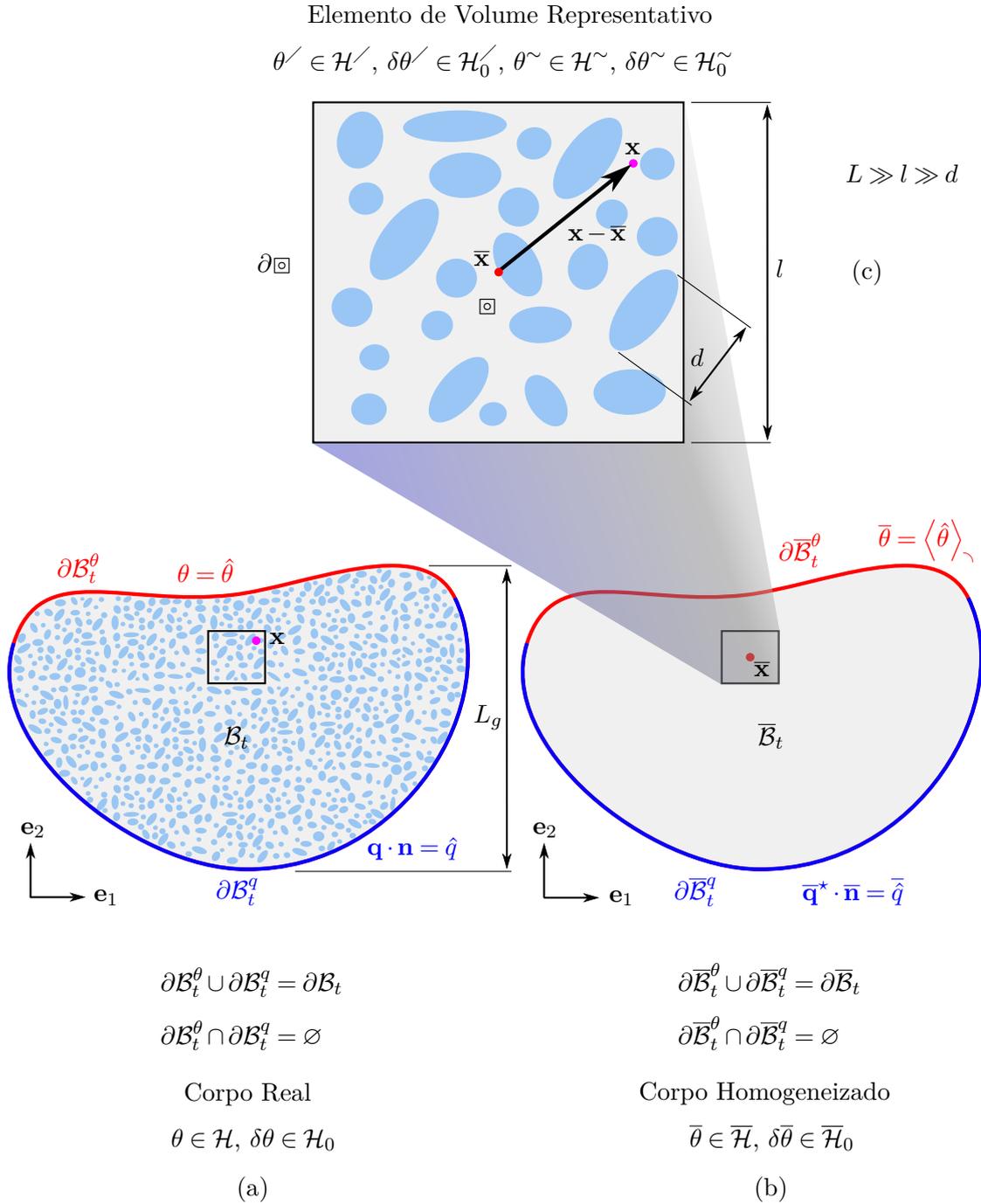


Figura 4.1 – Representação esquemática dos corpos (a) real e (b) homogeneizado, conectados pelo (c) elemento de volume representativo associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$. As condições de contorno usual e homogeneizada também estão apresentadas, bem como as temperaturas e suas variações em termos, respectivamente, dos conjuntos admissíveis e dos espaços das variações admissíveis.

DEFINIÇÃO 4.10: Tanto no EVR quanto no ESR, a temperatura microscópica é decomposta aditivamente em

$$\theta(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}) = \theta'(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}) + \theta^\sim(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}), \quad \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t \cup \partial\bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \square \vee \mathbf{x} \in \gamma, \quad (4.22)$$

em que $\theta'(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}})$ representa a parte suave da temperatura, a qual é completamente definida pelas quantidades macroscópicas, enquanto $\theta^\sim(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}})$ representa a flutuação da temperatura observada na microescala. A ponte entre as escalas micro e macroscópica é feita assumindo $\theta' \approx \bar{\theta}$ dentro de cada EVR ou ESR.

OBSERVAÇÃO 4.1: A diferença $\theta' - \bar{\theta}$ representa um erro do modelo.

Este trabalho segue os conceitos de homogeneização de primeira ordem. Portanto, assume-se que somente a temperatura macroscópica e seu gradiente são transferidos da macroescala para a microescala.

HIPÓTESE 4.1: Dada a temperatura macroscópica $\bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t)$ e seu gradiente

$$\bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}, t) := \overline{\text{grad}} \bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t), \quad (4.23)$$

a parte suave da temperatura na microescala é

$$\theta'(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}) = \bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t) + \bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}, t) \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}), \quad \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t \cup \partial\bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \square \vee \mathbf{x} \in \gamma, \quad (4.24)$$

com o EVR (ou ESR) sendo centrado no ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}}$, como pode-se observar na Fig. 4.1c, de tal forma que $\langle \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}} \rangle_{\square} = \mathbf{0}$ (ou $\langle \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}} \rangle_{\gamma} = \mathbf{0}$). Pode-se identificar diretamente a Eq. (4.24) como uma expansão de Taylor de primeira ordem em torno de $\bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t)$.

A decomposição da temperatura na microescala, dada pelas Eqs. (4.22) e (4.24), está representada esquematicamente na Fig. 4.2. Dessa decomposição segue que, em geral,

$$\bar{\theta} \neq \langle \theta \rangle_{\square}, \quad (4.25)$$

$$\bar{\mathbf{g}} \neq \langle \text{grad} \theta \rangle_{\square}. \quad (4.26)$$

HIPÓTESE 4.2: A temperatura varia suavemente na fronteira $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$ do corpo macroscópico, de forma é possível assumir $\theta^\sim = 0$ em cada ESR.

Ao tomar a média da equação

$$\underbrace{\bar{\theta} + \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})}_{=\theta} + \theta^\sim = \hat{\theta} \quad \text{em } \partial\bar{\mathcal{B}}_t^\theta \times \mathcal{I} \quad (4.27)$$

sobre um ESR, considerando a hipótese anterior, encontra-se

$$\bar{\theta} + \bar{\mathbf{g}} \cdot \underbrace{\langle \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}} \rangle_{\gamma}}_{=0} = \langle \hat{\theta} \rangle_{\gamma}$$

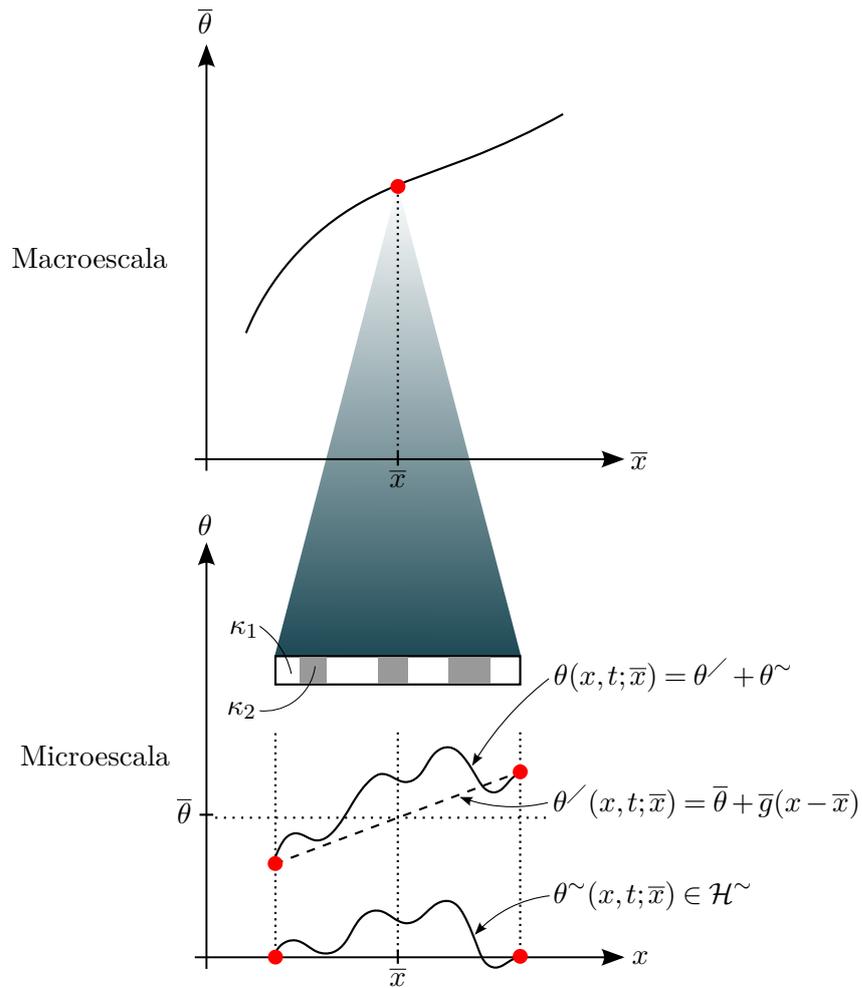


Figura 4.2 – Representação esquemática da temperatura na macro e na microescala para um problema unidimensional, em que o EVR consiste em dois materiais com condutividades térmicas κ_1 e κ_2 . O produto $\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})$ foi escrito como $\bar{g}(x - \bar{x})$. A flutuação da temperatura microscópica, θ^\sim , está de acordo com a futura definição do conjunto \mathcal{H}^\sim (ver Eq. (4.73)). Adaptado de Larsson *et al.*, 2010.

$$\bar{\theta} = \langle \hat{\theta} \rangle_{\gamma} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^\theta \times \mathcal{I}. \quad (4.28)$$

O conjunto das temperaturas admissíveis e o espaço das variações admissíveis das temperaturas são a seguir definidos da maneira usual.

DEFINIÇÃO 4.11: Temperatura convencional¹²:

(a) Conjunto das temperaturas admissíveis:

$$\mathcal{H} := \left\{ \theta(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B}_t \times \mathcal{I}) : \theta = \hat{\theta} \text{ em } \partial \mathcal{B}_t^\theta \times \mathcal{I} \right\}, \quad (4.29)$$

onde \mathcal{H}^1 é um espaço de Sobolev de ordem 1;

(b) Espaço das variações admissíveis das temperaturas:

$$\mathcal{H}_0 := \{v : v = \theta_a - \theta_b; \theta_a, \theta_b \in \mathcal{H}\}. \quad (4.30)$$

A decomposição de temperatura, dada pelas Eqs. (4.22) e (4.24), e a Eq. (4.28) motivam a definição dos seguintes conjuntos de temperaturas admissíveis e espaços das variações admissíveis das temperaturas:

DEFINIÇÃO 4.12: Temperatura macroscópica¹³:

(a) Conjunto das temperaturas macroscópicas admissíveis:

$$\bar{\mathcal{H}} := \left\{ \bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t) \in \mathcal{H}^1(\bar{\mathcal{B}}_t \times \mathcal{I}) : \bar{\theta} = \langle \hat{\theta} \rangle_{\gamma} \text{ em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^\theta \times \mathcal{I} \right\}; \quad (4.31)$$

(b) Espaço das variações admissíveis das temperaturas macroscópicas:

$$\bar{\mathcal{H}}_0 := \{ \bar{v} : \bar{v} = \bar{\theta}_a - \bar{\theta}_b; \bar{\theta}_a, \bar{\theta}_b \in \bar{\mathcal{H}} \}. \quad (4.32)$$

DEFINIÇÃO 4.13: Temperatura microscópica¹⁴:

(a) Conjunto das temperaturas microscópicas lineares admissíveis:

$$\mathcal{H}' := \left\{ \theta'(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}) \in \mathcal{H}^1(\square \times \mathcal{I}) : \theta' = \bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t) + \bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}, t) \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}), \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}} \right\}; \quad (4.33)$$

(b) Espaço das variações admissíveis das temperaturas microscópicas lineares:

$$\mathcal{H}'_0 := \left\{ v' : v' = \theta'_a - \theta'_b; \theta'_a, \theta'_b \in \mathcal{H}' \right\}; \quad (4.34)$$

(c) Conjunto das flutuações das temperaturas microscópicas admissíveis, o qual é denotado por \mathcal{H}^\sim e será definido posteriormente pelo método multiescala (veja a pág. 34);

¹²Associada ao corpo real (ver Fig. 4.1a).

¹³Associada ao corpo homogeneizado (ver Fig. 4.1b).

¹⁴Associada ao EVR (ver Fig. 4.1c).

- (d) Espaço das variações admissíveis das flutuações das temperaturas microscópicas, o qual é denotado por \mathcal{H}_0^\sim e também será definido posteriormente (veja a pág. 34).

4.5 Desenvolvimento do modelo multiescala: Extensão do princípio de Hill-Mandel para o problema de condução de calor transiente com geração de calor

Inicia-se pelo enunciado usual do problema real, dado por: Encontre $\theta \in \mathcal{H}$ de forma que

$$\int_{\mathcal{B}_t} (\mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{g} + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta) dv - \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} \hat{q} \delta \theta da = 0, \quad \forall \delta \theta \in \mathcal{H}_0, t \in \mathcal{I}. \quad (4.35)$$

Esse enunciado variacional é equivalente¹⁵ à equação diferencial expressa por

$$-\operatorname{div} \mathbf{q} + r - \dot{\phi} = 0, \quad \text{em } \mathcal{B}_t \times \mathcal{I}, \quad (4.36)$$

à condição de contorno essencial

$$\theta = \hat{\theta} \quad \text{em } \partial \mathcal{B}_t^\theta \times \mathcal{I} \quad (4.37)$$

e à condição de contorno natural (não serão tratadas condições de contorno que envolvam radiação ou convecção)

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \hat{q} \quad \text{em } \partial \mathcal{B}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (4.38)$$

Além disso, condições iniciais devem ser especificadas para completar o enunciado. Juntas, elas definem o problema de valor de contorno inicial para a condução de calor transiente em sólidos.

A demonstração da equivalência entre o enunciado variacional e as Eqs. (4.36)–(4.38) pode ser feita com o auxílio do teorema da divergência ao reescrever-se a Eq. (4.35) como

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\mathcal{B}_t} (\mathbf{q} \cdot \operatorname{grad} \delta \theta + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta) dv - \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} \hat{q} \delta \theta da \\ &= \int_{\mathcal{B}_t} [\operatorname{div} (\mathbf{q} \delta \theta) - \delta \theta \operatorname{div} \mathbf{q} + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta] dv - \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} \hat{q} \delta \theta da \\ &= \underbrace{\int_{\partial \mathcal{B}_t^\theta} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \delta \theta da}_{=0} + \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \delta \theta da + \int_{\mathcal{B}_t} \delta \theta (-\operatorname{div} \mathbf{q} + r - \dot{\phi}) dv - \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} \hat{q} \delta \theta da \\ &= \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \hat{q}) \delta \theta da + \int_{\mathcal{B}_t} \delta \theta (-\operatorname{div} \mathbf{q} + r - \dot{\phi}) dv, \quad \forall \delta \theta \in \mathcal{H}_0, t \in \mathcal{I}, \end{aligned} \quad (4.39)$$

de onde as Eqs. (4.36) e (4.38) seguem por meio da utilização do lema fundamental do cálculo das variações, enquanto a Eq. (4.37) decorre da restrição $\theta \in \mathcal{H}$.

¹⁵No sentido do cálculo das variações.

HIPÓTESE 4.3: Considerando os conceitos de EVR e ESR, o enunciado variacional, dado pela Eq. (4.35), pode ser reformulado como: Encontre $\theta^\sim \in \mathcal{H}^\sim$ de forma que

$$\int_{\overline{\mathcal{B}}_t} \langle \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{g} + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta \rangle_{\square} d\bar{v} - \int_{\partial \overline{\mathcal{B}}_t^q} \langle \hat{q} \delta \theta \rangle_{\gamma} d\bar{a} = 0, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \overline{\mathcal{H}}_0, \delta \theta^\sim \in \mathcal{H}_0^\sim, t \in \mathcal{I}. \quad (4.40)$$

A Eq. (4.40) pode ser derivada do enunciado variacional original assumindo que as integrais que aparecem nele possam ser aproximadas como

$$\int_{\mathcal{B}_t} \varphi(\mathbf{x}) dv \approx \int_{\overline{\mathcal{B}}_t} \langle \varphi \rangle_{\square}(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{v} \quad (4.41)$$

e

$$\int_{\partial \mathcal{B}_t} \varphi(\mathbf{x}) da \approx \int_{\partial \overline{\mathcal{B}}_t} \langle \varphi \rangle_{\gamma}(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{a}. \quad (4.42)$$

A reformulação mencionada baseia-se no trabalho de Larsson *et al.*, 2010. Nesta tese, no entanto, a condição inicial não foi incluída nos enunciados variacionais. Essa abordagem foi escolhida para manter os resultados tão concisos quanto possível. Observe que a Eq. (4.40) foi escrita em termos de $\delta \bar{\theta}$ e $\delta \theta^\sim$ tendo por base o fato que $\delta \theta$ depende implicitamente dessas variações, como pode-se observar das Eqs. (4.22) e (4.24).

O objetivo do presente método multiescala é transformar a Eq. (4.40) em uma equação suave, macroscópica. Considerando que o termo $\delta \theta^\sim$ não deve estar presente na descrição macroscópica do corpo homogeneizado, $\overline{\mathcal{B}}_t$, assume-se o seguinte enunciado variacional macroscópico.

HIPÓTESE 4.4: O enunciado variacional do problema homogeneizado (macroscópico) é: Encontre $\bar{\theta} \in \overline{\mathcal{H}}$ de forma que

$$\int_{\overline{\mathcal{B}}_t} (\bar{\mathbf{q}}^\star \cdot \delta \bar{\mathbf{g}} + \bar{\iota} \delta \bar{\theta}) d\bar{v} - \int_{\partial \overline{\mathcal{B}}_t^q} \bar{q} \delta \bar{\theta} d\bar{a} = 0, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \overline{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}, \quad (4.43)$$

onde $\delta \bar{\mathbf{g}} = \overline{\text{grad}} \delta \bar{\theta}$.

A quantidade $\bar{\mathbf{q}}^\star$ é um fluxo de calor macroscópico não-usual, como será mostrado mais adiante, enquanto $\bar{\iota}$ representa todas as quantidades escalares presentes na descrição macroscópica. A grandeza \bar{q} é o fluxo de calor macroscópico normal prescrito. As expressões para essas quantidades em termos das médias microscópicas serão reveladas ao longo do trabalho. A hipótese recém enunciada pode ser tomada como a mais importante do método que está sendo desenvolvido.

A Eq. (4.43) é equivalente a assumir-se para o corpo $\overline{\mathcal{B}}_t$ a equação diferencial (macroscópica) dada por

$$-\overline{\text{div}} \bar{\mathbf{q}}^\star + \bar{\iota} = 0 \quad \text{em } \overline{\mathcal{B}}_t \times \mathcal{I} \quad (4.44)$$

e para a sua fronteira natural $\partial \overline{\mathcal{B}}_t^q$ a condição de contorno natural (macroscópica)

$$\bar{\mathbf{q}}^\star \cdot \bar{\mathbf{n}} = \bar{q} \quad \text{em } \partial \overline{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}, \quad (4.45)$$

enquanto a condição de contorno essencial é

$$\bar{\theta} = \langle \hat{\theta} \rangle_{\searrow} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^\theta \times \mathcal{I} \quad (4.46)$$

e deve-se à restrição $\bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}$. A demonstração da equivalência é similar à apresentada para o enunciado variacional do problema real.

Subtraindo a Eq. (4.43) da Eq. (4.40), tem-se

$$\int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \langle \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{g} + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta \rangle_{\square} d\bar{v} - \int_{\partial \bar{\mathcal{B}}_t^q} \langle \hat{q} \delta \theta \rangle_{\searrow} d\bar{a} = \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} (\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \delta \bar{\mathbf{g}} + \bar{i} \delta \bar{\theta}) d\bar{v} - \int_{\partial \bar{\mathcal{B}}_t^q} \bar{q} \delta \bar{\theta} d\bar{a}, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, \delta \theta \sim \in \mathcal{H}_0^\sim, t \in \mathcal{I}. \quad (4.47)$$

PROPOSIÇÃO 4.1: *Tendo por base a Eq. (4.47), escreve-se*

$$\int_{\bar{\mathcal{B}}_t} (\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \delta \bar{\mathbf{g}} + \bar{i} \delta \bar{\theta}) d\bar{v} = \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \langle \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{g} + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta \rangle_{\square} d\bar{v}, \quad \forall \delta \bar{\theta}; \forall \delta \theta \sim \in \mathcal{H}_0^\sim, t \in \mathcal{I}, \quad (4.48)$$

$$\int_{\partial \bar{\mathcal{B}}_t^q} \bar{q} \delta \bar{\theta} d\bar{a} = \int_{\partial \bar{\mathcal{B}}_t^q} \langle \hat{q} \delta \theta \rangle_{\searrow} d\bar{a}, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}. \quad (4.49)$$

Na Eq. (4.49) a restrição $\delta \theta \sim \in \mathcal{H}_0^\sim$ não é considerada porque $\delta \theta \sim = 0$ em $\partial \bar{\mathcal{B}}_t$, o que decorre da Hipótese 4.2. Além disso, a Eq. (4.48) é válida para qualquer campo $\delta \bar{\theta}$, uma vez que não faria sentido manter a restrição $\delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0$ em $\bar{\mathcal{B}}_t$. De fato, observe que, conforme a definição de $\bar{\mathcal{H}}_0$, dada na Eq. (4.32), a restrição aplica-se somente à fronteira essencial de $\bar{\mathcal{B}}_t$. Com relação à motivação para a Proposição 4.1, observe que a Eq. (4.47) se reduz à Eq. (4.48) quando toda a fronteira do corpo é essencial. Por outro lado, ao prescrever-se $\hat{q} = 0$ na fronteira natural, não espera-se que \bar{q} seja diferente de zero e, portanto, assume-se que a Eq. (4.48) seja satisfeita. Por essas razões, propõe-se que as Eqs. (4.48) e (4.49) sejam válidas em um caso geral.

A Eq. (4.48) será utilizada para revelar as quantidades volumétricas, bem como as condições de contorno e a forma variacional do problema do EVR. A Eq. (4.49), por sua vez, será utilizada para revelar as quantidades superficiais homogeneizadas. A Eq. (4.48) serve de base para a seguinte proposição, que funciona como um princípio que faz a ponte entre as escalas:

PROPOSIÇÃO 4.2: *A versão estendida do princípio de Hill-Mandel para o problema de condução de calor transiente com geração de calor assume a seguinte forma:*

$$\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \delta \bar{\mathbf{g}} + \bar{i} \delta \bar{\theta} = \langle \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{g} + r \delta \theta - \dot{\phi} \delta \theta \rangle_{\square}, \quad \forall \delta \bar{\theta}; \forall \delta \theta \sim \in \mathcal{H}_0^\sim, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.50)$$

Conforme será mostrado no decorrer deste trabalho, a importância da Eq. (4.50) reside no fato de que ela engloba as condições de contorno e a forma variacional do problema do EVR, e também as relações de homogeneização para as variáveis volumétricas presentes na descrição macroscópica. Embora baseada em Larsson *et al.*, 2010, a derivação feita aqui é diferente. Em especial, as Proposições 4.1 e 4.2 são proposições originais deste

trabalho.

OBSERVAÇÃO 4.2: A Eq. (4.50) é análoga à Eq. (29) apresentada no trabalho de de Souza Neto *et al.*, 2015, no contexto mecânico, que na notação do presente trabalho pode ser escrita como

$$\bar{\mathbf{T}}_r : \delta \bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{f}}_r \delta \bar{\mathbf{u}} = \langle \mathbf{T}_r : \delta \mathbf{F} - \mathbf{b}_r \cdot \delta \mathbf{u} + \rho_r \ddot{\mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} \rangle_{\square}, \quad \forall \delta \bar{\mathbf{u}}; \forall \delta \mathbf{u} \in \mathcal{H}_0^*, \quad (4.51)$$

em que \mathcal{H}_0^* é um espaço definido de forma que os postulados $\bar{\mathbf{u}} = \langle \mathbf{u} \rangle_{\square}$ e $\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\square}$ assumidos pelos autores sejam respeitados. É interessante observar que no referido trabalho essa equação é assumida sem uma justificativa aparente, ao contrário do realizado nesta tese para a Eq. (4.50). A estratégia utilizada na obtenção da Eq. (4.50), bem como sua analogia direta com a Eq. (4.51), sugerem uma abordagem geral para a consideração de efeitos inerciais que surgem da microescala.

OBSERVAÇÃO 4.3: Larsson *et al.*, 2010, também obtêm uma equação que identificam como uma generalização do princípio de Hill-Mandel, porém em uma forma menos clara que a expressa pela Eq. (4.50).

Dada a Proposição 4.2, serão agora identificadas as condições de contorno e a forma variacional do problema do EVR, bem como a natureza de $\bar{\mathbf{q}}^*$ e \bar{t} . No que segue, isso é realizado utilizando um procedimento que é similar ao proposto por de Souza Neto *et al.*, 2015. Inicia-se empregando a expressão para θ na microescala, dada pelas Eqs. (4.22) e (4.24):

$$\theta(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}) = \bar{\theta}(\bar{\mathbf{x}}, t) + \bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}, t) \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \theta^\sim(\mathbf{x}, t; \bar{\mathbf{x}}), \quad (4.52)$$

de onde segue que

$$\mathbf{g} = \bar{\mathbf{g}} + \text{grad} \theta^\sim. \quad (4.53)$$

Então, as variações de θ e \mathbf{g} são dadas, respectivamente, por

$$\delta \theta = \delta \bar{\theta} + \delta \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \delta \theta^\sim \quad (4.54)$$

e

$$\delta \mathbf{g} = \delta \bar{\mathbf{g}} + \text{grad} \delta \theta^\sim. \quad (4.55)$$

Substituindo as duas últimas equações na Eq. (4.50), a versão estendida do princípio de Hill-Mandel assume a seguinte forma:

$$\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \delta \bar{\mathbf{g}} + \bar{t} \delta \bar{\theta} = \left\langle \mathbf{q} \cdot (\delta \bar{\mathbf{g}} + \text{grad} \delta \theta^\sim) + (r - \dot{\phi}) \left[\delta \bar{\theta} + \delta \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \delta \theta^\sim \right] \right\rangle_{\square}, \quad \forall \delta \bar{\theta}; \forall \delta \theta^\sim \in \mathcal{H}_0^\sim, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.56)$$

Considerando que a Eq. (4.56) deve ser satisfeita para qualquer $\delta \bar{\theta}$, faz-se $\delta \bar{\theta} = 0$

(e, conseqüentemente, $\delta\bar{\mathbf{g}} = \overline{\text{grad}}\delta\bar{\theta} = \mathbf{0}$) para obter

$$\left\langle \mathbf{q} \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} + (r - \dot{\phi}) \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} = 0, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.57)$$

Essa equação representa a forma variacional do problema associado ao EVR. Equivalentemente, a Eq. (4.57) pode ser reescrita como

$$\frac{1}{|\square(\bar{\mathbf{x}})|} \int_{\partial\square} \delta\theta^{\sim} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da = 0, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \quad (4.58)$$

onde a equação diferencial na microescala, Eq. (4.36), foi utilizada. Neste trabalho emprega-se a Eq. (4.58) para definir-se as condições de contorno do problema associado ao EVR.

As seguintes condições satisfazem a Eq. (4.58):

1. Condição de flutuação nula de temperatura na microescala:

$$\theta^{\sim} = 0, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \square \cup \partial\square. \quad (4.59)$$

Portanto, $\delta\theta^{\sim} = 0 \, \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \square \cup \partial\square$.

2. Condição de contorno de temperatura linear:

$$\theta^{\sim} = 0, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial\square. \quad (4.60)$$

Portanto, $\delta\theta^{\sim} = 0 \, \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial\square$. De maneira alternativa, essa condição pode ser enunciada como

$$\theta = \bar{\theta} + \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}), \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial\square. \quad (4.61)$$

3. Condições de contorno periódicas:

$$q_n^+ = -q_n^-, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial\square, \quad (4.62)$$

$$\theta^+ = \theta^- + \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-), \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial\square. \quad (4.63)$$

onde os índices + e - indicam pontos homólogos. Denotando faces homólogas por \square^+ e \square^- , a Eq. (4.58) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \int_{\partial\square} q_n \delta\theta^{\sim} \, da &= \int_{\partial\square^+} q_n^+ \delta\theta^{\sim^+} \, da + \int_{\partial\square^-} q_n^- \delta\theta^{\sim^-} \, da \\ &= \int_{\partial\square^+} (q_n^+ \delta\theta^{\sim^+} + q_n^- \delta\theta^{\sim^-}) \, da \\ &= \int_{\partial\square^+} q_n^+ (\delta\theta^{\sim^+} - \delta\theta^{\sim^-}) \, da, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Da Eq. (4.54), pode-se escrever

$$\delta\theta^\sim = \delta\theta - \delta\bar{\theta} - \delta\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \quad (4.65)$$

e, então,

$$\delta\theta^{\sim+} = \delta\theta^+ - \delta\bar{\theta} - \delta\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x}^+ - \bar{\mathbf{x}}), \quad (4.66)$$

$$\delta\theta^{\sim-} = \delta\theta^- - \delta\bar{\theta} - \delta\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x}^- - \bar{\mathbf{x}}). \quad (4.67)$$

Subtraindo a Eq. (4.67) da Eq. (4.66), tem-se

$$\delta\theta^{\sim+} - \delta\theta^{\sim-} = \delta\theta^+ - \delta\theta^- - \delta\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-), \quad (4.68)$$

e da Eq. (4.63) segue que

$$\delta\theta^+ - \delta\theta^- - \delta\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) = 0. \quad (4.69)$$

Logo, das Eqs. (4.68) e (4.69), obtém-se

$$\delta\theta^{\sim+} - \delta\theta^{\sim-} = 0, \quad (4.70)$$

que, utilizada na Eq. (4.64), faz com que a Eq. (4.58) seja satisfeita.

4. Condição de contorno de fluxo de calor uniforme (com $\bar{\mathbf{g}} = \langle \mathbf{g} \rangle_{\square}$):¹⁶

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{q}}^* \cdot \mathbf{n}, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial \square. \quad (4.71)$$

Neste caso, a Eq. (4.58) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \int_{\partial \square} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \delta\theta^\sim da &= \int_{\partial \square} \bar{\mathbf{q}}^* \cdot \mathbf{n} \delta\theta^\sim da \\ &= \bar{\mathbf{q}}^* \cdot \int_{\partial \square} \mathbf{n} \delta\theta^\sim da \\ &= \bar{\mathbf{q}}^* \cdot \int_{\square} \text{grad} \delta\theta^\sim dv, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \end{aligned}$$

Da Eq. (4.55), tem-se

$$\delta \langle \mathbf{g} \rangle_{\square} = \delta \langle \bar{\mathbf{g}} \rangle_{\square} + \langle \text{grad} \delta\theta^\sim \rangle_{\square}. \quad (4.72)$$

Se a hipótese $\bar{\mathbf{g}} = \langle \mathbf{g} \rangle_{\square}$ é utilizada, então $\langle \text{grad} \delta\theta^\sim \rangle_{\square} = 0$, satisfazendo a Eq. (4.58).

Neste trabalho será utilizada a condição de contorno de temperatura linear, dada pela Eq. (4.61). Uma consequência dessa condição de contorno é a relação $\bar{\mathbf{g}} = \langle \mathbf{g} \rangle_{\square}$, usualmente *assumida* nos modelos multiescala.

Em vista dos resultados anteriores, agora é possível definir o conjunto \mathcal{H}^\sim e o

¹⁶ $\bar{\mathbf{q}}^*$ será definido mais adiante.

espaço \mathcal{H}_0^\sim como

$$\mathcal{H}^\sim := \left\{ \theta^\sim \in \mathcal{H}^1(\square \times \mathcal{I}) : \theta^\sim = 0 \text{ em } \partial \square \times \mathcal{I} \right\} \quad (4.73)$$

e

$$\mathcal{H}_0^\sim := \{ v^\sim : v^\sim = \theta_a^\sim - \theta_b^\sim; \theta_a^\sim, \theta_b^\sim \in \mathcal{H}^\sim \}. \quad (4.74)$$

Então,

$$\mathcal{H}_0^\sim = \mathcal{H}^\sim. \quad (4.75)$$

OBSERVAÇÃO 4.4: A Eq. (4.57) é análoga à Eq. (32) apresentada por de Souza Neto *et al.*, 2015, no contexto mecânico, que na notação do presente trabalho pode ser escrita como¹⁷

$$\int_{\square} [\mathbf{T}_r : \nabla \delta \mathbf{u}^\sim - (\mathbf{b}_r - \rho_r \ddot{\mathbf{u}}) \cdot \delta \mathbf{u}^\sim] dv = 0, \quad \forall \delta \mathbf{u}^\sim \in \mathcal{H}_0^{\sim*}, \quad (4.76)$$

onde $\mathcal{H}_0^{\sim*}$ é o espaço das variações admissíveis das flutuações dos deslocamentos microscópicos. Os autores, no entanto, ainda simplificam o problema ao considerar postulados anteriores, isto é, $\bar{\mathbf{u}} = \langle \mathbf{u} \rangle_{\square}$ e $\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\square}$.

OBSERVAÇÃO 4.5: É importante mencionar que no trabalho de de Souza Neto *et al.*, 2015, as condições de contorno para o problema do EVR são derivadas previamente a partir dos postulados $\bar{\mathbf{u}} = \langle \mathbf{u} \rangle_{\square}$ e $\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle_{\square}$, enquanto nesta tese as condições de contorno surgem naturalmente a partir da formulação multiescala, de maneira semelhante ao realizado por Larsson *et al.*, 2010.

OBSERVAÇÃO 4.6: No trabalho de Larsson *et al.*, 2010, o cancelamento do primeiro dos termos

$$- \int_{\mathcal{I}} \left\langle \mathbf{q} \cdot \text{grad} \delta \theta^\sim + (r - \dot{\phi}) \delta \theta^\sim \right\rangle_{\square} dt + \langle [\phi(\theta|_{t=0+}) - \phi_0] \delta \theta^\sim |_{t=0+} \rangle_{\square}, \quad (4.77)$$

que aparecem na primeira linha da Eq. (27) do referido trabalho (sendo ϕ_0 a densidade de energia interna inicial), define o problema do EVR. Exceto pela presença do termo

$$\langle [\phi(\theta|_{t=0+}) - \phi_0] \delta \theta^\sim |_{t=0+} \rangle_{\square},$$

e da integração no tempo do outro termo, que decorrem da inclusão da condição inicial nos enunciados variacionais, o termo apresentado é idêntico ao que aparece no lado esquerdo da Eq. (4.57)¹⁸. Além disso, o cancelamento do primeiro dos termos

$$- \int_{\mathcal{I}} \left(\frac{1}{|\square(\bar{\mathbf{x}})|} \int_{\partial \square} \delta \theta^\sim \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} d\bar{a} \right) dt + \langle [\phi(\theta|_{t=0+}) - \phi_0] \delta \theta^\sim |_{t=0+} \rangle_{\square}, \quad (4.78)$$

que aparecem na segunda linha da Eq. (27) do trabalho mencionado, serve para definir as condições de contorno do problema do EVR. As semelhanças com a Eq. (4.58) são evidentes.

¹⁷O EVR \square , no referido trabalho, está definido na configuração de referência.

¹⁸Porém, como pode-se observar, com o sinal trocado.

Agora, para revelar a natureza de $\bar{\mathbf{q}}^*$ e $\bar{\iota}$, toma-se $\delta\theta^{\sim} = 0$ na Eq. (4.56), isto é,

$$\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \delta\bar{\mathbf{g}} + \bar{\iota}\delta\bar{\theta} = \left\langle \mathbf{q} \cdot \delta\bar{\mathbf{g}} + (r - \dot{\phi}) \delta\bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + (r - \dot{\phi}) \delta\bar{\theta} \right\rangle_{\square}, \quad \forall \delta\bar{\theta}; \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.79)$$

DEFINIÇÃO 4.14: Define-se as seguintes médias na microescala:

$$\bar{\mathbf{q}} := \langle \mathbf{q} \rangle_{\square}, \quad (4.80)$$

$$\bar{\phi} := \langle \phi \rangle_{\square}, \quad (4.81)$$

$$\bar{\boldsymbol{\phi}} := \langle \phi(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}, \quad (4.82)$$

$$\bar{r} := \langle r \rangle_{\square}, \quad (4.83)$$

$$\bar{\mathbf{r}} := \langle r(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}. \quad (4.84)$$

Dada a definição anterior, a Eq. (4.79) pode ser reescrita como

$$\bar{\mathbf{q}}^* \cdot \delta\bar{\mathbf{g}} + \bar{\iota}\delta\bar{\theta} = \left(\bar{\mathbf{q}} + \bar{\mathbf{r}} - \dot{\bar{\boldsymbol{\phi}}} \right) \cdot \delta\bar{\mathbf{g}} + \left(\bar{r} - \dot{\bar{\phi}} \right) \delta\bar{\theta}, \quad \forall \delta\bar{\theta}; \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (4.85)$$

Considerando a arbitrariedade de $\delta\bar{\theta}$ (e $\delta\bar{\mathbf{g}}$), tem-se

$$\bar{\mathbf{q}}^* = \bar{\mathbf{q}} + \bar{\mathbf{r}} - \dot{\bar{\boldsymbol{\phi}}}, \quad (4.86)$$

$$\bar{\iota} = \bar{r} - \dot{\bar{\phi}}. \quad (4.87)$$

Logo, a natureza matemática do fluxo de calor macroscópico não-usual $\bar{\mathbf{q}}^*$ e da grandeza escalar $\bar{\iota}$ foram reveladas. Pode-se escrever também

$$\bar{\mathbf{q}}^* = \left\langle \mathbf{q} + (r - \dot{\phi})(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \right\rangle_{\square}, \quad (4.88)$$

$$\bar{\iota} = \left\langle r - \dot{\phi} \right\rangle_{\square}. \quad (4.89)$$

A Eq. (4.43) pode então ser reescrita como

$$\int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \left[\left(\bar{\mathbf{q}} + \bar{\mathbf{r}} - \dot{\bar{\boldsymbol{\phi}}} \right) \cdot \delta\bar{\mathbf{g}} + \left(\bar{r} - \dot{\bar{\phi}} \right) \delta\bar{\theta} \right] d\bar{v} - \int_{\partial\bar{\mathcal{B}}_t^q} \bar{q}\delta\bar{\theta} d\bar{a} = 0, \quad \forall \delta\bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}, \quad (4.90)$$

e representa a forma variacional do problema macroscópico.

OBSERVAÇÃO 4.7: A Eq. (4.88) é análoga à Eq. (31) do trabalho de de Souza Neto *et al.*, 2015, que na notação do presente trabalho é escrita como

$$\bar{\mathbf{T}}_r = \left\langle \mathbf{T}_r - (\mathbf{b}_r - \rho_r \ddot{\mathbf{u}}) \otimes (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}) \right\rangle_{\square}. \quad (4.91)$$

Já a Eq. (4.89) é análoga à Eq. (33) do referido trabalho, a qual na notação desta tese é escrita como

$$\bar{\mathbf{f}}_r = \langle \mathbf{b}_r - \rho_r \ddot{\mathbf{u}} \rangle_{\square}. \quad (4.92)$$

A comparação com o trabalho de Larsson *et al.*, 2010, é mais clara por meio da equação

diferencial, conforme apresentado mais adiante.

Substituindo as Eqs. (4.86) e (4.87) nas Eqs. (4.44) e (4.45), identifica-se a equação diferencial macroscópica como

$$-\overline{\text{div}} \left(\overline{\mathbf{q}} + \overline{\mathbf{r}} - \dot{\overline{\boldsymbol{\phi}}} \right) + \overline{r} - \dot{\overline{\phi}} = 0 \quad \text{em } \overline{\mathcal{B}}_t \times \mathcal{I}, \quad (4.93)$$

e a condição de contorno natural macroscópica como

$$\left(\overline{\mathbf{q}} + \overline{\mathbf{r}} - \dot{\overline{\boldsymbol{\phi}}} \right) \cdot \overline{\mathbf{n}} = \overline{q} \quad \text{em } \partial \overline{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (4.94)$$

OBSERVAÇÃO 4.8: Agora deseja-se comparar as Eqs. (4.93) e (4.94) com as Eqs. (36) e (37) apresentadas por Larsson *et al.*, 2010, as quais, após um pequeno rearranjo e na notação do presente trabalho, são escritas como

$$-\overline{\text{div}} \left(\overline{\mathbf{q}} - \dot{\overline{\boldsymbol{\phi}}} \right) + \overline{r} - \dot{\overline{\phi}} = 0 \quad \text{em } \overline{\mathcal{B}}_t \times \mathcal{I}, \quad (4.95)$$

$$\left(\overline{\mathbf{q}} - \dot{\overline{\boldsymbol{\phi}}} \right) \cdot \overline{\mathbf{n}} = \overline{q} \quad \text{em } \partial \overline{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (4.96)$$

As equações são idênticas, exceto pela ausência do termo $\overline{\mathbf{r}}$ no trabalho de Larsson *et al.*, 2010. No entanto, tal ausência é uma consequência da hipótese de geração de calor homogênea na microescala do referido trabalho. Ao considerar que a geração de calor é homogênea na microescala, o termo $\overline{\mathbf{r}}$ vai a zero e as equações apresentadas no trabalho de Larsson *et al.*, 2010, são obtidas. Além disso, como uma consequência da inclusão da condição inicial na formulação variacional, Larsson *et al.*, 2010, também obtêm uma condição inicial homogeneizada.

Como pode-se observar na Eq. (4.93), a descrição macroscópica homogeneizada depende não somente do divergente da média do fluxo de calor na microescala ($\overline{\mathbf{q}}$), mas também do divergente da distribuição das taxas de energia interna e geração de calor volumétricas ao longo do EVR finito, dadas por suas integrais ponderadas pela posição ($\text{d}_t \langle \phi(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \rangle_{\square} = \langle \dot{\phi}(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}$ e $\langle r(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}$). Essas duas últimas equações são as contribuições da inércia térmica que surgem de uma descrição finita da microescala. A Eq. (4.88) também pode ser escrita como

$$\overline{\mathbf{q}}^* = \langle \mathbf{q} \rangle_{\square} + \langle (\text{div } \mathbf{q})(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}, \quad (4.97)$$

utilizando-se a Eq. (4.36).

O termo $\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}$ pode ser visto como uma influência da escala. Quando $|\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}| \rightarrow 0$, os efeitos de inércia térmica desaparecem, conforme mostrado no Apêndice B.

Na descrição macroscópica, a energia interna também depende do gradiente de temperatura, uma dependência que viola os postulados da termodinâmica irreversível clássica, conforme pode-se observar a partir do item (a) na pág. 12. Tal dependência

pode ser vista ao escrever-se

$$\dot{\phi} = d_t \langle \phi \rangle_{\square} = \langle \dot{\phi} \rangle_{\square} = \langle \rho c \dot{\theta} \rangle_{\square} = \left\langle \rho c \frac{d}{dt} [\bar{\theta} + \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \theta^{\sim}] \right\rangle_{\square}, \quad (4.98)$$

onde c é o calor específico do material. De fato, a descrição macroscópica se encaixa em uma abordagem termodinâmica não-local, na qual permite-se que a energia interna dependa do gradiente de temperatura. Veja, por exemplo, Nguyen e Andrieux, 2005, e Giusti e Blanco, 2012.

Agora volta-se a atenção para a identificação dos termos de fronteira na Eq. (4.49).

PROPOSIÇÃO 4.3: *Da Eq. (4.49), escreve-se*

$$\bar{q} \delta \bar{\theta} = \langle \hat{q} \delta \theta \rangle_{\gamma}, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q. \quad (4.99)$$

Usando a Eq. (4.54), a Eq. (4.99) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \bar{q} \delta \bar{\theta} &= \left\langle \hat{q} \left[\delta \bar{\theta} + \delta \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \delta \theta^{\sim} \right] \right\rangle_{\gamma} \\ &= \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} \delta \bar{\theta} + \langle \hat{q} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} \cdot \overline{\text{grad}} \delta \bar{\theta}, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q, \end{aligned} \quad (4.100)$$

onde fez-se uso da Hipótese 4.2 ($\theta^{\sim} = 0$ em cada ESR) para obter-se $\delta \theta^{\sim} = 0$. É conveniente rearranjar a Eq. (4.100) como

$$\left(\bar{q} - \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} \right) \delta \bar{\theta} = \langle \hat{q} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} \cdot \overline{\text{grad}} \delta \bar{\theta}, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q. \quad (4.101)$$

Assume-se que $\bar{q} - \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} \neq 0$ em algum ponto arbitrário $\bar{\mathbf{x}}^* \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q$. Então escolhe-se uma variação $\delta \bar{\theta}$ que em $\bar{\mathbf{x}}^*$ é *não-nula* e tem um gradiente (macroscópico) *nulo*. Essa variação está no espaço $\bar{\mathcal{H}}_0$. Se é substituída na Eq. (4.101), tem-se

$$\underbrace{\left(\bar{q} - \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} \right)}_{\neq 0} \underbrace{\delta \bar{\theta}}_{=0} = 0, \quad \forall t \in \mathcal{I}. \quad (4.102)$$

Isso é claramente uma contradição. Portanto, $\bar{q} - \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} = 0$ em $\bar{\mathbf{x}}^*$. No entanto, como $\bar{\mathbf{x}}^*$ foi escolhido de forma arbitrária, tem-se

$$\bar{q} - \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} = 0, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q, \quad (4.103)$$

ou

$$\bar{q} = \langle \hat{q} \rangle_{\gamma} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (4.104)$$

Esse resultado indica qual é a expressão para o fluxo de calor macroscópico prescrito e é o primeiro dos dois resultados a serem obtidos com a Eq. (4.101). Agora, utilizando a Eq. (4.104) na Eq. (4.101), encontra-se

$$\langle \hat{q} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} \cdot \overline{\text{grad}} \delta \bar{\theta} = 0, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q. \quad (4.105)$$

Assume-se então que $\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} \neq \mathbf{0}$ para algum ponto arbitrário $\bar{\mathbf{x}}^* \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q$. Então escolhe-se uma variação $\delta \bar{\theta}$ cujo gradiente em $\bar{\mathbf{x}}^*$ é não-nulo e não-ortogonal a $\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma}$. Essa variação está no espaço $\bar{\mathcal{H}}_0$, e se é substituída na Eq. (4.105), tem-se

$$\underbrace{\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma}}_{\neq \mathbf{0}} \cdot \underbrace{\overline{\text{grad} \delta \bar{\theta}}}_{\neq \mathbf{0}} = 0, \quad \forall t \in \mathcal{I}. \quad (4.106)$$

Essa é uma contradição, uma vez que $\overline{\text{grad} \delta \bar{\theta}}$ é não-ortogonal a $\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma}$. Portanto, $\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} = \mathbf{0}$ para $\bar{\mathbf{x}}^*$. Porém, como $\bar{\mathbf{x}}^*$ foi escolhido de forma arbitrária, tem-se

$$\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} = \mathbf{0}, \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q, \quad (4.107)$$

ou

$$\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} = \mathbf{0} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (4.108)$$

Esse resultado indica quais formas funcionais de \hat{q} são passíveis de homogeneização de acordo com esse modelo multiescala.

OBSERVAÇÃO 4.9: As Eqs. (4.104) e (4.108) são iguais às apresentadas por Larsson *et al.*, 2010; essas equações não são numeradas, mas podem ser encontradas na pg. 1665, no texto após a Eq. (21).

A descrição macroscópica para um EVR infinitesimal está apresentada no Apêndice B.

4.6 Resumo do modelo multiescala

Nesta seção será feito um pequeno resumo do modelo multiescala desenvolvido.

- Enunciado variacional do problema microscópico: Encontre $\theta^{\sim} \in \mathcal{H}^{\sim}$ tal que

$$\left\langle \mathbf{q} \cdot \text{grad} \delta \theta^{\sim} + (r - \phi) \delta \theta^{\sim} \right\rangle_{\square} = 0, \quad \forall \delta \theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (\text{Eq. (4.57)})$$

- Condição por meio da qual as condições de contorno do problema microscópico podem ser determinadas:

$$\frac{1}{|\square(\bar{\mathbf{x}})|} \int_{\partial \square} \delta \theta^{\sim} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da = 0, \quad \forall \delta \theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}, t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t. \quad (\text{Eq. (4.58)})$$

- Condição de contorno do problema microscópico utilizada neste trabalho:

$$\theta = \bar{\theta} + \bar{\mathbf{g}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}), \quad \forall t \in \mathcal{I}, \bar{\mathbf{x}} \in \bar{\mathcal{B}}_t, \mathbf{x} \in \partial \square. \quad (\text{Eq. (4.61)})$$

- Quantidades macroscópicas:

$$\bar{\mathbf{q}} := \langle \mathbf{q} \rangle_{\square}, \quad (\text{Eq. (4.80)})$$

$$\bar{\phi} := \langle \phi \rangle_{\square}, \quad (\text{Eq. (4.81)})$$

$$\bar{\boldsymbol{\phi}} := \langle \phi(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}, \quad (\text{Eq. (4.82)})$$

$$\bar{r} := \langle r \rangle_{\square}, \quad (\text{Eq. (4.83)})$$

$$\bar{\mathbf{r}} := \langle r(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\square}, \quad (\text{Eq. (4.84)})$$

$$\bar{q} = \langle \hat{q} \rangle_{\gamma}. \quad (\text{Eq. (4.104)})$$

- Enunciado variacional do problema homogeneizado (macroscópico): Encontre $\bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}$ de forma que

$$\int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \left[\left(\bar{\mathbf{q}} + \bar{\mathbf{r}} - \dot{\bar{\boldsymbol{\phi}}} \right) \cdot \delta \bar{\mathbf{g}} + \left(\bar{r} - \dot{\bar{\phi}} \right) \delta \bar{\theta} \right] d\bar{v} - \int_{\partial \bar{\mathcal{B}}_t^q} \bar{q} \delta \bar{\theta} d\bar{a} = 0, \quad \forall \delta \bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0, t \in \mathcal{I}. \quad (\text{Eq. 4.90})$$

- Forma forte do problema macroscópico:

– Equação diferencial:

$$-\overline{\text{div}} \left(\bar{\mathbf{q}} + \bar{\mathbf{r}} - \dot{\bar{\boldsymbol{\phi}}} \right) + \bar{r} - \dot{\bar{\phi}} = 0 \quad \text{em } \bar{\mathcal{B}}_t \times \mathcal{I}. \quad (\text{Eq. (4.93)})$$

– Condição de contorno natural:

$$\left(\bar{\mathbf{q}} + \bar{\mathbf{r}} - \dot{\bar{\boldsymbol{\phi}}} \right) \cdot \bar{\mathbf{n}} = \bar{q} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (\text{Eq. (4.94)})$$

– Condição de contorno essencial:

$$\bar{\theta} = \langle \hat{\theta} \rangle_{\gamma} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^{\theta} \times \mathcal{I}. \quad (\text{Eq. (4.46)})$$

- Fluxo prescrito passível de homogeneização:

$$\langle \hat{q}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\gamma} = \mathbf{0} \quad \text{em } \partial \bar{\mathcal{B}}_t^q \times \mathcal{I}. \quad (\text{Eq. (4.108)})$$

5 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO MULTIESCALA

O modelo multiescala que resultou das definições, hipóteses e proposições descritas no capítulo anterior é consistente com o apresentado em Larsson *et al.*, 2010, e, portanto, a estratégia de solução apresentada no referido trabalho pode ser, e de fato é, utilizada como base neste capítulo. Deve-se observar, no entanto, que a implementação descrita neste trabalho tem termos adicionais que decorrem da consideração de uma geração de calor *não-homogênea* na microescala.

DEFINIÇÃO 5.1: Define-se o intervalo de tempo

$$\mathcal{I}_n := (t_{n-1}, t_n), \quad (5.1)$$

em que t_n é o tempo correspondente ao passo de tempo n e t_{n-1} é o tempo correspondente ao passo de tempo $n - 1$.

A seguir, o subscrito n serve para indicar que uma grandeza deve ser avaliada em $t = t_n$.

DEFINIÇÃO 5.2: A derivada temporal de um campo φ no instante de tempo n é aproximada por meio do método de Euler-Galerkin implícito:

$$\dot{\varphi}_n \approx \left(\frac{\varphi_n - \varphi_{n-1}}{\Delta t} \right), \quad (5.2)$$

com $\Delta t := t_n - t_{n-1}$.

5.1 Solução do problema na microescala

Como a Eq. (4.57) deve ser verificada para qualquer intervalo de tempo \mathcal{I}_n , pode-se estabelecer o seguinte enunciado.

Enunciado 5.1 (Forma semi-discreta da microescala): Para cada intervalo de tempo \mathcal{I}_n , $n = 1, 2, \dots, N$, dado θ'_n , encontre $\theta_n^\sim \in \mathcal{H}^\sim$ tal que

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_\square(\theta'_n + \theta_n^\sim; \delta\theta^\sim) &:= \langle \delta\theta^\sim (\phi_n - \phi_{n-1}) \rangle_\square - \langle \delta\theta^\sim r_n \rangle_\square \Delta t - \langle \mathbf{q}_n \cdot \text{grad } \delta\theta^\sim \rangle_\square \Delta t \\ &= 0, \quad \forall \delta\theta^\sim \in \mathcal{H}_0^\sim. \end{aligned} \quad (5.3)$$

DEFINIÇÃO 5.3: Com o objetivo de simplificar a expressão para a variação de \mathcal{R}_\square , apresentada a seguir, define-se as seguintes notações compactas para derivadas:

$$\phi' := \frac{d\phi}{d\theta} \quad (\text{escalar}), \quad (5.4)$$

$$r' := \frac{dr}{d\theta} \quad (\text{escalar}), \quad (5.5)$$

$$\mathbf{Y} := \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \theta} \quad (\text{vetor}), \quad (5.6)$$

$$\mathbf{K} := -\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{g}} \quad (\text{tensor de segunda ordem}). \quad (5.7)$$

A variação de $\mathcal{R}_{\square}(\theta_n' + \theta_n^{\sim}; \delta\theta^{\sim})$ em θ_n fica expressa por

$$\begin{aligned} \mathcal{R}'_{\square}(\theta_n; \delta\theta^{\sim}, d\theta) = & \left\langle \delta\theta^{\sim} \frac{d\phi_n}{d\theta} d\theta \right\rangle_{\square} - \left\langle \delta\theta^{\sim} \frac{dr_n}{d\theta} d\theta \right\rangle_{\square} \Delta t - \left\langle \frac{\partial \mathbf{q}_n}{\partial \theta} d\theta \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t \\ & - \left\langle \left(\frac{\partial \mathbf{q}_n}{\partial (\text{grad} \theta)} \text{grad} d\theta \right) \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

ou então, utilizando a Definição 5.3,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}'_{\square}(\theta_n; \delta\theta^{\sim}, d\theta) = & \left\langle \delta\theta^{\sim} \phi_n' d\theta \right\rangle_{\square} - \left\langle \delta\theta^{\sim} r_n' d\theta \right\rangle_{\square} \Delta t - \langle \mathbf{Y}_n d\theta \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \rangle_{\square} \Delta t \\ & + \langle (\mathbf{K}_n \text{grad} d\theta) \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \rangle_{\square} \Delta t, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Seja uma determinada iteração k , com temperatura correspondente θ_n^k . A nova estimativa para a temperatura é dada por

$$\theta_n^{k+1} = \theta_n^k + d\theta, \quad (5.10)$$

em que a atualização $d\theta \in \mathcal{H}_0^{\sim}$ é obtida de

$$\mathcal{R}_{\square}(\theta_n^{k+1}; \delta\theta^{\sim}) = \mathcal{R}_{\square}(\theta_n^k; \delta\theta^{\sim}) + \mathcal{R}'_{\square}(\theta_n^k; \delta\theta^{\sim}, d\theta) = 0 \quad (5.11)$$

$$\therefore -\mathcal{R}'_{\square}(\theta_n^k; \delta\theta^{\sim}, d\theta) = \mathcal{R}_{\square}(\theta_n^k; \delta\theta^{\sim}), \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}. \quad (5.12)$$

A estimativa inicial pode ser assumida como

$$\theta_n^0 = \theta_n'. \quad (5.13)$$

Quando o resíduo $\mathcal{R}_{\square}(\theta_n^k; \delta\theta^{\sim})$ é suficientemente pequeno (dentro de uma tolerância pré-estabelecida), o processo iterativo é finalizado.

5.2 Solução do problema na macroescala

Para a solução do problema macroscópico, a integração no tempo é naturalmente escolhida de forma idêntica à microescala. Então, a Eq. (4.90) deve ser verificada para qualquer intervalo de tempo \mathcal{I}_n . O seguinte problema pode então ser enunciado.

Enunciado 5.2 (Forma semi-discreta da macroescala): Para cada intervalo de tempo \mathcal{I}_n , $n = 1, 2, \dots, N$, encontre $\bar{\theta}_n \in \bar{\mathcal{H}}$ tal que

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{R}}(\bar{\theta}_n; \delta\bar{\theta}) &:= \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \delta\bar{\theta} (\bar{\phi}_n - \bar{\phi}_{n-1}) \, d\bar{v} - \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \delta\bar{\theta} \bar{r}_n \, d\bar{v} \Delta t - \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \bar{\mathbf{q}}_n \cdot \overline{\text{grad}} \delta\bar{\theta} \, d\bar{v} \Delta t \\ &\quad + \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} (\bar{\Phi}_n - \bar{\Phi}_{n-1}) \cdot \overline{\text{grad}} \delta\bar{\theta} \, d\bar{v} - \int_{\bar{\mathcal{B}}_t} \bar{\mathbf{r}}_n \cdot \overline{\text{grad}} \delta\bar{\theta} \, d\bar{v} \Delta t \\ &\quad + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \int_{\partial \bar{\mathcal{B}}_t^q} \hat{q} \delta\bar{\theta} \, d\bar{a} \, dt = 0, \quad \forall \delta\bar{\theta} \in \bar{\mathcal{H}}_0. \end{aligned} \quad (5.14)$$

DEFINIÇÃO 5.4: Define-se os seguintes operadores tangentes para simplificar a notação na seqüência do trabalho:

$$\bar{\mathbf{B}} := \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{\mathbf{g}}} \quad (\text{vetor}), \quad (5.15)$$

$$\bar{C} := \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{\theta}} \quad (\text{escalar}), \quad (5.16)$$

$$\hat{\bar{\mathbf{B}}} := \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \bar{\mathbf{g}}} \quad (\text{tensor de segunda ordem}), \quad (5.17)$$

$$\hat{\bar{C}} := \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \bar{\theta}} \quad (\text{vetor}), \quad (5.18)$$

$$\bar{\mathbf{D}} := \frac{\partial \bar{r}}{\partial \bar{\mathbf{g}}} \quad (\text{vetor}), \quad (5.19)$$

$$\bar{E} := \frac{\partial \bar{r}}{\partial \bar{\theta}} \quad (\text{escalar}), \quad (5.20)$$

$$\hat{\bar{\mathbf{D}}} := \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial \bar{\mathbf{g}}} \quad (\text{tensor de segunda ordem}), \quad (5.21)$$

$$\hat{\bar{\mathbf{E}}} := \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial \bar{\theta}} \quad (\text{vetor}), \quad (5.22)$$

$$\bar{\mathbf{Y}} := \frac{\partial \bar{\mathbf{q}}}{\partial \bar{\theta}} \quad (\text{vetor}), \quad (5.23)$$

$$\bar{\mathbf{K}} := -\frac{\partial \bar{\mathbf{q}}}{\partial \bar{\mathbf{g}}} \quad (\text{tensor de segunda ordem}). \quad (5.24)$$

Considerando a Definição 5.4, pode-se escrever

$$d\bar{\phi} = \bar{C} d\bar{\theta} + \bar{\mathbf{B}} \cdot d\bar{\mathbf{g}}, \quad (5.25)$$

$$d\bar{\Phi} = \hat{\bar{C}} d\bar{\theta} + \hat{\bar{\mathbf{B}}} d\bar{\mathbf{g}}, \quad (5.26)$$

$$d\bar{r} = \bar{E} d\bar{\theta} + \bar{\mathbf{D}} \cdot d\bar{\mathbf{g}}, \quad (5.27)$$

$$d\bar{\mathbf{r}} = \hat{\bar{\mathbf{E}}} d\bar{\theta} + \hat{\bar{\mathbf{D}}} d\bar{\mathbf{g}}, \quad (5.28)$$

$$d\bar{\mathbf{q}} = \bar{\mathbf{Y}} d\bar{\theta} - \bar{\mathbf{K}} d\bar{\mathbf{g}}. \quad (5.29)$$

Utilizando a Definição 5.4 e agrupando termos, a variação de $\bar{\mathcal{R}}(\bar{\theta}_n; \delta\bar{\theta})$ fica expressa por

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{R}}'(\overline{\theta}_n; \delta\overline{\theta}, d\overline{\theta}) &= \int_{\overline{\mathcal{B}}_t} \delta\overline{\theta} (\overline{C}_n - \overline{E}_n \Delta t) d\overline{\theta} d\overline{v} + \int_{\overline{\mathcal{B}}_t} \delta\overline{\theta} (\overline{\mathbf{B}}_n - \overline{\mathbf{D}}_n \Delta t) \cdot \overline{\mathbf{grad}} d\overline{\theta} d\overline{v} \\
&\quad - \int_{\overline{\mathcal{B}}_t} \overline{\mathbf{grad}} \delta\overline{\theta} \cdot (\overline{\mathbf{Y}}_n \Delta t - \widehat{\mathbf{C}}_n + \widehat{\mathbf{E}}_n \Delta t) d\overline{\theta} d\overline{v} \\
&\quad + \int_{\overline{\mathcal{B}}_t} \overline{\mathbf{grad}} \delta\overline{\theta} \cdot \left[(\overline{\mathbf{K}}_n \Delta t + \widehat{\mathbf{B}}_n - \widehat{\mathbf{D}}_n \Delta t) \overline{\mathbf{grad}} d\overline{\theta} \right] d\overline{v}, \quad \forall \delta\overline{\theta} \in \overline{\mathcal{H}}_0. \quad (5.30)
\end{aligned}$$

Seja uma determinada iteração K , com temperatura correspondente $\overline{\theta}_n^K$. O novo valor para a temperatura é dado por

$$\overline{\theta}_n^{K+1} = \overline{\theta}_n^K + d\overline{\theta}, \quad (5.31)$$

em que a atualização $d\overline{\theta} \in \overline{\mathcal{H}}_0$ é obtida de

$$\overline{\mathcal{R}}(\overline{\theta}_n^{K+1}; \delta\overline{\theta}) = \overline{\mathcal{R}}(\overline{\theta}_n^K; \delta\overline{\theta}) + \overline{\mathcal{R}}'(\overline{\theta}_n^K; \delta\overline{\theta}, d\overline{\theta}) = 0 \quad (5.32)$$

$$\therefore -\overline{\mathcal{R}}'(\overline{\theta}_n^K; \delta\overline{\theta}, d\overline{\theta}) = \overline{\mathcal{R}}(\overline{\theta}_n^K; \delta\overline{\theta}), \quad \forall \delta\overline{\theta} \in \overline{\mathcal{H}}_0. \quad (5.33)$$

Quando o resíduo $\overline{\mathcal{R}}(\overline{\theta}_n^K; \delta\overline{\theta})$ é suficientemente pequeno (dentro de uma tolerância pré-estabelecida), o processo iterativo é finalizado. Para a determinação da variação do resíduo macroscópico, $\overline{\mathcal{R}}'(\overline{\theta}_n^K; \delta\overline{\theta}, d\overline{\theta})$, é necessário determinar os operadores tangentes, o que será feito na seção seguinte.

5.3 Cálculo dos operadores tangentes

O objetivo desta seção consiste em determinar os operadores tangentes da Definição 5.4. Para tal, é preciso determinar como varia a temperatura θ na microescala (ou seja, em um determinado EVR) conforme variam $\overline{\theta}$ e $\overline{\mathbf{g}}$. Por isso, $\overline{\theta}$ e $\overline{\mathbf{g}}$ são, nesse contexto, independentes:

$$\theta = \theta(\overline{\theta}, \overline{\mathbf{g}}), \quad (5.34)$$

de forma que

$$d\theta = \frac{\partial \theta}{\partial \overline{\theta}} d\overline{\theta} + \frac{\partial \theta}{\partial \overline{\mathbf{g}}} \cdot d\overline{\mathbf{g}}. \quad (5.35)$$

Inicialmente, deve-se expressar o diferencial $d\theta = d\theta' + d\theta^\sim$ em termos de $d\overline{\theta}$ e $d\overline{\mathbf{g}}$. O diferencial de θ' pode ser escrito como

$$d\theta' = d\overline{\theta} + (\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \cdot d\overline{\mathbf{g}}. \quad (5.36)$$

DEFINIÇÃO 5.5: Define-se as sensibilidades $\hat{\theta}_{\overline{\theta}}^\sim$ e $\hat{\theta}_{\overline{\mathbf{g}}}^\sim(i)$ como

$$\hat{\theta}_{\overline{\theta}}^\sim := \frac{\partial \theta^\sim}{\partial \overline{\theta}}, \quad (5.37)$$

$$\hat{\theta}_{\overline{\mathbf{g}}}^\sim(i) := \frac{\partial \theta^\sim}{\partial \overline{g}_i}. \quad (5.38)$$

De acordo com a Definição 5.5, pode-se escrever

$$d\theta^\sim = \hat{\theta}^\sim d\bar{\theta} + \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(i)} d\bar{g}_i. \quad (5.39)$$

e, então, utilizando a Eq. (5.36),

$$d\theta = d\theta' + d\theta^\sim = \left(1 + \hat{\theta}^\sim\right) d\bar{\theta} + \left(x_i - \bar{x}_i + \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(i)}\right) d\bar{g}_i. \quad (5.40)$$

Agora que $d\theta$ está expressa em termos de $d\bar{\theta}$ e $d\bar{\mathbf{g}}$, pode-se obter os operadores tangentes listados na Definição 5.4 (pág. 42). Esses operadores serão escritos como função das sensibilidades apresentadas na Definição 5.5. Na próxima seção, as expressões para a determinação de tais sensibilidades serão obtidas.

Primeiramente, serão determinadas as expressões para $\bar{\mathbf{Y}}$ e $\bar{\mathbf{K}}$, e os demais operadores serão determinados fazendo uso da mesma estratégia. Observa-se que

$$d\bar{q}_i = d\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{e}_i = d(\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{e}_i) = d\left(\langle \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_i \rangle_{\square}\right) = \langle \mathbf{Y} d\theta \cdot \mathbf{e}_i \rangle_{\square} - \langle (\mathbf{K} \text{grad } d\theta) \cdot \mathbf{e}_i \rangle_{\square}. \quad (5.41)$$

Substituindo a expressão para $d\theta$, Eq. (5.40), tem-se, após alguma manipulação algébrica,

$$\begin{aligned} d\bar{q}_i &= \left[\langle [\mathbf{Y}]_i \rangle_{\square} + \langle [\mathbf{Y}]_i \hat{\theta}^\sim \rangle_{\square} - \langle [\mathbf{K} \text{grad } \hat{\theta}^\sim]_i \rangle_{\square} \right] d\bar{\theta} \\ &\quad - \left[\langle [\mathbf{K}]_{ij} \rangle_{\square} + \left\langle \left[\mathbf{K} \text{grad } \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(j)} \right]_i \right\rangle_{\square} - \langle [\mathbf{Y}]_i (x_j - \bar{x}_j) \rangle_{\square} - \left\langle [\mathbf{Y}]_i \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(j)} \right\rangle_{\square} \right] d\bar{g}_j, \end{aligned} \quad (5.42)$$

de onde, por comparação com a Eq. (5.29), se identifica

$$[\bar{\mathbf{Y}}]_i = \langle [\mathbf{Y}]_i \rangle_{\square} + \langle [\mathbf{Y}]_i \hat{\theta}^\sim \rangle_{\square} - \langle [\mathbf{K} \text{grad } \hat{\theta}^\sim]_i \rangle_{\square}, \quad (5.43)$$

$$[\bar{\mathbf{K}}]_{ij} = \langle [\mathbf{K}]_{ij} \rangle_{\square} + \left\langle \left[\mathbf{K} \text{grad } \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(j)} \right]_i \right\rangle_{\square} - \langle [\mathbf{Y}]_i (x_j - \bar{x}_j) \rangle_{\square} - \left\langle [\mathbf{Y}]_i \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(j)} \right\rangle_{\square}. \quad (5.44)$$

Já $d\bar{\phi}$ pode ser obtido de

$$d\bar{\phi} = d\langle \phi \rangle_{\square} = \langle \phi' d\theta \rangle_{\square}. \quad (5.45)$$

Substituindo a expressão para $d\theta$, Eq. (5.40), tem-se

$$d\bar{\phi} = \left(\langle \phi' \rangle_{\square} + \langle \phi' \hat{\theta}^\sim \rangle_{\square} \right) d\bar{\theta} + \left(\langle \phi' (x_i - \bar{x}_i) \rangle_{\square} + \langle \phi' \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(i)} \rangle_{\square} \right) d\bar{g}_i, \quad (5.46)$$

de onde se identifica, por comparação com a Eq. (5.25),

$$\bar{C} = \langle \phi' \rangle_{\square} + \langle \phi' \hat{\theta}^\sim \rangle_{\square}, \quad (5.47)$$

$$[\bar{\mathbf{B}}]_i = \langle \phi' (x_i - \bar{x}_i) \rangle_{\square} + \langle \phi' \hat{\theta}^\sim_{\mathbf{g}}^{(i)} \rangle_{\square}. \quad (5.48)$$

Quanto a $d\bar{\Phi}$, pode-se escrever

$$[d\bar{\Phi}]_i = d\langle\phi(x_i - \bar{x}_i)\rangle_{\square} = \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)d\theta\rangle_{\square}. \quad (5.49)$$

Substituindo a expressão para $d\theta$, dada pela Eq. (5.40), tem-se

$$[d\bar{\Phi}]_i = \left[\langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)\rangle_{\square} + \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim}\rangle_{\square} \right] d\bar{\theta} + \left[\langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)(x_j - \bar{x}_j)\rangle_{\square} + \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(j)}\rangle_{\square} \right] d\bar{g}_j. \quad (5.50)$$

A comparação da Eq. (5.50) com a Eq. (5.26) resulta na identificação

$$[\hat{\mathbf{C}}]_i = \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)\rangle_{\square} + \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim}\rangle_{\square}, \quad (5.51)$$

$$[\hat{\mathbf{B}}]_{ij} = \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)(x_j - \bar{x}_j)\rangle_{\square} + \langle\phi'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(j)}\rangle_{\square}. \quad (5.52)$$

O diferencial $d\bar{r}$ é análogo ao diferencial $d\bar{\phi}$. Então, pode-se escrever

$$d\bar{r} = \left(\langle r' \rangle_{\square} + \langle r' \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \rangle_{\square} \right) d\bar{\theta} + \left(\langle r'(x_i - \bar{x}_i) \rangle_{\square} + \langle r' \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \rangle_{\square} \right) d\bar{g}_i. \quad (5.53)$$

Comparando esse resultado com a Eq. (5.27), identifica-se

$$\bar{E} = \langle r' \rangle_{\square} + \langle r' \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \rangle_{\square}, \quad (5.54)$$

$$[\bar{\mathbf{D}}]_i = \langle r'(x_i - \bar{x}_i) \rangle_{\square} + \langle r' \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \rangle_{\square}. \quad (5.55)$$

Já o diferencial $d\bar{\mathbf{r}}$ é análogo ao diferencial $d\bar{\Phi}$, de onde pode-se escrever

$$[d\bar{\mathbf{r}}]_i = \left[\langle r'(x_i - \bar{x}_i) \rangle_{\square} + \langle r'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \rangle_{\square} \right] d\bar{\theta} + \left[\langle r'(x_i - \bar{x}_i)(x_j - \bar{x}_j) \rangle_{\square} + \langle r'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(j)} \rangle_{\square} \right] d\bar{g}_j, \quad (5.56)$$

e de onde, por comparação com a Eq. (5.28), se identifica

$$[\hat{\mathbf{E}}]_i = \langle r'(x_i - \bar{x}_i) \rangle_{\square} + \langle r'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \rangle_{\square}, \quad (5.57)$$

$$[\hat{\mathbf{D}}]_{ij} = \langle r'(x_i - \bar{x}_i)(x_j - \bar{x}_j) \rangle_{\square} + \langle r'(x_i - \bar{x}_i)\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(j)} \rangle_{\square}. \quad (5.58)$$

5.4 Cálculo das sensibilidades correspondentes à flutuação de temperatura

Na seção anterior os operadores tangentes foram escritos em termos das sensibilidades $\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim}, \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \in \mathcal{H}_0^{\sim}$. Nesta seção serão obtidas expressões com as quais essas sensibilidades podem ser determinadas.

Inicialmente observa-se que, da Eq. (5.3), pode-se escrever

$$\mathcal{R}_{\square}(\theta; \delta\theta^{\sim}) = 0, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim} \quad (5.59)$$

e

$$\mathcal{R}_{\square}(\theta + d\theta; \delta\theta^{\sim}) = 0, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}, \quad (5.60)$$

o que implica em

$$\mathcal{R}'_{\square}(\theta; \delta\theta^{\sim}, d\theta) = 0, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}. \quad (5.61)$$

Substituindo a expressão para $d\theta$, dada pela Eq. (5.40), na Eq. (5.61), e considerando o fato de que essa equação deve ser satisfeita para quaisquer $d\bar{\theta}$ e $d\bar{g}_i$, obtém-se as seguintes equações:¹

(i) Encontre $\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}$ tal que

$$\begin{aligned} & \left\langle \delta\theta^{\sim} \phi' \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \right\rangle_{\square} - \left\langle \delta\theta^{\sim} r' \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t - \left\langle \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \mathbf{Y} \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t \\ & + \left\langle \left(\mathbf{K} \text{grad} \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} \right) \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t = - \left\langle \delta\theta^{\sim} \phi' \right\rangle_{\square} + \left\langle \delta\theta^{\sim} r' \right\rangle_{\square} \Delta t \\ & + \left\langle \mathbf{Y} \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}; \quad (5.62) \end{aligned}$$

(ii) Encontre $\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \in \mathcal{H}_0^{\sim}$, $i = 1, \dots, n_{dim}$, onde n_{dim} é o número de dimensões do problema, tal que

$$\begin{aligned} & \left\langle \delta\theta^{\sim} \phi' \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \right\rangle_{\square} - \left\langle \delta\theta^{\sim} r' \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \right\rangle_{\square} \Delta t - \left\langle \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \mathbf{Y} \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t \\ & + \left\langle \left(\mathbf{K} \text{grad} \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \right) \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t = - \left\langle \delta\theta^{\sim} \phi' (x_i - \bar{x}_i) \right\rangle_{\square} \\ & + \left\langle \delta\theta^{\sim} r' (x_i - \bar{x}_i) \right\rangle_{\square} \Delta t + \left\langle \mathbf{Y} (x_i - \bar{x}_i) \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t \\ & - \left\langle (\mathbf{K} \mathbf{e}_i) \cdot \text{grad} \delta\theta^{\sim} \right\rangle_{\square} \Delta t, \quad \forall \delta\theta^{\sim} \in \mathcal{H}_0^{\sim}. \quad (5.63) \end{aligned}$$

5.5 Solução do problema na microescala pelo método dos elementos finitos

Nesta seção a solução do problema na microescala, dado pelas Eqs. (5.3), (5.9) e (5.12), será descrita em termos do método de elementos finitos. Para tanto, é introduzido o espaço de elementos finitos $\mathcal{H}^{\sim h}$ da forma usual (com o espaço das variações correspondente denotado por $\mathcal{H}_0^{\sim h}$). Antes de descrever a solução do problema na microescala, no entanto, são necessárias algumas definições.

DEFINIÇÃO 5.6: O vetor funções de forma microscópico é definido por

$$\underline{\mathbf{N}} := \left[N_1(\mathbf{x}) \quad N_2(\mathbf{x}) \quad \cdots \quad N_{n_{nós}}(\mathbf{x}) \right]^{\top} \quad (5.64)$$

e contém as chamadas funções de forma da microescala [Hughes, 2000], $N_i(\mathbf{x})$, $i =$

¹O índice n não está apresentado nas equações com o objetivo de não sobrecarregar a notação.

$1, 2, \dots, n_{\text{nós}}$, onde $n_{\text{nós}}$ é o número de nós da malha de elementos finitos associada ao EVR.

DEFINIÇÃO 5.7: O vetor temperatura microscópico é definido por

$$\underline{\boldsymbol{\theta}} := \left[\theta_1(t) \quad \theta_2(t) \quad \cdots \quad \theta_{n_{\text{nós}}}(t) \right]^\top \quad (5.65)$$

e contém os coeficientes da combinação linear mostrada a seguir (ver Eq. (5.66)), a qual aproxima o campo de temperatura microscópica. Como está sendo utilizado o método dos elementos finitos, as funções de forma, cada qual associada a um nó da malha que representa o domínio físico na microescala, têm propriedades que tornam as componentes $\theta_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, n_{\text{nós}}$, os valores nodais da temperatura microscópica.

O campo de temperatura é então aproximado por

$$\theta^h(\mathbf{x}, t) = \underline{\mathbf{N}}^\top \underline{\boldsymbol{\theta}} = \underline{\mathbf{N}}^{l\top} \underline{\boldsymbol{\theta}}^l + \underline{\mathbf{N}}^{p\top} \underline{\boldsymbol{\theta}}^p, \quad (5.66)$$

onde os sobrescritos l e p indicam nós com temperatura livre e prescrita, respectivamente. De acordo com essa aproximação, tem-se

$$d\theta^h = \underline{\mathbf{N}}^{l\top} d\underline{\boldsymbol{\theta}}^l. \quad (5.67)$$

Já o campo das variações é aproximado por

$$\delta\theta^{\sim h} = \underline{\mathbf{N}}^{l\top} \underline{\mathbf{v}}^l, \quad (5.68)$$

onde $\underline{\mathbf{v}}^l$ é um vetor arbitrário.

DEFINIÇÃO 5.8: Define-se a matriz gradiente das funções de forma microscópicas por

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} := \text{grad } \underline{\mathbf{N}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial N_1}{\partial x_{n_{\text{dim}}}} \\ \frac{\partial N_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial N_2}{\partial x_{n_{\text{dim}}}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial N_{n_{\text{nós}}}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial N_{n_{\text{nós}}}}{\partial x_{n_{\text{dim}}}} \end{bmatrix}. \quad (5.69)$$

Assim, o gradiente de temperatura microscópico pode ser aproximado por

$$\mathbf{g}^h = \underline{\underline{\mathbf{B}}}^\top \underline{\boldsymbol{\theta}}. \quad (5.70)$$

DEFINIÇÃO 5.9: A reelaboração do problema em termos de um sistema de equações algébricas, conforme mostrado logo a seguir (ver Eq. (5.75)), motiva a definição das seguintes matrizes:

$$\underline{\underline{\mathbb{C}}} := \left\langle \phi'_n \underline{\mathbf{N}} \underline{\mathbf{N}}^\top \right\rangle_{\square}, \quad (5.71)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{Q}}} := \left\langle r'_n \underline{\mathbf{N}} \underline{\mathbf{N}}^\top \right\rangle_{\square}, \quad (5.72)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{Y}}} := \left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\underline{\mathbf{Y}}]_n \underline{\mathbf{N}}^\top \right\rangle_{\square}, \quad (5.73)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{K}}} := \left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\underline{\mathbf{K}}]_n \underline{\underline{\mathbf{B}}}^\top \right\rangle_{\square}. \quad (5.74)$$

Substituindo as Eqs. (5.3) e (5.9) na Eq. (5.12), e então usando as aproximações para $d\theta$ e $\delta\theta^\sim$, dadas pelas Eqs. (5.67) e (5.68), e considerando a arbitrariedade do vetor $\underline{\mathbf{v}}^l$, obtém-se o seguinte sistema de equações algébricas (omitindo o índice k):

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}}^{l,l} d\underline{\boldsymbol{\theta}}^l = -\underline{\mathbf{r}}^l, \quad (5.75)$$

onde a matriz tangente microscópica (completa) é definida por²

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}} := \underline{\underline{\mathbb{C}}} + \left(-\underline{\underline{\mathbb{Q}}} - \underline{\underline{\mathbb{Y}}} + \underline{\underline{\mathbb{K}}} \right) \Delta t, \quad (5.76)$$

e o vetor resíduo microscópico é definido por

$$\underline{\mathbf{r}} := \left\langle \underline{\mathbf{N}} (\phi_n - \phi_{n-1}) \right\rangle_{\square} - \left\langle \underline{\mathbf{N}} r_n \right\rangle_{\square} \Delta t - \left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\underline{\mathbf{q}}]_n \right\rangle_{\square} \Delta t. \quad (5.77)$$

A matriz $\underline{\underline{\mathbb{C}}}^{l,l}$, por exemplo, é definida por $\underline{\underline{\mathbb{C}}}^{l,l} := \left\langle \phi'_n \underline{\mathbf{N}}^l \underline{\mathbf{N}}^{l\top} \right\rangle_{\square}$. Já a matriz $\underline{\underline{\mathbb{C}}}^{l,p}$, a ser mencionada futuramente, é definida por $\underline{\underline{\mathbb{C}}}^{l,p} := \left\langle \phi'_n \underline{\mathbf{N}}^l \underline{\mathbf{N}}^{p\top} \right\rangle_{\square}$. As demais matrizes e o vetor $\underline{\mathbf{r}}^l$ são definidos de forma análoga.

OBSERVAÇÃO 5.1: No caso de considerar-se a microescala em regime estacionário e sem geração de calor, as Eqs. (5.76) e (5.77) passam a ser, respectivamente,

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}} := \left(-\underline{\underline{\mathbb{Y}}} + \underline{\underline{\mathbb{K}}} \right) \Delta t \quad (5.78)$$

e

$$\underline{\mathbf{r}} := -\left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\underline{\mathbf{q}}]_n \right\rangle_{\square} \Delta t. \quad (5.79)$$

Mesmo nesse caso, os efeitos da taxa de variação de energia interna e da geração de calor devem ser considerados diretamente sobre a macroescala, porquanto, caso contrário, o problema seria estacionário e sem geração de calor do ponto de vista macroscópico também. Para que isso seja feito, as matrizes $\underline{\underline{\mathbb{C}}}$ e $\underline{\underline{\mathbb{Q}}}$ precisam ser sempre computadas, uma

²Na realidade, apenas a submatriz $\underline{\underline{\mathbb{A}}}^{l,l} = \underline{\underline{\mathbb{C}}}^{l,l} + \left(-\underline{\underline{\mathbb{Q}}}^{l,l} - \underline{\underline{\mathbb{Y}}}^{l,l} + \underline{\underline{\mathbb{K}}}^{l,l} \right) \Delta t$ é utilizada na solução do problema, conforme a Eq. (5.75). Porém, mais adiante será feita menção à submatriz $\underline{\underline{\mathbb{A}}}^{l,p}$ (veja, por exemplo, a Eq. (5.94) na pág. 50) e, portanto, preferiu-se a definição da matriz (completa) $\underline{\underline{\mathbb{A}}}$ já neste ponto do texto.

vez que serão utilizadas no cálculo dos operadores tangentes (ver Eqs. (5.95)–(5.102)), embora possivelmente não sejam necessárias para o cômputo da matriz tangente microscópica, conforme observa-se na Eq. (5.78).

5.6 Solução dos problemas de sensibilidade pelo método dos elementos finitos

Nesta seção será descrita a solução dos problemas de sensibilidade, dado pelas Eqs. (5.62) e (5.63), pelo método dos elementos finitos. Para tal, é necessário escrever as sensibilidades em termos das funções de forma do método dos elementos finitos, bem como fazer uso de outras definições, a seguir enunciadas.

DEFINIÇÃO 5.10: Para o caso bidimensional, as variáveis nodais correspondentes às sensibilidades $\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)}$ são denotadas pela matriz

$$\underline{\hat{\theta}}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim} = \begin{bmatrix} \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(1)} & \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(2)} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim l(1)} & \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim l(2)} \\ \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim p(1)} & \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim p(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim l(1)} & \hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim l(2)} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (5.80)$$

onde os termos nulos decorrem do fato que a derivada $\partial\theta^{\sim}/\partial\bar{g}_i$ é nula para os nós prescritos.

OBSERVAÇÃO 5.2: Os vetores e matrizes do método de elementos finitos devem ser construídos de forma que os nós prescritos tenham numeração sempre superior aos nós livres, para que a construção dada pela Eq. (5.80) seja possível.

Por meio da Definição 5.10, a sensibilidade $\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)}$ é aproximada por

$$\hat{\theta}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} = \underline{\mathbf{N}}^{\top} \underline{\hat{\theta}}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \quad (5.81)$$

$$= \underline{\mathbf{N}}^{l\top} \underline{\hat{\theta}}_{\bar{\mathbf{g}}}^{\sim l(i)}. \quad (5.82)$$

DEFINIÇÃO 5.11: As variáveis nodais correspondentes à sensibilidade $\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim}$ são denotadas pelo vetor

$$\underline{\hat{\theta}}_{\bar{\theta}}^{\sim} := \begin{bmatrix} \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim l} \\ \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim l} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (5.83)$$

onde os termos nulos decorrem do fato que a derivada $\partial\theta^{\sim}/\partial\bar{\theta}$ é nula para os nós prescritos.

Por meio da Definição 5.11, a sensibilidade $\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim}$ é então aproximada por

$$\hat{\theta}_{\bar{\theta}}^{\sim} = \underline{\mathbf{N}}^{\top} \underline{\hat{\theta}}_{\bar{\theta}}^{\sim} \quad (5.84)$$

$$= \underline{\mathbf{N}}^{l\top} \underline{\hat{\theta}}_{\bar{\theta}}^{\sim l}. \quad (5.85)$$

DEFINIÇÃO 5.12: Para o caso bidimensional, as variáveis nodais associadas a $x_j - \bar{x}_j$ são denotadas pela matriz

$$\underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}' = \left[\underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{(1)} \quad \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{(2)} \right] := \begin{bmatrix} \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{l(1)} & \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{l(2)} \\ \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{p(1)} & \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{p(2)} \end{bmatrix}, \quad (5.86)$$

onde o componente $\left[\underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}' \right]_{ij}$ da matriz é definido como

$$\left[\underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}' \right]_{ij} := (x_j - \bar{x}_j)|_{\text{nó } i}. \quad (5.87)$$

Com auxílio dessa definição, o termo $x_i - \bar{x}_i$ pode ser escrito como

$$x_i - \bar{x}_i = \underline{\mathbf{N}}^\top \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{(i)}. \quad (5.88)$$

DEFINIÇÃO 5.13: O vetor $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ é definido como

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_1 := \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\theta}}_1^l \\ \hat{\boldsymbol{\theta}}_1^p \end{bmatrix}, \quad (5.89)$$

com

$$\hat{\theta}_{1_i} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n_{\text{nós}}. \quad (5.90)$$

De acordo com essa definição, tem-se

$$1 = \underline{\mathbf{N}}^\top \hat{\boldsymbol{\theta}}_1. \quad (5.91)$$

Agora que as sensibilidades estão escritas em termos das funções de forma do método dos elementos finitos, pode-se reescrever as Eqs. (5.62) e (5.63) em termos das matrizes de elementos finitos. Após algumas manipulações, a Eq. (5.62) pode ser reescrita como

$$\underline{\mathbb{A}}^{l,l} \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\theta}^{\sim l} = \left(-\underline{\mathbb{C}}^{l,l} + \underline{\mathbb{Q}}^{l,l} \Delta t + \underline{\mathbb{Y}}^{l,l} \Delta t \right) \hat{\boldsymbol{\theta}}_1^l + \left(-\underline{\mathbb{C}}^{l,p} + \underline{\mathbb{Q}}^{l,p} \Delta t + \underline{\mathbb{Y}}^{l,p} \Delta t \right) \hat{\boldsymbol{\theta}}_1^p, \quad (5.92)$$

onde se faz uso da Definição 5.9 (pág. 47).

OBSERVAÇÃO 5.3: No caso de considerar-se a microescala em regime estacionário sem geração de calor, a Eq. (5.92) passa a ser

$$\underline{\mathbb{A}}^{l,l} \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\theta}^{\sim l} = \left(\underline{\mathbb{Y}}^{l,l} \hat{\boldsymbol{\theta}}_1^l + \underline{\mathbb{Y}}^{l,p} \hat{\boldsymbol{\theta}}_1^p \right) \Delta t, \quad (5.93)$$

sendo $\underline{\mathbb{A}}$ dada pela Eq. (5.78).

A outra equação a ser resolvida é a Eq. (5.63). Após manipulações, obtém-se

$$\underline{\mathbb{A}}^{l,l} \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathbf{g}}^{\sim l(i)} = -\underline{\mathbb{A}}^{l,l} \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{l(i)} - \underline{\mathbb{A}}^{l,p} \underline{\hat{\boldsymbol{\theta}}}'^{p(i)}, \quad (5.94)$$

onde $\underline{\mathbb{A}}^{l,p}$ é definida de maneira análoga à definição de $\underline{\mathbb{C}}^{l,p}$ discutida anteriormente (ver texto após a Eq. (5.77)).

Uma vez que $\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}}^{l(i)}$ e $\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{l(i)}$, e, portanto, $\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}}$ e $\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{(i)}$, estejam determinados, os operadores tangentes podem ser reescritos utilizando notação matricial:

$$[\hat{\mathbf{B}}]_i = \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1^\top \underline{\mathbb{C}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \right), \quad (5.95)$$

$$\bar{\mathbf{C}} = \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1^\top \underline{\mathbb{C}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right), \quad (5.96)$$

$$[\hat{\mathbf{B}}]_{ij} = \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{C}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(j)} + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{\sim(j)} \right), \quad (5.97)$$

$$[\hat{\mathbf{C}}]_i = \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{C}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right), \quad (5.98)$$

$$[\hat{\mathbf{D}}]_i = \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1^\top \underline{\mathbb{Q}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{\sim(i)} \right), \quad (5.99)$$

$$\bar{\mathbf{E}} = \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1^\top \underline{\mathbb{Q}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right), \quad (5.100)$$

$$[\hat{\mathbf{D}}]_{ij} = \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{Q}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(j)} + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{\sim(j)} \right), \quad (5.101)$$

$$[\hat{\mathbf{E}}]_i = \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{Q}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right), \quad (5.102)$$

$$[\hat{\mathbf{Y}}]_i = \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{Y}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right) - \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{K}} \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}}, \quad (5.103)$$

$$[\hat{\mathbf{K}}]_{ij} = \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{K}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(j)} + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{\sim(j)} \right) - \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(i)} \right)^\top \underline{\mathbb{Y}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}^{\prime(j)} + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\mathbf{g}}}^{\sim(j)} \right). \quad (5.104)$$

Para exemplificação, a determinação de $\bar{\mathbf{C}}$ pode ser demonstrada a partir da Eq. (5.47) como:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{C}} &= \langle \phi' \rangle_{\square} + \langle \phi' \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \rangle_{\square} = \langle \phi' (1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}}) \rangle_{\square} = \langle \phi' \left(N_j \hat{\theta}_{1_j} + N_j \hat{\theta}_{\tilde{\theta}_j} \right) \rangle_{\square} = \langle \phi' N_j \left(\hat{\theta}_{1_j} + \hat{\theta}_{\tilde{\theta}_j} \right) \rangle_{\square} \\ &= \langle \phi' 1 N_j \left(\hat{\theta}_{1_j} + \hat{\theta}_{\tilde{\theta}_j} \right) \rangle_{\square} = \langle \phi' N_i \hat{\theta}_{1_i} N_j \left(\hat{\theta}_{1_j} + \hat{\theta}_{\tilde{\theta}_j} \right) \rangle_{\square} = \hat{\theta}_{1_i} \langle \phi' N_i N_j \rangle_{\square} \left(\hat{\theta}_{1_j} + \hat{\theta}_{\tilde{\theta}_j} \right) \\ &= \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1^\top \langle \phi' \underline{\mathbf{N}} \underline{\mathbf{N}}^\top \rangle_{\square} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right) \\ &= \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1^\top \underline{\mathbb{C}} \left(\hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_1 + \hat{\underline{\boldsymbol{\theta}}}_{\tilde{\theta}} \right). \end{aligned} \quad (5.105)$$

5.7 Solução do problema na macroescala pelo método dos elementos finitos

Nesta seção a solução do problema na macroescala, dado pelas Eqs. (5.14), (5.30) e (5.33), será descrita em termos do método de elementos finitos. Para tanto, introduz-se o espaço de elementos finitos $\bar{\mathcal{H}}^h$ da forma usual (com o espaço das variações correspondente denotado por $\bar{\mathcal{H}}_0^h$). Antes de descrever a solução do problema na macroescala, no entanto, são necessárias algumas definições.

DEFINIÇÃO 5.14: O vetor funções de forma macroscópico é definido por

$$\bar{\mathbf{N}} := \left[\bar{N}_1(\bar{\mathbf{x}}) \quad \bar{N}_2(\bar{\mathbf{x}}) \quad \cdots \quad \bar{N}_{N_{\text{nós}}}(\bar{\mathbf{x}}) \right]^\top \quad (5.106)$$

e contém as chamadas funções de forma da macroescala, $\bar{N}_I(\bar{\mathbf{x}})$, $I = 1, 2, \dots, N_{\text{nós}}$, onde $N_{\text{nós}}$ é o número de nós da malha associada ao corpo macroscópico.

DEFINIÇÃO 5.15: O vetor temperatura macroscópico é definido por

$$\bar{\boldsymbol{\theta}} := \left[\bar{\theta}_1(t) \quad \bar{\theta}_2(t) \quad \cdots \quad \bar{\theta}_{N_{nós}}(t) \right]^\top \quad (5.107)$$

e contém os coeficientes da combinação linear mostrada a seguir (ver Eq. (5.108)), a qual aproxima o campo de temperatura macroscópica. Como está sendo utilizado o método dos elementos finitos, as funções de forma, cada qual associada a um nó da malha que representa o domínio físico na macroescala, têm propriedades que tornam as componentes $\bar{\theta}_I(t)$, $I = 1, 2, \dots, N_{nós}$, os valores nodais da temperatura macroscópica.

O campo de temperatura macroscópica é aproximado por

$$\bar{\theta}^h(\bar{\mathbf{x}}, t) = \bar{\mathbf{N}}^\top \bar{\boldsymbol{\theta}} = \bar{\mathbf{N}}^{l\top} \bar{\boldsymbol{\theta}}^l + \bar{\mathbf{N}}^{p\top} \bar{\boldsymbol{\theta}}^p. \quad (5.108)$$

De acordo com essa aproximação, tem-se

$$d\bar{\theta}^h = \bar{\mathbf{N}}^{l\top} d\bar{\boldsymbol{\theta}}^l. \quad (5.109)$$

Deve-se observar que $d\bar{\boldsymbol{\theta}}^p$ é nulo pelo fato de que essa equação será utilizada para uma iteração fixa na solução do problema macroscópico, para a qual a temperatura prescrita se mantém constante.³

O campo das variações é aproximado por

$$\delta\bar{\theta}^h = \bar{\mathbf{N}}^{l\top} \bar{\mathbf{v}}^l, \quad (5.110)$$

onde $\bar{\mathbf{v}}^l$ é um vetor arbitrário.

DEFINIÇÃO 5.16: Define-se a matriz gradiente (macroscópico) das funções de forma macroscópicas por

$$\bar{\mathbf{B}} := \overline{\text{grad}} \bar{\mathbf{N}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{N}_1}{\partial \bar{x}_1} & \cdots & \frac{\partial \bar{N}_1}{\partial \bar{x}_{n_{dim}}} \\ \frac{\partial \bar{N}_2}{\partial \bar{x}_1} & \cdots & \frac{\partial \bar{N}_2}{\partial \bar{x}_{n_{dim}}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \bar{N}_{N_{nós}}}{\partial \bar{x}_1} & \cdots & \frac{\partial \bar{N}_{N_{nós}}}{\partial \bar{x}_{n_{dim}}} \end{bmatrix}. \quad (5.111)$$

Assim, o gradiente de temperatura macroscópico pode ser aproximado por

$$\bar{\mathbf{g}}^h = \bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\boldsymbol{\theta}}. \quad (5.112)$$

³Embora, naturalmente, a temperatura prescrita possa variar ao longo do tempo.

A solução do problema sugere a definição das seguintes matrizes.

DEFINIÇÃO 5.17: De forma a escrever a linearização do problema de forma sucinta, conforme mostrado logo a seguir, as seguintes matrizes são definidas:⁴

$$\underline{\underline{\mathbb{B}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{N}}} [\underline{\underline{\mathbf{B}}}]_n^{\top} \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.113)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{C}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{N}}} \underline{\underline{\mathbf{C}}}_n \underline{\underline{\mathbf{N}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.114)$$

$$\hat{\underline{\underline{\mathbb{B}}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\hat{\underline{\underline{\mathbf{B}}}}]_n \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.115)$$

$$\hat{\underline{\underline{\mathbb{C}}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\hat{\underline{\underline{\mathbf{C}}}}]_n \underline{\underline{\mathbf{N}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.116)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{D}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{N}}} [\underline{\underline{\mathbf{D}}}]_n^{\top} \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.117)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{E}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{N}}} \underline{\underline{\mathbf{E}}}_n \underline{\underline{\mathbf{N}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.118)$$

$$\hat{\underline{\underline{\mathbb{D}}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\hat{\underline{\underline{\mathbf{D}}}}]_n \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.119)$$

$$\hat{\underline{\underline{\mathbb{E}}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\hat{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}]_n \underline{\underline{\mathbf{N}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.120)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{Y}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\underline{\underline{\mathbf{Y}}}]_n \underline{\underline{\mathbf{N}}}^{\top} d\bar{v}, \quad (5.121)$$

$$\underline{\underline{\mathbb{K}}} := \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\underline{\underline{\mathbf{K}}}]_n \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{\top} d\bar{v}. \quad (5.122)$$

Substituindo as Eqs. (5.14) e (5.30) na Eq. (5.33), e utilizando as aproximações para $d\bar{\theta}$ e $\delta\bar{\theta}$, dadas pelas Eqs. (5.109) e (5.110), e considerando a arbitrariedade do vetor $\bar{\mathbf{v}}^l$, obtém-se o seguinte sistema de equações algébricas:

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}}^{l,l} d\bar{\boldsymbol{\theta}}^l = -\bar{\mathbf{r}}^l, \quad (5.123)$$

onde a matriz tangente macroscópica é definida por

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}} := \underline{\underline{\mathbb{C}}} + \underline{\underline{\mathbb{B}}} + \hat{\underline{\underline{\mathbb{C}}}} + \hat{\underline{\underline{\mathbb{B}}}} + \left(\underline{\underline{\mathbb{K}}} - \hat{\underline{\underline{\mathbb{E}}}} - \underline{\underline{\mathbb{Y}}} - \underline{\underline{\mathbb{D}}} - \underline{\underline{\mathbb{E}}} - \hat{\underline{\underline{\mathbb{D}}}} \right) \Delta t \quad (5.124)$$

e o vetor resíduo macroscópico é definido por

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{r}} := & \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{N}}} (\bar{\phi}_n - \bar{\phi}_{n-1}) d\bar{v} - \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{N}}} \bar{r}_n d\bar{v} \Delta t - \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\bar{\mathbf{q}}]_n d\bar{v} \Delta t \\ & + \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} \left([\bar{\boldsymbol{\phi}}]_n - [\bar{\boldsymbol{\phi}}]_{n-1} \right) d\bar{v} - \int_{\mathcal{B}_t} \underline{\underline{\mathbf{B}}} [\bar{\mathbf{r}}]_n d\bar{v} \Delta t + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \int_{\partial \mathcal{B}_t^q} \bar{q} \underline{\underline{\mathbf{N}}} d\bar{a} dt. \end{aligned} \quad (5.125)$$

⁴Nas expressões da Definição 5.17, o índice n refere-se ao instante de tempo.

5.8 Integração

Nesta tese, as integrações numéricas são realizadas por meio da quadratura de Gauss-Legendre.⁵ O número de pontos de integração necessários para uma integração exata depende do grau do polinômio a ser integrado (veja a seção 5.5.5 de Bathe, 1996). Neste trabalho, o número de pontos de integração está assim definido:

- Elementos triangulares lineares: 3 pontos de integração;
- Elementos quadrilaterais bilineares: 4 pontos de integração;
- Elementos quadrilaterais quadráticos incompletos: 9 pontos de integração.

5.9 Linearizações

5.9.1 Cálculo de ϕ'

Considerando que o meio é assumido como infinitamente rígido, a Eq. (5.4) pode ser escrita como

$$\phi' = \frac{d\phi}{d\theta} = \frac{d}{d\theta} \int_{\theta_{ref}}^{\theta} \rho c(\theta^*) d\theta^* = \rho c(\theta), \quad (5.126)$$

onde θ_{ref} é a temperatura de referência para o cálculo da energia interna.

5.9.2 Cálculo de \mathbf{K} e \mathbf{Y}

Será utilizada a Lei de Fourier para descrever a condução de calor na microescala (veja Cap. 3). Desse modo, as equações relativas ao fluxo de calor encontradas na Definição 5.3 serão calculadas fazendo uso explícito do modelo de condução de Fourier. Assumindo uma relação

$$\mathbf{q} = -\boldsymbol{\kappa}(\theta) \text{grad } \theta, \quad (5.127)$$

tem-se (veja as Eqs. (5.6) e (5.7))

$$\mathbf{K} = \boldsymbol{\kappa}(\theta), \quad (5.128)$$

$$\mathbf{Y} = -\frac{d\boldsymbol{\kappa}(\theta)}{d\theta} \text{grad } \theta. \quad (5.129)$$

5.10 Algoritmo

Nesta seção são apresentados os algoritmos empregados na solução do problema multiescala. Ao iniciar pelo algoritmo mais externo, isto é, o Algoritmo 1, todos os demais são referenciados no devido momento. O vetor $\boldsymbol{\theta}'$ que aparece nos algoritmos contém os valores nodais de θ' . Os comentários são iniciados pelo símbolo \triangleright .

⁵A estratégia de integração de Gauss-Legendre tem sido amplamente utilizada no contexto dos métodos multiescala. Entretanto, poderiam ser utilizadas regras de integração diferentes, tais como aquelas definidas para os pontos de Barlow.

Há dois programas, um macroscópico, denominado `Conducao_Calor_Macro` (veja o Algoritmo 1), e um microscópico, denominado `Conducao_Calor_Micro` (veja o Algoritmo 2). A transferência de informações da macroescala para a microescala é feita por meio de argumentos na chamada do programa `Conducao_Calor_Micro`. As variáveis que devem ser transferidas da microescala para a macroescala são salvas em arquivos, que são lidos pelo programa `Conducao_Calor_Macro` à medida que isso se faz necessário. Deve-se ressaltar que as variáveis associadas a cada ponto de integração só são salvas na estrutura de programação quando o problema pertinente (macroscópico ou microscópico) converge. De modo semelhante, os arquivos de *restart* dos problemas microscópicos para um dado instante de tempo só são salvos após os problemas microscópicos e macroscópicos convergirem. Os arquivos de *restart* mencionados servem para recuperar as soluções microscópicas do instante de tempo anterior.

Neste trabalho, as tolerâncias para os erros nos resíduos macroscópico e microscópico são ambas definidas em termos do passo de tempo como

$$tol_{\bar{\mathbf{r}}} = 10^{-6} \Delta t \quad (5.130)$$

e

$$tol_{\mathbf{r}} = 10^{-9} \Delta t. \quad (5.131)$$

Algoritmo 1 Programa `Conducao_Calor_Macro`

- 1: **programa** `CONDUCAO_CALOR_MACRO` ()
 - 2: Inicialize o tempo: $t \leftarrow 0$.
 - 3: Inicialize o incremento de tempo: $\Delta t \leftarrow 0$.
 - ▷ Δt é inicializado por ser um argumento da subrotina `Resolva_Problema_Micro`, chamada a seguir.
 - 4: Compute o vetor temperatura macroscópico: $\bar{\boldsymbol{\theta}}_0^l$.
 - 5: `RESOLVA_PROBLEMA_MICRO`($\bar{\boldsymbol{\theta}}_0^l, t, \Delta t, \text{.verdadeiro}$.) ▷ Algoritmo 14
 - 6: `ATUALIZE_VARIAVEIS_PONTO_INTEGRACAO_MACRO`() ▷ Algoritmo 3
 - ▷ As variáveis associadas a cada ponto de integração são atualizadas a partir das informações dos arquivos `micro_<elem>_<pi>`, advindos da microescala, onde *elem* e *pi* indicam, respectivamente, o elemento finito e o ponto de integração macroscópicos.
 - 7: `ESCREVA_SAIDA_MACRO`($\bar{\boldsymbol{\theta}}_0^l, t$) ▷ Algoritmo 11
 - 8: Inicialize o vetor temperatura macroscópico: $\bar{\boldsymbol{\theta}}^l \leftarrow \bar{\boldsymbol{\theta}}_0^l$.
 - 9: Compute o incremento de tempo: $\Delta t \leftarrow t_f/N$.
 - 10: Atualize o tempo: $t \leftarrow t + \Delta t$.
 - 11: **enquanto** $t \leq t_f$ **faça**
 - 12: `RESOLVA_SISTEMA_NAO_LINEAR_MACRO`($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, \bar{\boldsymbol{\theta}}_{n-1}^l, t$) ▷ Algoritmo 15
 - 13: `ESCREVA_SAIDA_MACRO`($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, t$) ▷ Algoritmo 11
 - 14: Atualize o tempo: $t \leftarrow t + \Delta t$.
 - 15: Atualize o vetor temperatura macroscópico: $\bar{\boldsymbol{\theta}}_{n-1}^l \leftarrow \bar{\boldsymbol{\theta}}^l$.
 - 16: **fim enquanto**
 - 17: **fim programa**
-

Algoritmo 2 Programa Conducao_Calor_Micro

```

1: programa CONDUCAO_CALOR_MICRO ( $t, \Delta t, \bar{\theta}^h, \bar{\mathbf{g}}^h, elem, pi, reg$ )
2:   Prescreva as condições de contorno:  $\underline{\theta}^p \leftarrow \underline{\theta}^{\prime p}$ .
3:   se  $t = 0$  então
4:     Compute o vetor temperatura microscópico:  $\underline{\theta}_{n-1}^l \leftarrow \underline{\theta}^{\prime l}$ .
5:     ATUALIZE_VARIAVEIS_PONTO_INTEGRACAO_MICRO( $\underline{\theta}_{n-1}^l, t$ ) ...▷ Algoritmo 4
6:     COMPUTE_E_ESCREVA_QUANTIDADES_MACRO( $\underline{\theta}_{n-1}^l, elem, pi$ ) .▷ Algoritmo 6
7:     se  $reg = .verdadeiro$ . então
8:       ESCREVA_RESTART_MICRO( $\underline{\theta}_{n-1}^l, t, elem, pi$ ) .....▷ Algoritmo 10
9:     fim se
10:    Defina  $\underline{\theta}^l$ :  $\underline{\theta}^l \leftarrow \underline{\theta}_{n-1}^l$ .
        ▷ Para utilização na chamada da subrotina Escreva_Saida_Micro.
11:   senão
12:     LEIA_RESTART_MICRO( $\underline{\theta}_{n-1}^l, elem, pi$ ) .....▷ Algoritmo 13
13:     Inicialize o vetor temperatura microscópico:  $\underline{\theta}^l \leftarrow \underline{\theta}^{\prime l}$ .
14:     RESOLVA_SISTEMA_NAO_LINEAR_MICRO( $\underline{\theta}^l, \underline{\theta}_{n-1}^l, t, \underline{\mathbb{A}}, \underline{\mathbb{C}}, \underline{\mathbb{K}}, \underline{\mathbb{Q}}, \underline{\mathbb{Y}}$ )
        .....▷ Algoritmo 16
15:     COMPUTE_E_ESCREVA_QUANTIDADES_MACRO( $\underline{\theta}^l, elem, pi$ ) ...▷ Algoritmo 6
16:     Compute  $\hat{\underline{\theta}}^{\prime}$ . .....▷ (5.86)
17:     Compute  $\hat{\underline{\theta}}_1$ . .....▷ (5.89)
18:     COMPUTE_SENSIBILIDADES( $\underline{\mathbb{A}}, \underline{\mathbb{C}}, \underline{\mathbb{K}}, \underline{\mathbb{Q}}, \underline{\mathbb{Y}}, \hat{\underline{\theta}}^{\prime}, \hat{\underline{\theta}}_1, \hat{\underline{\theta}}_{\theta}^{\sim}, \hat{\underline{\theta}}_{\mathbf{g}}^{\sim}$ ) ...▷ Algoritmo 9
19:     COMPUTE_E_ESCREVA_OPERADORES_TANGENTES( $\underline{\mathbb{C}}, \underline{\mathbb{K}}, \underline{\mathbb{Q}}, \underline{\mathbb{Y}}, \hat{\underline{\theta}}^{\prime}, \hat{\underline{\theta}}_1, \hat{\underline{\theta}}_{\theta}^{\sim},$ 
         $\hat{\underline{\theta}}_{\mathbf{g}}^{\sim}, elem, pi$ ) .....▷ Algoritmo 5
20:     se  $reg = .verdadeiro$ . então
21:       ESCREVA_RESTART_MICRO( $\underline{\theta}^l, t, elem, pi$ ) .....▷ Algoritmo 10
22:     fim se
23:   fim se
24:   se  $reg = .verdadeiro$ . então
25:     ESCREVA_SAIDA_MICRO( $\underline{\theta}^l, t$ ) .....▷ Algoritmo 12
26:   fim se
27: fim programa

```

Algoritmo 3 Subrotina Atualize_Variaveis_Ponto_Integracao_Macro

```

1: procedimento ATUALIZE_VARIAVEIS_PONTO_INTEGRACAO_MACRO( )
2:   para  $elem \leftarrow 1, N_{elem}$  faça
        ▷  $N_{elem}$  é o número de elementos finitos da malha macroscópica.
3:     para  $pi \leftarrow 1, N_{pi}$  faça
        ▷  $N_{pi}$  é o número de pontos de integração em cada elemento da malha macroscópica.
4:       atualize as variáveis do ponto de integração  $pi$  do elemento  $elem$  a partir da leitura
        das informações contidas no arquivo  $micro\_<elem>\_<pi>$ .
5:     fim para
6:   fim para
7: fim procedimento

```

Algoritmo 4 Subrotina Atualize_Variaveis_Ponto_Integracao_Micro

- 1: **procedimento** ATUALIZE_VARIAVEIS_PONTO_INTEGRACAO_MICRO($\underline{\theta}^l, t$)
 - 2: **para** $i \leftarrow 1, n_{elem}$ **faça**
 - ▷ n_{elem} é o número de elementos finitos da malha microscópica.
 - 3: **para** $j \leftarrow 1, n_{pi}$ **faça**
 - ▷ n_{pi} é o número de pontos de integração em cada elemento da malha microscópica.
 - 4: Compute e atualize as variáveis associadas a este ponto de integração.
 - 5: **fim para**
 - 6: **fim para**
 - 7: **fim procedimento**
-

Algoritmo 5 Subrotina Compute_E_Escreva_Operadores_Tangentes

- 1: **procedimento** COMPUTE_E_ESCREVA_OPERADORES_TANGENTES($\underline{\mathbb{C}}, \underline{\mathbb{K}}, \underline{\mathbb{Q}}, \underline{\mathbb{Y}}, \hat{\underline{\theta}}^l, \hat{\underline{\theta}}_1, \hat{\underline{\theta}}_{\bar{g}}, \hat{\underline{\theta}}_{\bar{g}}, elem, pi$)
 - 2: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{B}}}$ ▷ (5.95)
 - 3: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{C}}}$ ▷ (5.96)
 - 4: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{B}}}$ ▷ (5.97)
 - 5: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{C}}}$ ▷ (5.98)
 - 6: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{D}}}$ ▷ (5.99)
 - 7: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{E}}}$ ▷ (5.100)
 - 8: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{D}}}$ ▷ (5.101)
 - 9: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{E}}}$ ▷ (5.102)
 - 10: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{Y}}}$ ▷ (5.103)
 - 11: Compute o operador tangente $\hat{\underline{\mathbb{K}}}$ ▷ (5.104)
 - 12: Escreva os operadores tangentes no arquivo micro_<elem>_<pi>.
 - 13: **fim procedimento**
-

Algoritmo 6 Subrotina Compute_E_Escreva_Quantidades_Macro

- 1: **procedimento** COMPUTE_E_ESCREVA_QUANTIDADES_MACRO($\underline{\theta}^l, elem, pi$)
 - 2: Compute o fluxo de calor macroscópico, $\bar{\mathbf{q}}$ ▷ (4.80)
 - 3: Compute a densidade de energia interna macroscópica, $\bar{\phi}$ ▷ (4.81)
 - 4: Compute a densidade de energia interna macroscópica ponderada, $\bar{\Phi}$ ▷ (4.82)
 - 5: Compute a densidade de fornecimento de calor macroscópica, \bar{r} ▷ (4.83)
 - 6: Compute a densidade de fornecimento de calor macroscópica ponderada, $\bar{\mathbf{r}}$ ▷ (4.84)
 - 7: Compute o fluxo de calor macroscópico normal prescrito, \bar{q} ▷ (4.103)
 - 8: Escreva as quantidades macroscópicas no arquivo micro_<elem>_<pi>.
 - 9: **fim procedimento**
-

Algoritmo 7 Subrotina Compute_Matriz_Tangente_Macro

- 1: **procedimento** COMPUTE_MATRIZ_TANGENTE_MACRO($\underline{\theta}^l, \Delta t, \underline{\underline{A}}^{l,l}$)
 - 2: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{B}}$ \triangleright (5.113)
 \triangleright Nesta, e em cada uma das matrizes tangentes computadas, a informação do operador tangente correspondente é lida no arquivo micro_<elem>_<pi>.
 - 3: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{C}}$ \triangleright (5.114)
 - 4: Compute a matriz tangente $\hat{\underline{\underline{B}}}$ \triangleright (5.115)
 - 5: Compute a matriz tangente $\hat{\underline{\underline{C}}}$ \triangleright (5.116)
 - 6: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{D}}$ \triangleright (5.117)
 - 7: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{E}}$ \triangleright (5.118)
 - 8: Compute a matriz tangente $\hat{\underline{\underline{D}}}$ \triangleright (5.119)
 - 9: Compute a matriz tangente $\hat{\underline{\underline{E}}}$ \triangleright (5.120)
 - 10: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{Y}}$ \triangleright (5.121)
 - 11: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{K}}$ \triangleright (5.122)
 - 12: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{A}}^{l,l}$ \triangleright (5.124)
 - 13: **fim procedimento**
-

Algoritmo 8 Subrotina Compute_Matrizes_Tangentes_Micro

- 1: **procedimento** COMPUTE_MATRIZES_TANGENTES_MICRO($\underline{\theta}^l, \Delta t, \underline{\underline{A}}, \underline{\underline{C}}, \underline{\underline{K}}, \underline{\underline{Q}}, \underline{\underline{Y}}$)
 - 2: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{C}}$ \triangleright (5.71)
 - 3: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{Q}}$ \triangleright (5.72)
 - 4: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{Y}}$ \triangleright (5.73)
 - 5: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{K}}$ \triangleright (5.74)
 - 6: **se** considera-se $\text{div } \mathbf{q} = 0$ na microescala **então**
 - 7: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{A}}$ reduzida. \triangleright (5.78)
 - 8: **senão**
 - 9: Compute a matriz tangente $\underline{\underline{A}}$ completa. \triangleright (5.76)
 - 10: **fim se**
 - 11: **fim procedimento**
-

Algoritmo 9 Subrotina Compute_Sensibilidades

- 1: **procedimento** COMPUTE_SENSIBILIDADES($\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{C}}, \underline{\underline{K}}, \underline{\underline{Q}}, \underline{\underline{Y}}, \hat{\underline{\theta}}^l, \hat{\underline{\theta}}_1, \hat{\underline{\theta}}_{\tilde{\theta}}, \hat{\underline{\theta}}_{\tilde{\mathbf{g}}}$)
 - 2: **se** considera-se $\text{div } \mathbf{q} = 0$ na microescala **então**
 - 3: Compute a sensibilidade $\hat{\underline{\theta}}_{\tilde{\theta}}$ reduzida. \triangleright (5.83), (5.93)
 - 4: **senão**
 - 5: Compute a sensibilidade $\hat{\underline{\theta}}_{\tilde{\theta}}$ completa. \triangleright (5.83), (5.92)
 - 6: **fim se**
 - 7: Compute a sensibilidade $\hat{\underline{\theta}}_{\tilde{\mathbf{g}}}$ \triangleright (5.80), (5.94)
 - 8: **fim procedimento**
-

Algoritmo 10 Subrotina Escreva_Restart_Micro

- 1: **procedimento** ESCREVA_RESTART_MICRO($\underline{\theta}^l, t, elem, pi$)
 - 2: Escreva t , $\underline{\theta}$ e as variáveis associadas a cada ponto de integração no arquivo restart_micro_<elem>_<pi>.
 - 3: **fim procedimento**
-

Algoritmo 11 Subrotina Escreva_Saida_Macro

- 1: **procedimento** ESCREVA_SAIDA_MACRO($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, t$)
 - 2: Escreva o tempo, a temperatura, etc., em um arquivo para pós-processamento.
 - 3: **fim procedimento**
-

Algoritmo 12 Subrotina Escreva_Saida_Micro

- 1: **procedimento** ESCREVA_SAIDA_MICRO($\boldsymbol{\theta}^l, t$)
 - 2: Escreva temperatura, fluxo de calor, etc., em um arquivo para pós-processamento.
 - 3: **fim procedimento**
-

Algoritmo 13 Subrotina Leia_Restart_Micro

- 1: **procedimento** LEIA_RESTART_MICRO($\boldsymbol{\theta}_{n-1}^l, elem, pi$)
 - 2: Leia a temperatura do arquivo restart_micro_<elem>_<pi>: $\boldsymbol{\theta}_{n-1}^l$.
 - 3: **para** $i \leftarrow 1, n_{elem}$ **faça**
 - 4: **para** $j \leftarrow 1, n_{pi}$ **faça**
 - 5: Armazene as variáveis deste ponto de integração, lendo-as do arquivo restart_micro_<elem>_<pi>.
 - 6: **fim para**
 - 7: **fim para**
 - 8: **fim procedimento**
-

Algoritmo 14 Subrotina Resolva_Problema_Micro

- 1: **procedimento** RESOLVA_PROBLEMA_MICRO($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, t, \Delta t, reg$)
 - 2: **para** $elem \leftarrow 1, N_{elem}$ **faça**
 - 3: **para** $pi \leftarrow 1, N_{pi}$ **faça**
 - 4: Compute a temperatura no ponto de integração: $\bar{\boldsymbol{\theta}}^h$ ▷ (5.108)
 - 5: Compute o gradiente de temperatura no ponto de integração: $\bar{\mathbf{g}}^h$ ▷ (5.112)
 - 6: CONDUCAO_CALOR_MICRO($t, \Delta t, \bar{\boldsymbol{\theta}}^h, \bar{\mathbf{g}}^h, elem, pi, reg$) ▷ Algoritmo 2
 - 7: **fim para**
 - 8: **fim para**
 - 9: **fim procedimento**
-

Algoritmo 15 Subrotina Resolva_Sistema_Nao_Linear_Macro

- 1: **procedimento** RESOLVA_SISTEMA_NAO_LINEAR_MACRO($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, \bar{\boldsymbol{\theta}}_{n-1}^l, t$)
 - 2: **para** $K = 1, K_{m\acute{a}x}$ **faça**
 - 3: RESOLVA_PROBLEMA_MICRO($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, t, \Delta t, .falso.$)▷ Algoritmo 14
 - 4: Compute o vetor resíduo macroscópico: $\bar{\mathbf{r}}^l$▷ (5.125)
 - ▷ Para o cômputo do vetor resíduo macroscópico, as grandezas associadas ao ponto de integração pi do elemento $elem$ são lidas no arquivo `micro_<elem>_<pi>`, advindo da microescala.
 - 5: Compute o erro no vetor resíduo macroscópico: $e_{\bar{\mathbf{r}}} \leftarrow \|\bar{\mathbf{r}}^l\|_{\infty}$.
 - 6: **se** $e_{\bar{\mathbf{r}}} \leq tol_{\bar{\mathbf{r}}}$ **então**
 - 7: Saia do laço.
 - 8: **fim se**
 - 9: COMPUTE_MATRIZ_TANGENTE_MACRO($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, \Delta t, \bar{\underline{\underline{\mathbf{A}}}}^{l,l}$)▷ Algoritmo 7
 - ▷ Para o cômputo da matriz tangente macroscópica, os operadores tangentes são lidos nos arquivos `micro_<elem>_<pi>`, advindos da microescala.
 - 10: Resolva o sistema $\bar{\underline{\underline{\mathbf{A}}}}^{l,l} d\bar{\boldsymbol{\theta}}^l = -\bar{\mathbf{r}}^l$ para $d\bar{\boldsymbol{\theta}}^l$▷ (5.123)
 - 11: Atualize o vetor temperatura macroscópico: $\bar{\boldsymbol{\theta}}^l \leftarrow \bar{\boldsymbol{\theta}}^l + d\bar{\boldsymbol{\theta}}^l$.
 - 12: **fim para**
 - 13: RESOLVA_PROBLEMA_MICRO($\bar{\boldsymbol{\theta}}^l, t, \Delta t, .verdadeiro.$)▷ Algoritmo 14
 - ▷ Após a solução do problema microscópico, deve-se gerar os arquivos de *restart* e de pós-processamento; por isso o valor `.verdadeiro.` para a variável muda reg.
 - 14: ATUALIZE_VARIAVEIS_PONTO_INTEGRACAO_MACRO()▷ Algoritmo 3
 - ▷ As variáveis associadas a cada ponto de integração são atualizadas a partir das informações dos arquivos `micro_<elem>_<pi>`, advindos da microescala.
 - 15: **fim procedimento**
-

Algoritmo 16 Subrotina Resolva_Sistema_Nao_Linear_Micro

```

1: procedimento RESOLVA_SISTEMA_NAO_LINEAR_MICRO( $\underline{\theta}^l$ ,  $\underline{\theta}_{n-1}^l$ ,  $t$ ,  $\underline{\underline{A}}$ ,  $\underline{\underline{C}}$ ,  $\underline{\underline{K}}$ ,  $\underline{\underline{Q}}$ ,
    $\underline{\underline{Y}}$ )
2:   para  $k = 1, k_{m\acute{a}x}$  faça
3:     se considera-se  $\text{div } \mathbf{q} = 0$  na microescala então
4:       Compute o vetor resíduo microscópico reduzido:  $\underline{\mathbf{r}}^l$ . .....▷ (5.79)
5:     senão
6:       Compute o vetor resíduo microscópico completo:  $\underline{\mathbf{r}}^l$ . .....▷ (5.77)
7:     fim se
8:     Compute o erro no vetor resíduo microscópico:  $e_{\mathbf{r}} \leftarrow \|\underline{\mathbf{r}}^l\|_{\infty} |\square|$ .
       ▷ Achou-se conveniente multiplicar o erro no resíduo pelo volume do EVR, de forma
       a manter consistência com o cálculo do erro do resíduo na solução do problema
       convencional (uma única escala) pelo método dos elementos finitos.
9:     se  $e_{\mathbf{r}} \leq \text{tol}_{\mathbf{r}}$  então
10:      Saia do laço.
11:    fim se
12:    COMPUTE_MATRIZES_TANGENTES_MICRO( $\underline{\theta}^l$ ,  $\Delta t$ ,  $\underline{\underline{A}}$ ,  $\underline{\underline{C}}$ ,  $\underline{\underline{K}}$ ,  $\underline{\underline{Q}}$ ,  $\underline{\underline{Y}}$ )
       .....▷ Algoritmo 8
13:    Resolva o sistema  $\underline{\underline{A}}^{l,l} d\underline{\theta}^l = -\underline{\mathbf{r}}^l$  para  $d\underline{\theta}^l$ . .....▷ (5.75)
14:    Atualize o vetor temperatura microscópico:  $\underline{\theta}^l \leftarrow \underline{\theta}^l + d\underline{\theta}^l$ .
15:  fim para
16:  COMPUTE_MATRIZES_TANGENTES_MICRO( $\underline{\theta}^l$ ,  $\Delta t$ ,  $\underline{\underline{A}}$ ,  $\underline{\underline{C}}$ ,  $\underline{\underline{K}}$ ,  $\underline{\underline{Q}}$ ,  $\underline{\underline{Y}}$ ) ▷ Algoritmo 8
17:  ATUALIZE_VARIAVEIS_PONTO_INTEGRACAO_MICRO( $\underline{\theta}^l$ ,  $t$ ) .....▷ Algoritmo 4
18: fim procedimento

```

5.10.1 Oscilações espúrias devidas a um passo de tempo inadequado

É importante mencionar possíveis problemas relacionados à escolha do passo de tempo utilizado na solução do problema transiente. Para determinados esquemas de integração no tempo existe um valor máximo para o incremento de tempo, $\Delta t_{m\acute{a}x}$, acima do qual a solução torna-se instável. Esse não é o caso para o esquema de integração *backward Euler*, utilizado neste trabalho, o qual é *incondicionalmente estável*. Porém, quando o passo de tempo é reduzido para uma malha com tamanho fixo, oscilações espaciais espúrias podem poluir a solução para valores pequenos de passo de tempo. Como um exemplo de tal situação, a Fig. 5.1 apresenta a temperatura⁶ em $x = 0,6L_p$ para uma placa $0 < x < L_p$, sem geração de calor, com fluxo nulo em $x = 0$, temperatura nula em $x = L_p$ e temperatura inicial igual a θ_0 . A solução foi computada por Harari, 2004, com 5 elementos lineares iguais e utilizou-se o esquema de integração no tempo *backward Euler*, o mesmo utilizado nesta tese, com um passo de tempo pequeno. Dadas as condições inicial e de contorno do problema descrito, o valor extremo da temperatura deve ocorrer em $t = 0$ e, portanto, a solução obtida contém oscilações espaciais espúrias para instantes iniciais de tempo.

Conforme esperado, bem como observado em simulações realizadas neste trabalho,

⁶Nesta subseção, as grandezas dizem respeito a uma única escala.

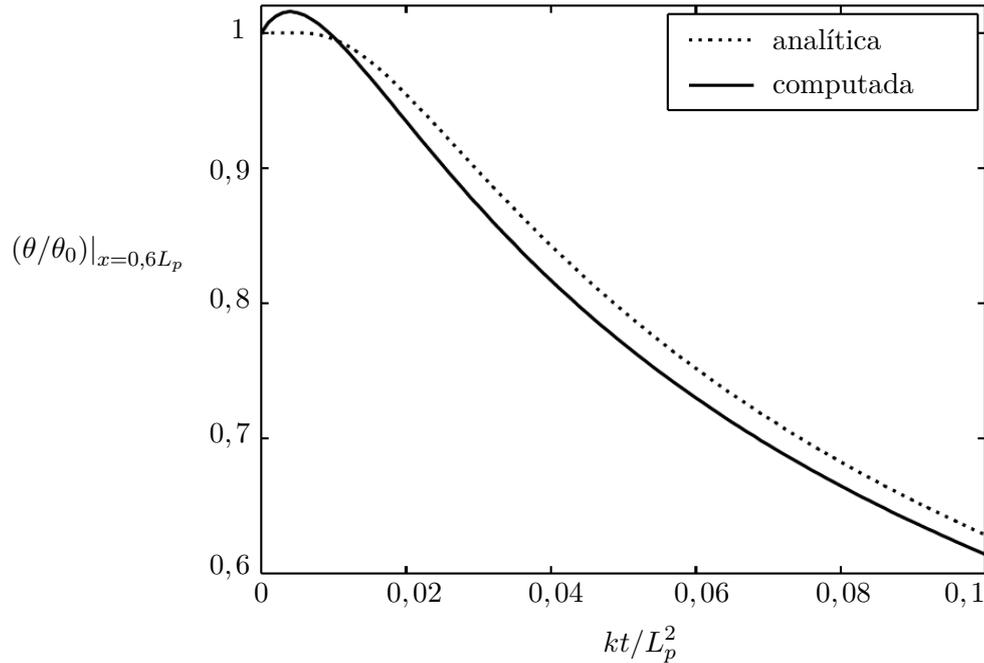


Figura 5.1 – Temperatura θ normalizada pela temperatura inicial θ_0 em $x = 0,6L_p$ para uma placa $0 < x < L_p$, sem geração de calor, com fluxo nulo em $x = 0$ e temperatura nula em $x = L_p$. A solução foi computada com 5 elementos lineares iguais e utilizou-se o esquema de integração no tempo de *backward Euler* com um passo de tempo de $0,025h^2/k$, onde h é o tamanho do elemento e k é a difusividade térmica. A solução analítica também está apresentada. Adaptado de Harari, 2004.

as oscilações espúrias também podem ocorrer para a solução do problema multiescala. Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos com um passo de tempo definido manualmente de forma que tais oscilações não estivessem presentes.

5.10.2 Paralelização

Com o objetivo de reduzir o tempo de solução dos problemas, o laço que inicia na linha 3 do Algoritmo 14 foi paralelizado. Isso significa que dentro de um elemento finito macroscópico, os problemas da microescala associados a cada ponto de integração desse elemento são resolvidos simultaneamente. Naturalmente, a quantidade de problemas da microescala que são resolvidos simultaneamente é limitada pelo número de núcleos do processador utilizado. No caso deste trabalho, utilizou-se um processador com 8 núcleos, o que significa que no máximo 8 problemas associados à microescala são resolvidos simultaneamente. A paralelização foi realizada por meio da Interface de Programação de Aplicativos (API, do inglês *Application Programming Interface*) OpenMP.

6 VERIFICAÇÃO DO MODELO MULTIESCALA

Este capítulo tem como proposta a verificação do modelo multiescala. É importante ressaltar que por verificar o modelo entende-se avaliar:

1. se em casos especiais, simples, ele reproduz a solução esperada;
2. se ele de fato captura os efeitos de inércia térmica, e quando eles são importantes.

Na parte inicial deste capítulo o modelo multiescala será aplicado a materiais homogêneos. Na Seção 6.1, propõe-se um problema linear transiente bastante simples, de solução conhecida na macroescala. O resultado do procedimento multiescala é também comparado com a solução convencional (uma única escala) obtida pelo método de elementos finitos¹. Na Seção 6.2, um problema semelhante ao anterior é apresentado. A diferença é que o problema é não-linear, isto é, algumas propriedades são dependentes da temperatura. Comparações entre as soluções fornecidas pelo método multiescala FE² e pelo método de elementos finitos convencional são apresentadas. Na Seção 6.3 é proposta a análise da solução de um problema de condução de calor transiente linear com geração de calor. No modelo multiescala a geração é dada no EVR homogêneo, enquanto no método de elementos finitos convencional ela é incorporada de forma convencional pelo termo de geração na forma fraca.

Na Seção 6.4 é proposta a análise da influência da inércia térmica da microescala. Para tanto, uma microescala heterogênea é modelada. São analisados casos variando a difusividade térmica da matriz e da carga, e também o tamanho do EVR. Ainda, nessa seção é proposta a análise de um problema com geração de calor considerando uma microescala heterogênea com presença de duas fases distintas, onde apenas uma apresenta geração de calor. Em todos os casos são mostradas comparações entre os resultados do modelo multiescala, com e sem a inclusão dos termos de inércia térmica, levando, para o último, a uma modelagem da microescala em regime estacionário. Em especial, a solução completa (isto é, modelando as inclusões diretamente na macroescala) de um problema linear transiente é comparada à solução multiescala, sendo possível analisar o efeito da consideração ou não da influência da inércia térmica da microescala sobre os resultados do modelo.

Para o problema não-linear analisado neste capítulo são apresentadas curvas mostrando a convergência do resíduo macroscópico para alguns instantes de tempo selecionados.

No capítulo seguinte serão realizadas algumas simulações com um elastômero carregado com negro de fumo, com o objetivo de demonstrar a aplicabilidade do modelo,

¹A expressão *solução convencional pelo método dos elementos finitos* será empregada neste trabalho para fazer referência a uma solução para um problema com uma única escala, obtida pelo método dos elementos finitos.

bem como as possibilidades de trabalhos futuros.

6.1 Problema linear de condução de calor

Nesta seção será analisado um problema no qual o EVR é homogêneo. Serão apresentadas as soluções em alguns nós da malha macroscópica, comparando-as com a solução convencional obtida pelo método de elementos finitos. Para esse problema em particular, a solução multiescala macroscópica também será comparada com a solução analítica, uma vez que ela existe.

PROBLEMA 6.1: Trata-se de um problema unidimensional, porém simulado com elementos 2D em estado plano. Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq L_p = 1$ homogênea, que inicialmente se encontra a $\bar{\theta} = 0$, tem suas faces $\bar{x}_1 = 0$ e $\bar{x}_1 = 1$ mantidas, respectivamente, a $\bar{\theta} = 0$ e $\bar{\theta} = 100$ para $t > 0$ (veja a Fig. 6.1a). O corpo macroscópico é discretizado conforme a Fig. 6.1b, na qual estão descritas as condições de contorno aplicadas sobre a malha de elementos finitos. No que diz respeito à microescala, cada EVR é um quadrado de lado 0,002, conforme a Fig. 6.1c. As características das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 6.1, bem como as propriedades físicas do constituinte. O passo de tempo utilizado está descrito a seguir.

Considerando-se uma solução convencional por elementos finitos desse problema, o uso de elementos quadrilaterais bilineares de 4 nós, de lado h , implica na necessidade de utilizar-se um passo de tempo [Thomas e Zhou, 1997]

$$\Delta t \geq \frac{h^2}{2k} = 0,0003125, \quad (6.1)$$

para evitar oscilações espaciais espúrias, sendo

$$k := \frac{\kappa}{\rho c} \quad (6.2)$$

a difusividade térmica do material. Tanto para a solução do problema multiescala quanto para a solução convencional por elementos finitos, descrita mais adiante, utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 0,0004$.

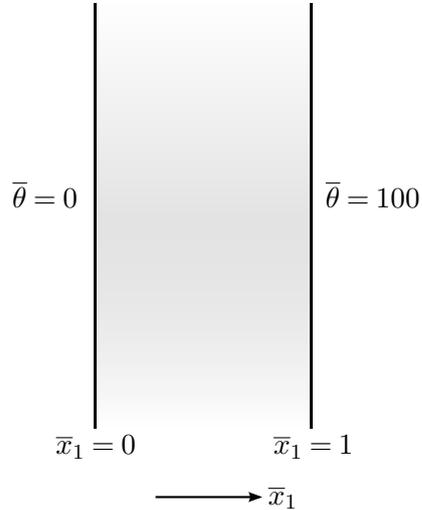
A solução analítica desse problema [Carslaw e Jaeger, 1959, pg. 310], na notação desta tese, pode ser escrita como

$$\bar{\theta}(\bar{x}_1, t) = \theta|_{\bar{x}_1=L_p} \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{(2m+1)L_p - \bar{x}_1}{2\sqrt{kt}} \right] - \operatorname{erfc} \left[\frac{(2m+1)L_p + \bar{x}_1}{2\sqrt{kt}} \right] \right\}, \quad (6.3)$$

onde

$$\operatorname{erfc}(\varphi) := 1 - \operatorname{erf}(\varphi) \quad (6.4)$$

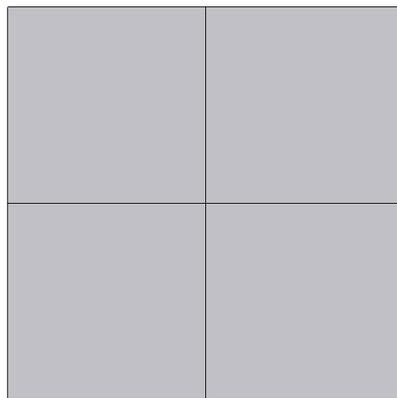
é a função erro complementar e



(a) Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq L_p = 1$ homogênea, com temperatura inicial nula, é submetida às condições de contorno apresentadas acima.



(b) Malha macroscópica, definida no domínio $\bar{x}_1 = [0, 1]$ e $\bar{x}_2 = [0, 0,05]$. As condições de contorno nas faces verticais estão indicadas em (a), enquanto nas faces horizontais prescreve-se $\bar{q} = 0$, dado o caráter unidimensional do problema.



(c) Malha do EVR.

Figura 6.1 – Representação esquemática e malhas do corpo macroscópico e do elemento de volume representativo para o Problema 6.1.

Tabela 6.1 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.1

Grandeza	Macroescala	Microescala
c	—	0,5
ρ	—	0,5
κ	—	$\mathbf{1}^a$
Elementos	20 Quad4 ^b	4 Quad4 ^b
Nós	42	9

^a $\mathbf{1}$ é a identidade.

^b Quad4: Quadrilateral bilinear de 4 nós.

$$\operatorname{erf}(\varphi) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\varphi e^{-\omega^2} d\omega, \quad (6.5)$$

por sua vez, é a função erro. Para a obtenção da solução analítica aproximada, m foi variado de 0 a 1000.

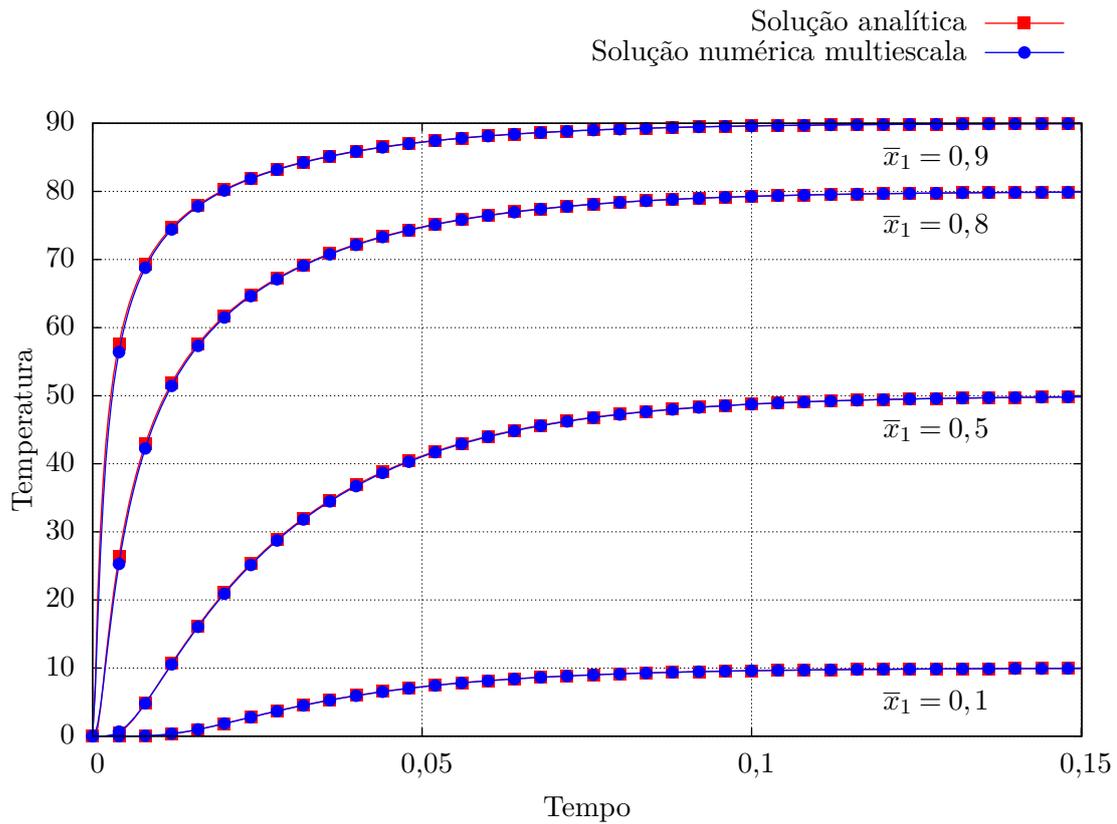
A comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução analítica pode ser observada na Fig. 6.2. A concordância entre as soluções é excelente, exceto quando o gradiente de temperatura é elevado, o que ocorre, por exemplo, para os instantes iniciais em $\bar{x}_1 = 0,9$ (veja a Fig. 6.2b).

Uma solução convencional pelo método dos elementos finitos também foi obtida. Nessa solução, há apenas uma escala, discretizada de maneira idêntica à discretização da macroescala e na qual estão definidas diretamente as propriedades do material. A solução desse problema é virtualmente igual à solução multiescala, e ambas as soluções estão apresentadas na Fig. 6.3. A sobreposição das curvas é um bom indicativo, no que diz respeito tanto ao modelo multiescala quanto à sua implementação.

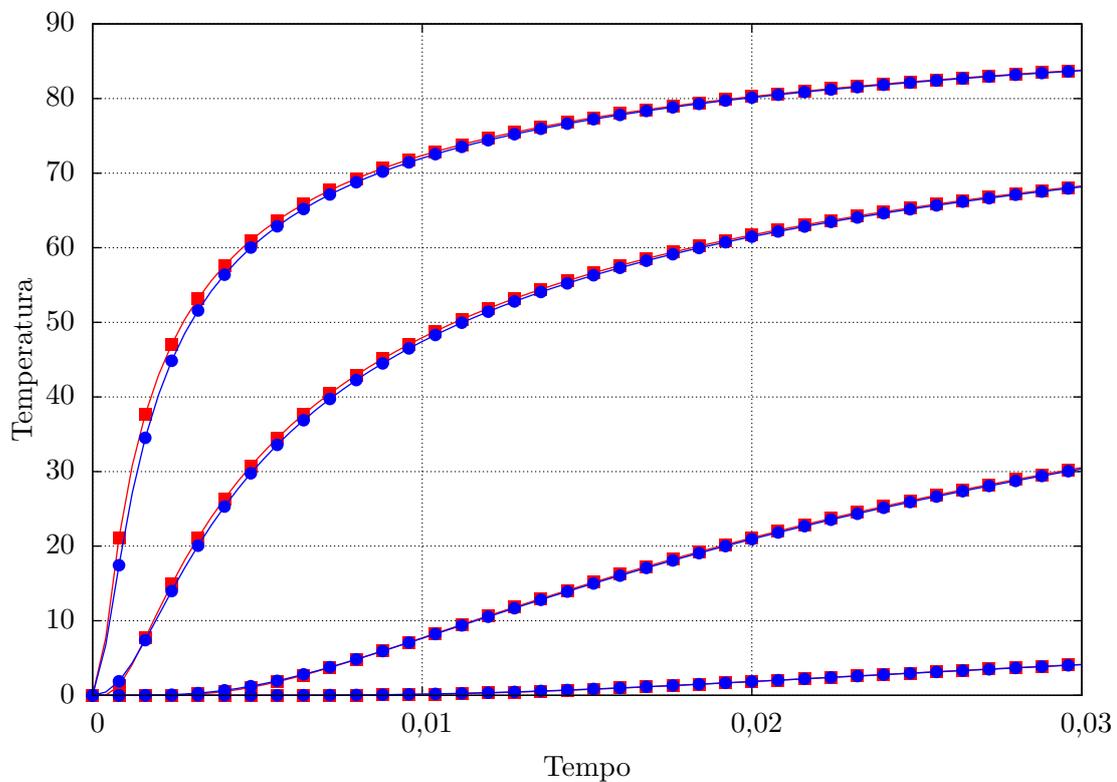
6.2 Problema não-linear de condução de calor

PROBLEMA 6.2: Um problema semelhante ao Problema 6.1 é agora analisado. A diferença entre este problema e o anterior é que agora analisa-se um material não-linear. As malhas da macroescala (bem como as condições de contorno) e da microescala são as mesmas apresentadas na Fig. 6.1, e suas características estão rerepresentadas na Tab. 6.2, que também contém as propriedades do material não-linear em questão. Um passo de tempo $\Delta t = 0,0004$ foi novamente utilizado.

A solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos estão apresentadas na Fig. 6.4 e são virtualmente idênticas. Esse resultado é importante, uma vez que trata-se de um problema não-linear, ou seja, embora as propriedades térmicas variem ao longo do EVR associado a um determinado ponto de integração da malha macroscópica, a resposta macroscópica é igual àquela obtida pela solução convencional, na qual a propriedade é avaliada apenas no ponto de integração. A convergência do

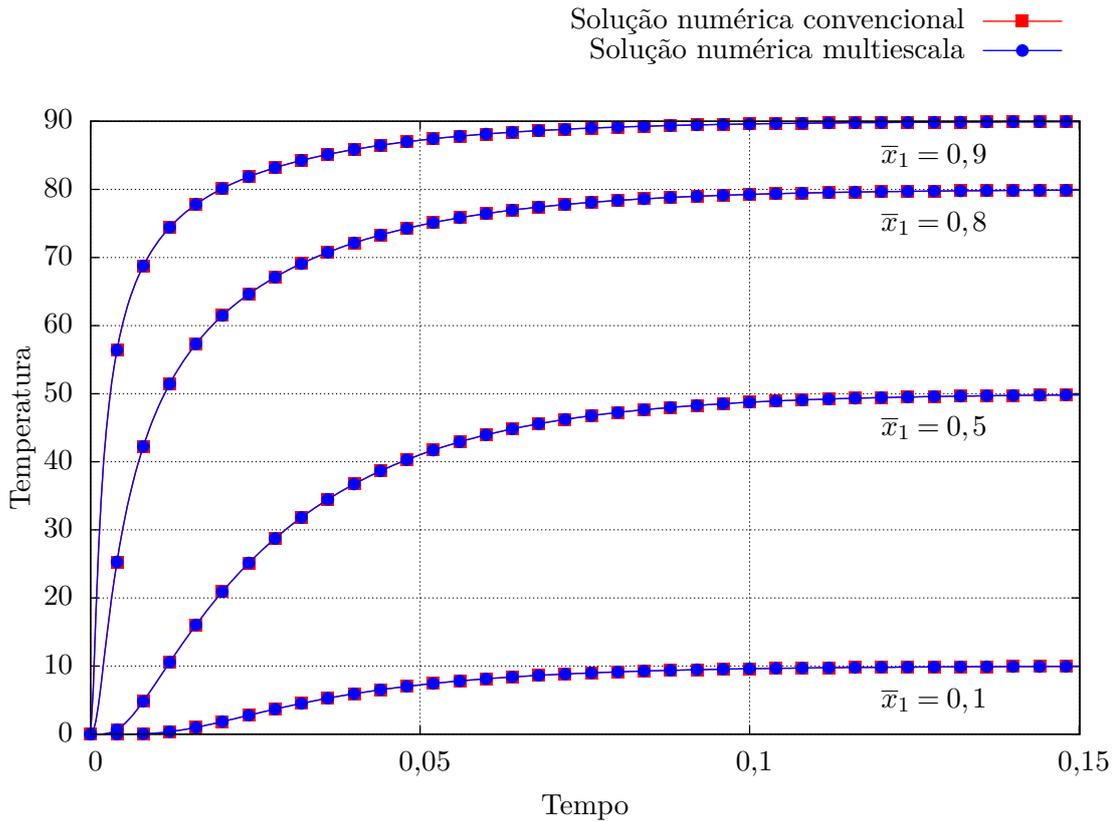


(a) Aquecimento até $t = 0,15$. Apenas 1 a cada 10 pontos está marcado.

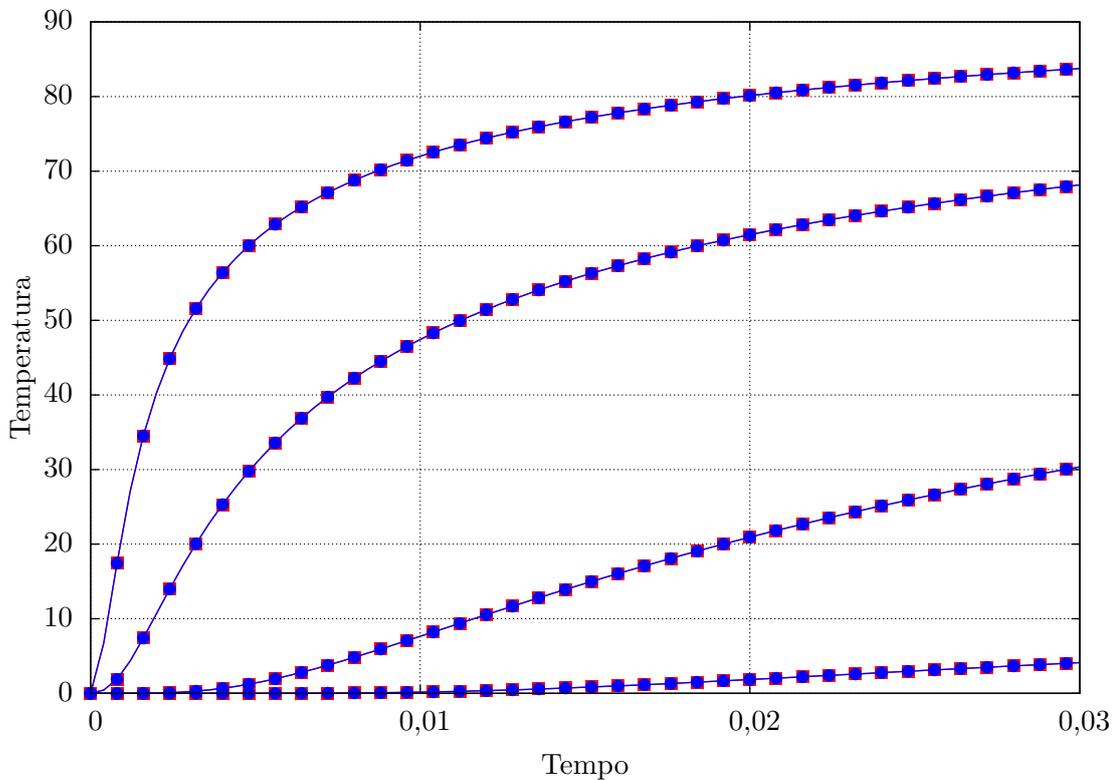


(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico. Apenas 1 a cada 2 pontos está marcado.

Figura 6.2 – Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução analítica para o Problema 6.1.



(a) Aquecimento até $t = 0,15$. Apenas 1 a cada 10 pontos está marcado.



(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico. Apenas 1 a cada 2 pontos está marcado.

Figura 6.3 – Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 6.1.

Tabela 6.2 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.2

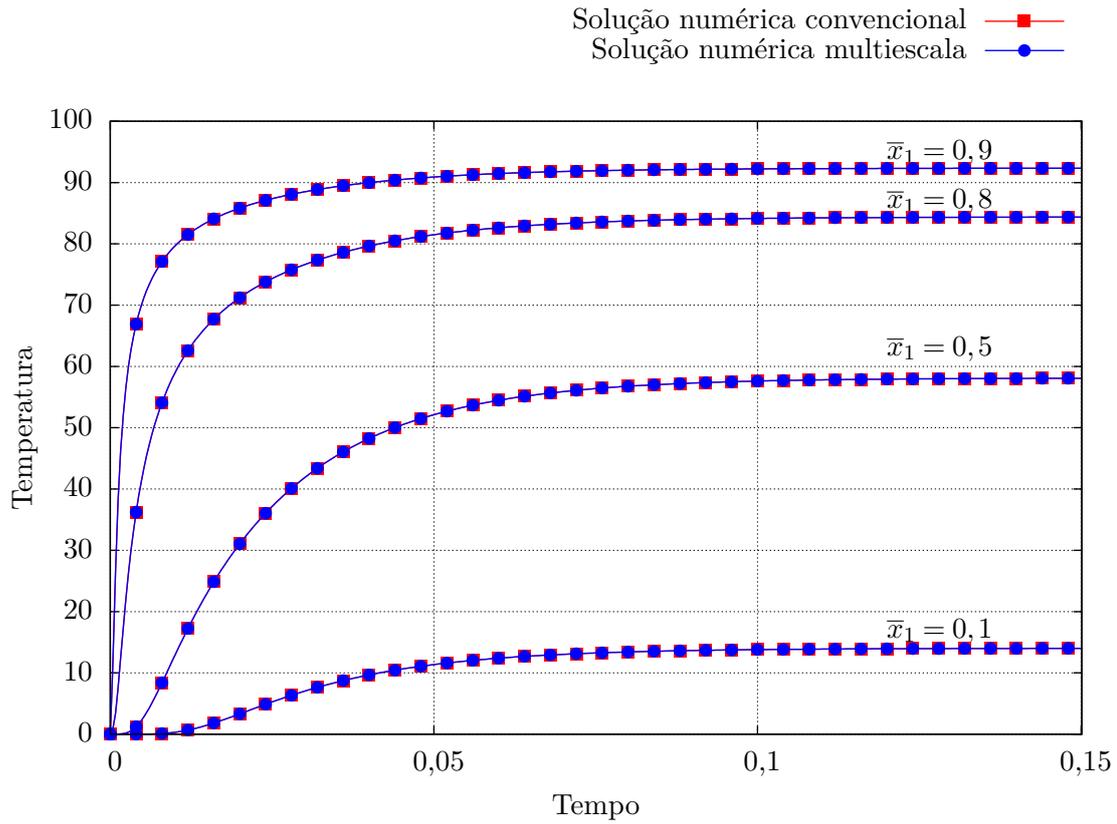
Grandeza	Macroescala	Microescala
c	—	$0,002\theta + 0,5, 0 \leq \theta \leq 100$
ρ	—	0,5
κ	—	$(0,01\theta + 1) \mathbf{1}, 0 \leq \theta \leq 100$
Elementos	20 Quad4	4 Quad4
Nós	42	9

resíduo macroscópico para alguns instantes de tempo selecionados pode ser observada na Fig. 6.5. O bom comportamento do gráfico indica que as matrizes tangentes associadas à macroescala (ao menos aquelas associadas a esse problema em particular) e, portanto, os operadores tangentes macroscópicos, estão bem calculados e implementados. Como os operadores tangentes macroscópicos dependem das matrizes tangentes microscópicas, o mesmo vale para essas também.

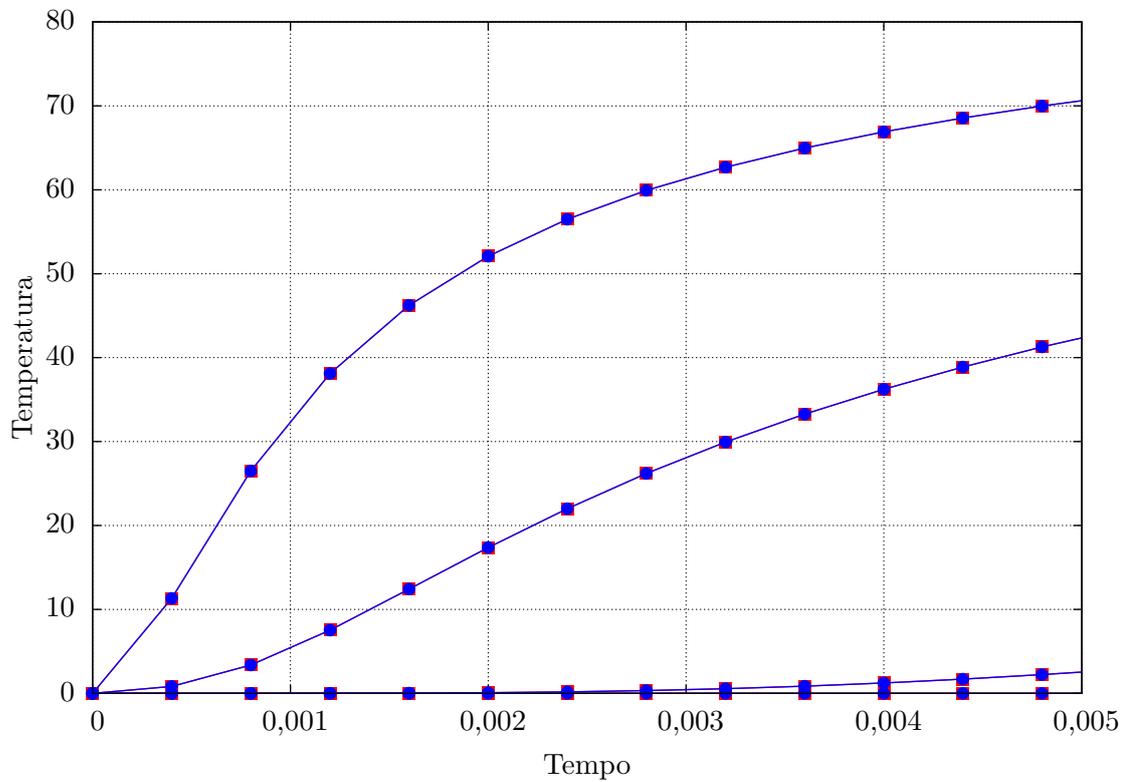
6.3 Problema linear de condução de calor com geração de calor

Para completar a análise de um EVR homogêneo, é proposto agora um problema com geração de calor na microescala. As soluções são apresentadas em alguns nós da malha macroscópica, comparando-as com a solução convencional obtida pelo método de elementos finitos. As soluções serão primeiramente comparadas com a solução analítica, já que ela pode ser encontrada na literatura.

PROBLEMA 6.3: Trata-se, assim como anteriormente, de um problema 1D (veja a Fig. 6.6) simulado com elementos 2D. Uma placa $-L_p \leq \bar{x}_1 \leq L_p$, $L_p = 0,5$, homogênea, que inicialmente se encontra a $\bar{\theta} = 0$, tem suas faces mantidas a $\bar{\theta} = 0$ para $t > 0$ (veja a Fig. 6.6a). Devido à simetria em torno de $\bar{x}_1 = 0$, apenas metade do corpo macroscópico é discretizado para a simulação por elementos finitos, impondo-se, então, a condição de fluxo normal nulo em $\bar{x}_1 = 0$ (veja a Fig. 6.6b). A discretização do corpo macroscópico está apresentada na Fig. 6.6c, na qual as condições de contorno estão descritas. No que diz respeito à microescala, cada EVR é novamente um quadrado de lado 0,002, discretizado de acordo com a Fig. 6.1c. As características das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 6.3, bem como as propriedades físicas do constituinte, que são iguais às do material do Problema 6.1, porém com densidade de fornecimento de calor não-nula e igual a $r = 1$. Para a solução do problema utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 0,001$.



(a) Aquecimento até $t = 0,15$. Apenas 1 a cada 10 pontos está marcado.



(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.4 – Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 6.2.

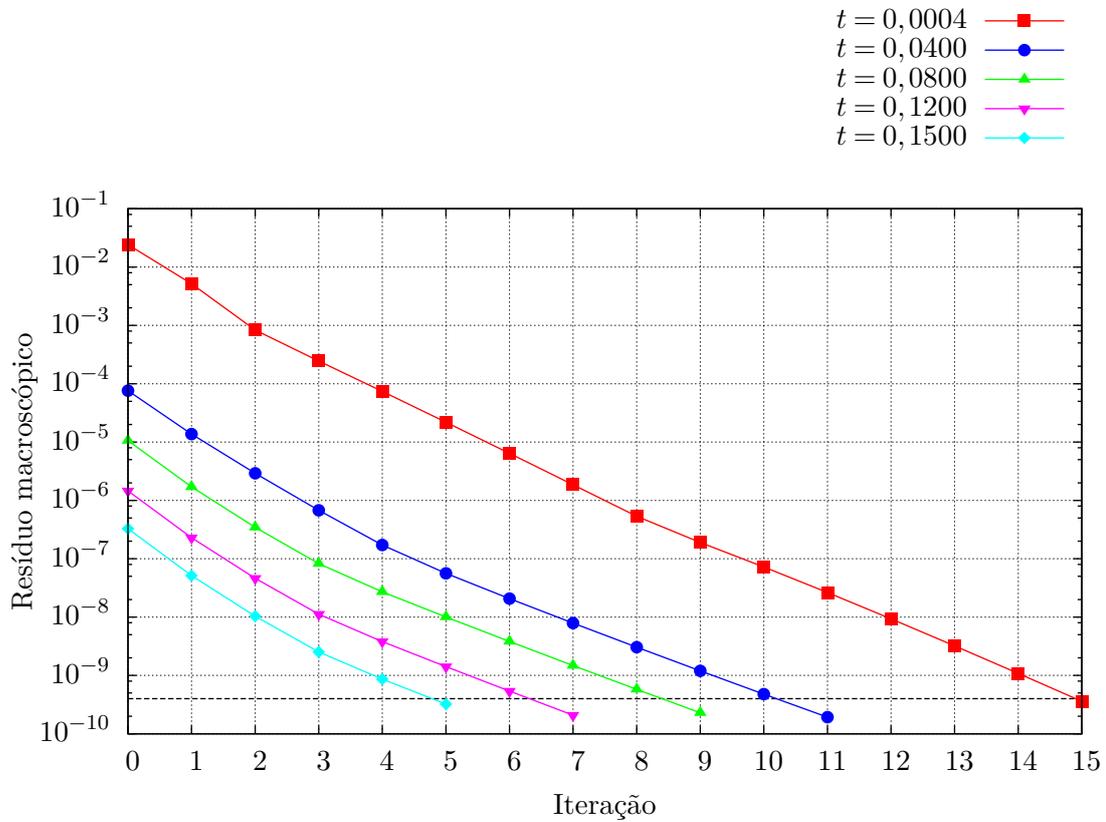
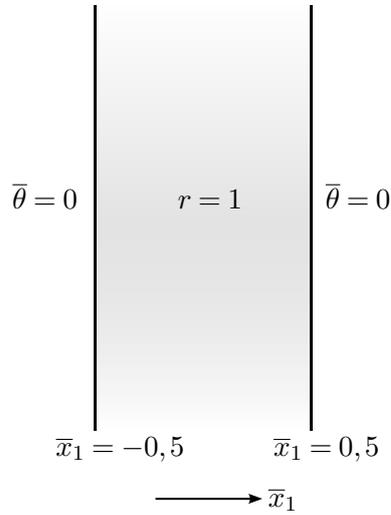


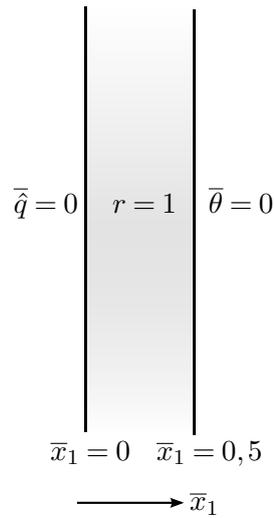
Figura 6.5 – Convergência do resíduo macroscópico para o Problema 6.2 para alguns instantes de tempo selecionados. A tolerância para o erro no vetor resíduo macroscópico é de 4×10^{-10} e está indicada pela linha tracejada.

Tabela 6.3 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.3

Grandeza	Macroescala	Microescala
c	—	0,5
ρ	—	0,5
κ	—	11
r	—	1
Elementos	10 Quad4	4 Quad4
Nós	22	9



(a) Problema original: uma placa $-0,5 \leq \bar{x}_1 \leq 0,5$ homogênea, com temperatura inicial nula e densidade de fornecimento de calor $r = 1$, tem suas faces mantidas a $\bar{\theta} = 0$.



(b) Problema simplificado devido à simetria em $\bar{x}_1 = 0$.



(c) Malha macroscópica, definida no domínio $\bar{x}_1 = [0, 0,5]$ e $\bar{x}_2 = [0, 0,05]$. As condições de contorno nas faces verticais estão indicadas em (b), enquanto nas faces horizontais prescreve-se $\bar{q} = 0$, dado o caráter unidimensional do problema.

Figura 6.6 – Representação esquemática e malha do corpo macroscópico para o Problema 6.3.

A solução analítica desse problema [Carslaw e Jaeger, 1959, pg. 130], na notação do presente trabalho, é expressa por

$$\bar{\theta}(\bar{x}_1, t) = \frac{rL_p^2}{2\kappa} \left\{ 1 - \frac{\bar{x}_1^2}{L_p^2} - \frac{32}{\pi^3} \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-1)^m}{(2m+1)^3} \cos \left[\frac{(2m+1)\pi\bar{x}_1}{2L_p} \right] e^{-k(2m+1)^2\pi^2 t / (4L_p^2)} \right\} \right\}. \quad (6.6)$$

Para a obtenção da solução analítica aproximada, variou-se m de 0 a 1000.

A comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução analítica pode ser observada na Fig. 6.7. A concordância entre as soluções é muito boa. De maneira similar ao realizado para as simulações anteriores, obteve-se uma solução convencional pelo método dos elementos finitos, na qual há apenas uma escala. Nesse problema, a malha é idêntica à malha macroscópica e nela estão definidas diretamente as propriedades do material. A solução desse problema é virtualmente igual à solução multiescala macroscópica, e ambas as soluções estão apresentadas na Fig. 6.8. Novamente, a sobreposição das curvas é um comportamento que indica a correta implementação do modelo multiescala.

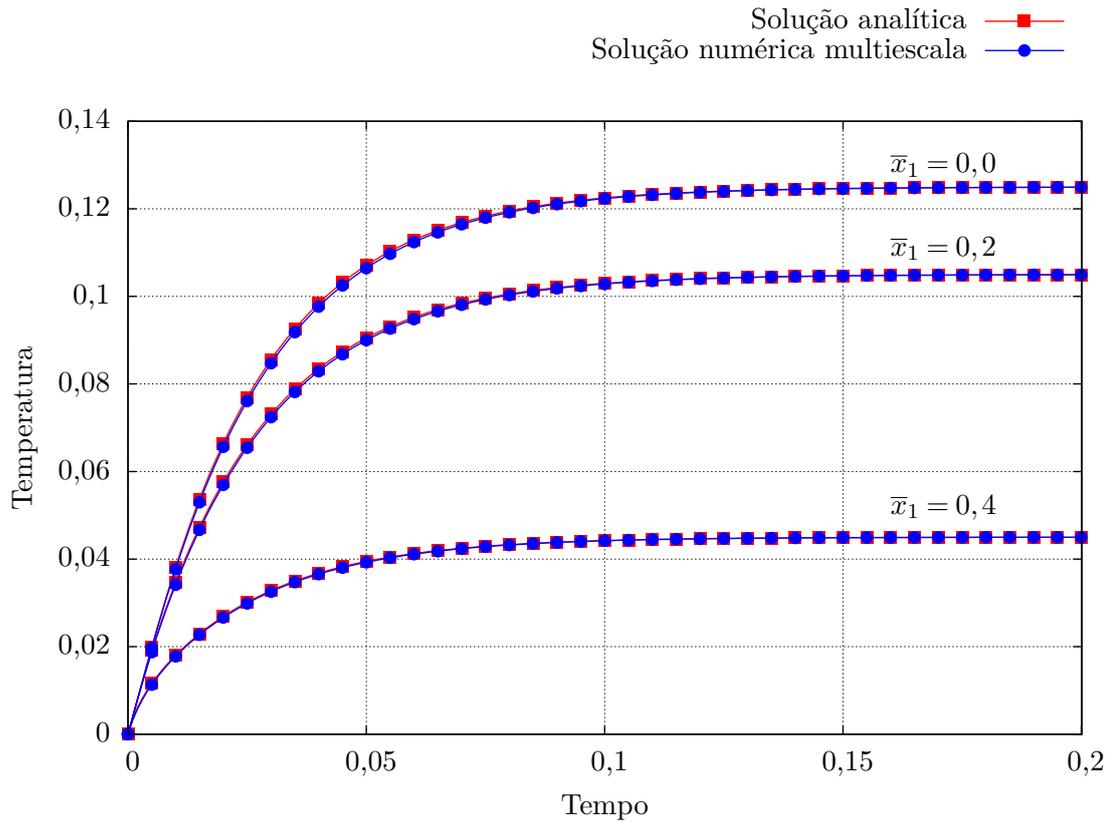
6.4 Influência da inércia térmica da microescala

Nesta seção são estudados alguns casos “limites”, de forma a avaliar a influência da inércia térmica da microescala sobre as soluções macroscópica e microscópica para o problema de condução de calor transiente. Para todas as simulações a microescala será heterogênea.

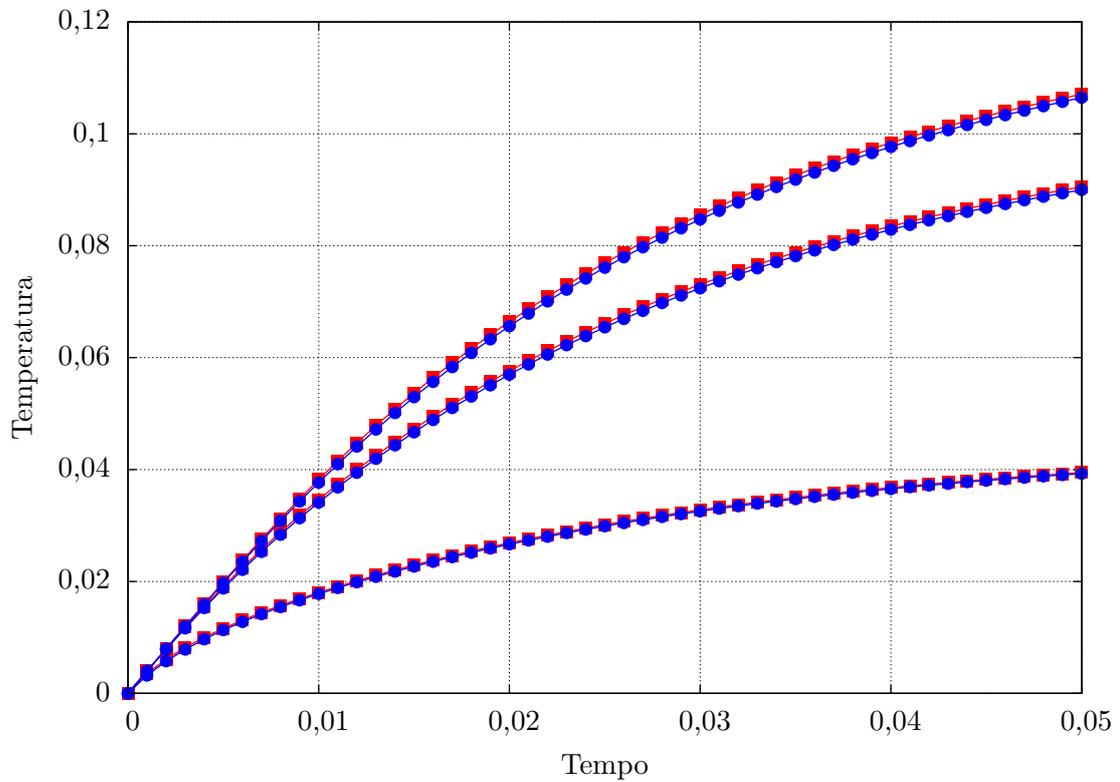
Neste trabalho não são realizadas análises de modo a determinar se um elemento de volume é representativo, embora seja empregado o adjetivo *representativo* (assim como a sigla EVR) ao longo de todo o texto de forma indistinta. A determinação do EVR é uma tarefa relativamente complexa e não está entre os objetivos desta tese. Uma vez que tais análises não serão realizadas, cabe mencionar o trabalho de Jiang *et al.*, 2002. A Fig. 6.9 apresenta os *tipos* de células unitárias empregadas no referido trabalho para extrair a condutividade térmica aparente² de um material periódico. Os autores demonstraram que as propriedades aparentes tendem de forma muito mais rápida para as propriedades efetivas quando utilizam-se janelas que consistem do posicionamento, lado a lado, das células unitárias do tipo (2). Considerando esses resultados, serão utilizados elementos de volume desse tipo.

PROBLEMA 6.4 (MATRIZ COM BAIXA DIFUSIVIDADE TÉRMICA): Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 1$ m heterogênea, que inicialmente se encontra a $\bar{\theta} = 0$ °C, tem suas faces $\bar{x}_1 = 0$ m e $\bar{x}_1 = 1$ m mantidas, respectivamente, a $\bar{\theta} = 0$ °C e $\bar{\theta} = 300$ °C para $t > 0$ (ver Fig. 6.10a). A Fig. 6.10b apresenta a malha macroscópica, bem como a descrição das suas condições de contorno, enquanto o EVR utilizado nas simulações é mostrado na Fig. 6.10c. A Tab. 6.4

²Utiliza-se o termo *aparente* para indicar a propriedade extraída a partir de um elemento de volume possivelmente não representativo.

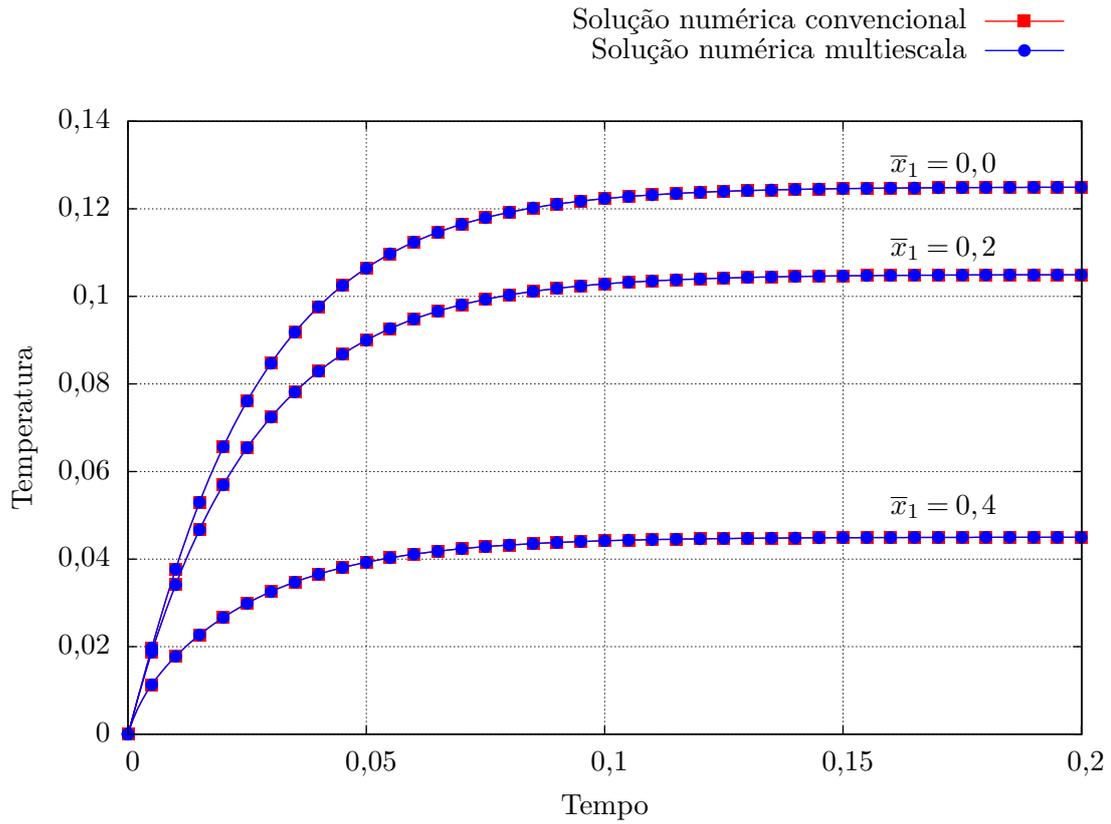


(a) Curva de aquecimento até $t = 0,2$. Apenas 1 a cada 5 pontos está marcado.

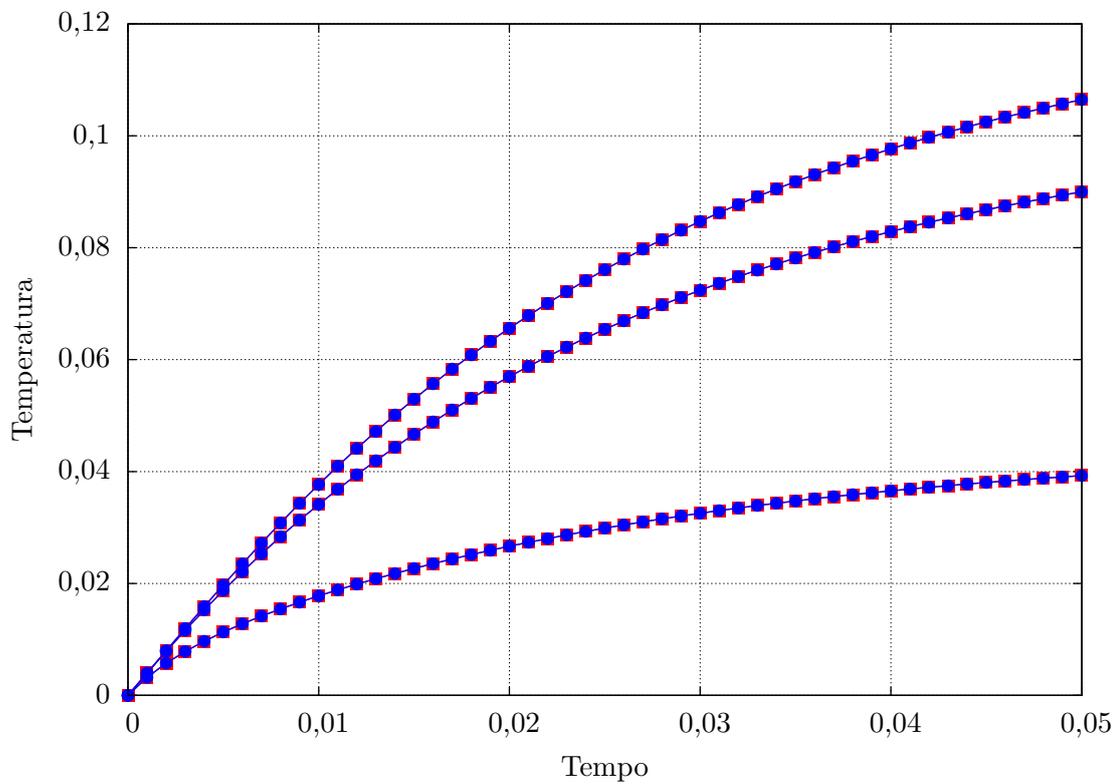


(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.7 – Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução analítica para o Problema 6.3.



(a) Solução até $t = 0,2$. Apenas 1 a cada 5 pontos está marcado.



(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.8 – Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 6.3.

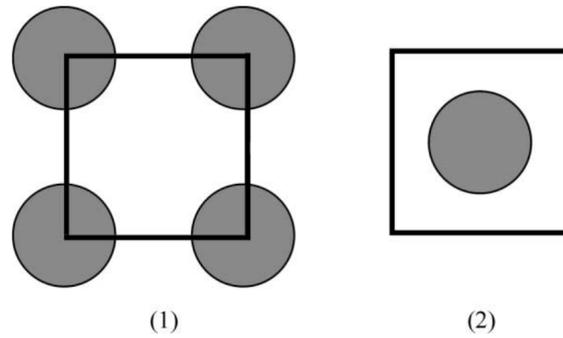


Figura 6.9 – Células unitárias utilizadas nas simulações realizadas por Jiang *et al.*, 2002. Retirado de Jiang *et al.*, 2002.

apresenta as características da discretização espacial de ambas as escalas, bem como as propriedades físicas dos constituintes. Para a solução do problema utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 4.000$ s.

Tabela 6.4 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.4

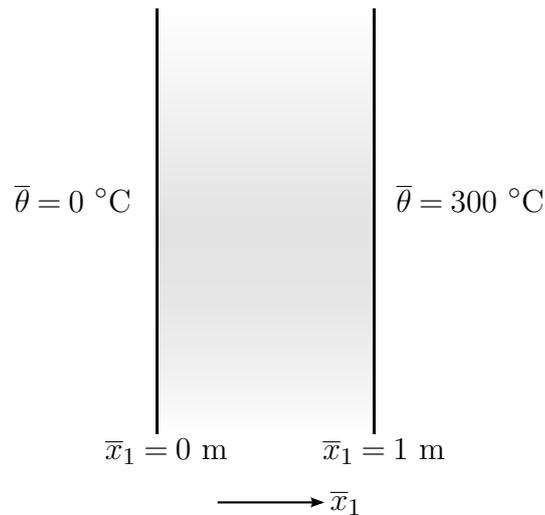
Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Matriz	Inclusões
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,9 \times 10^2$	$3,9 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$1,0 \times 10^0 \mathbf{1}$	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,0 \times 10^3$	$9,0 \times 10^3$
Elementos	—	20 Quad4	800 Tri3 ^a	
Nós	—	42	441	

^a Tri3: Triangular linear de 3 nós.

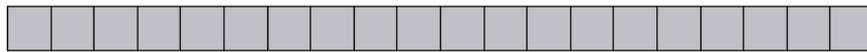
A comparação entre as soluções pode ser observada na Fig. 6.11. Observa-se que a diferença entre as soluções macroscópicas para a microescala em regime transiente e para a microescala estacionário é praticamente inexistente.

OBSERVAÇÃO 6.1: Para a solução com $\text{div } \mathbf{q} = 0$ na microescala, os termos não-usuais $\bar{\mathbf{r}}$ e $\bar{\boldsymbol{\phi}}$ foram removidos da descrição macroscópica, de modo a obter-se uma descrição mais “usual”.

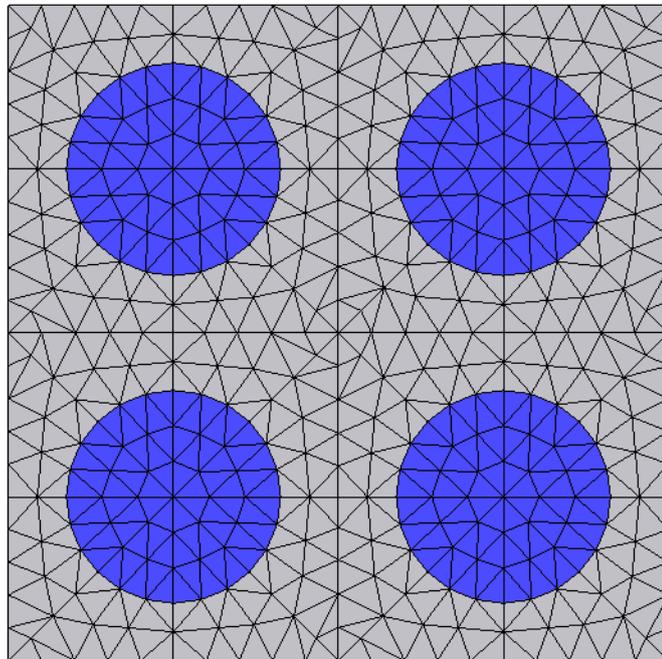
Analisa-se agora a solução na microescala. A Fig. 6.12 mostra mapa de temperaturas para o primeiro incremento de tempo para a microescala em regime transiente ou estacionário, para um ponto de integração $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m. Mesmo nesse primeiro incremento de tempo e em uma posição em que o gradiente de temperatura é elevado, a influência da inércia térmica da microescala é muito pequena. De fato, para entender esse comportamento, basta observar que o processo de condução é governado pela matriz,



(a) Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 1$ m heterogênea, com temperatura inicial nula, é submetida às condições de contorno apresentadas acima.

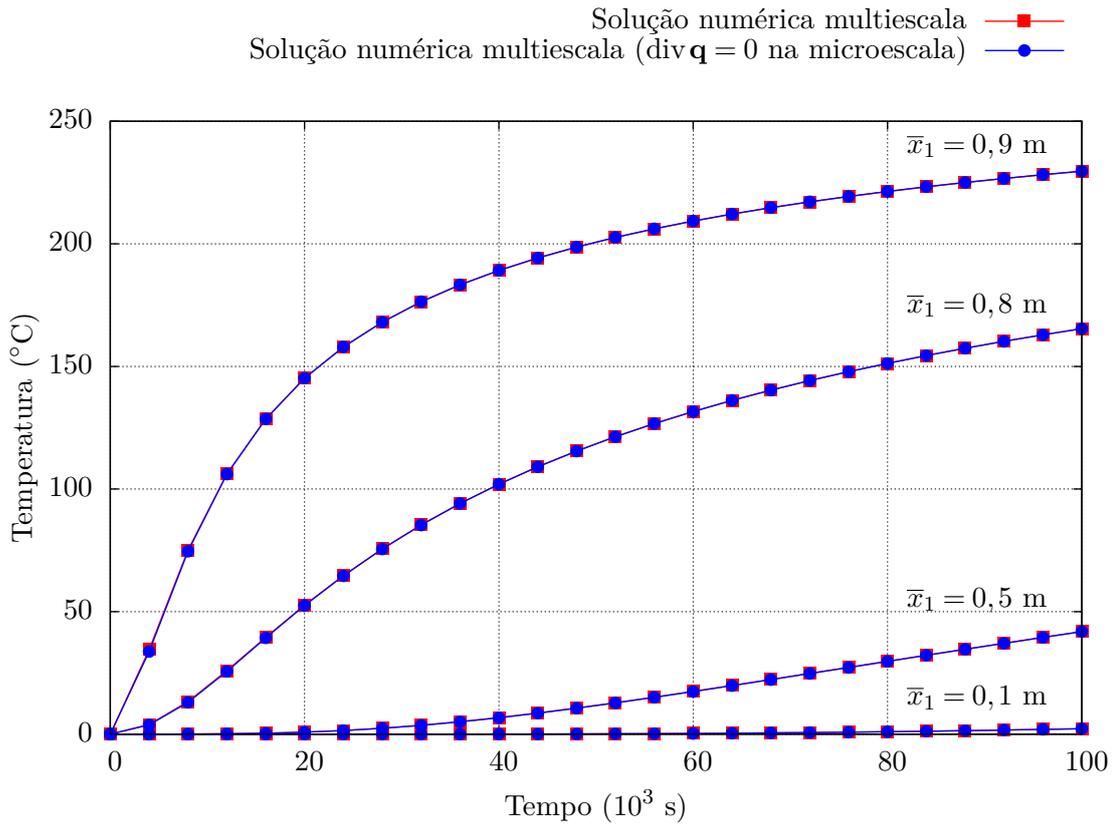
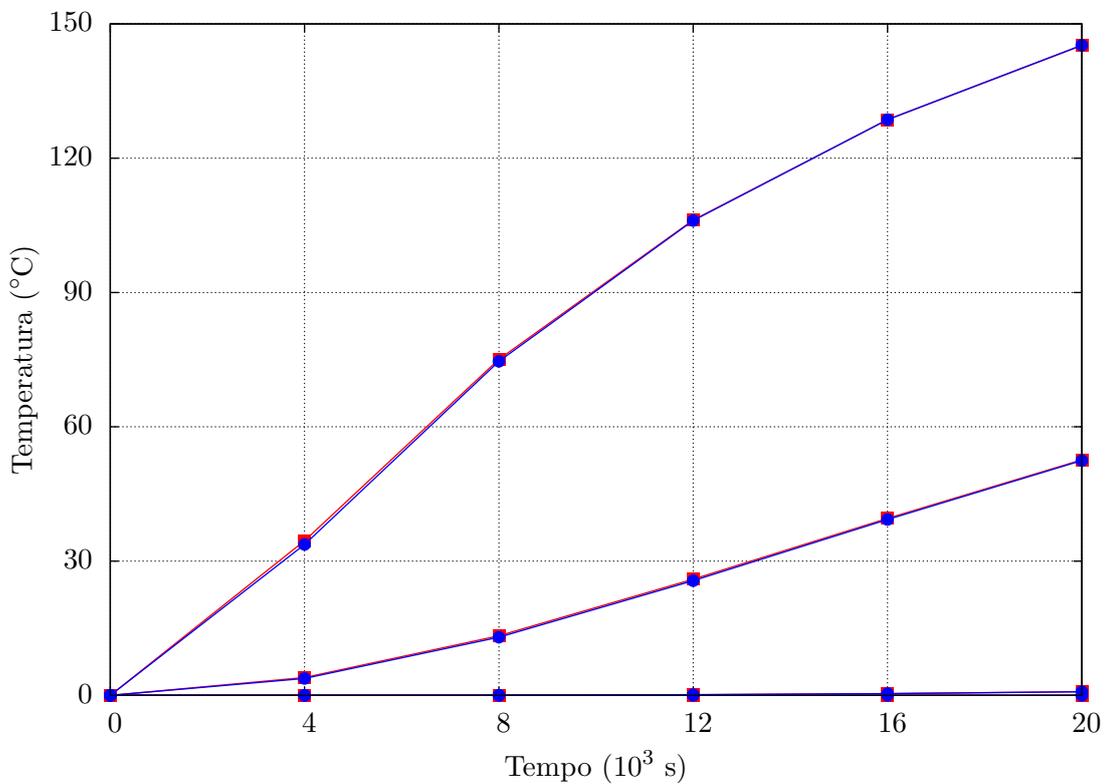


(b) Malha macroscópica, definida no domínio $\bar{x}_1 = [0, 1]$ m e $\bar{x}_2 = [0, 0,05]$ m. As condições de contorno nas faces verticais estão indicadas em (a), enquanto nas faces horizontais prescreve-se $\bar{q} = 0$, dado o caráter unidimensional do problema.



(c) Elemento de volume representativo, de lado igual a 20 mm, cuja malha é formada por 800 elementos triangulares lineares e 441 nós. O subdomínio em cinza representa a matriz, enquanto os subdomínios em azul representam as inclusões, com diâmetro de 6,5 mm.

Figura 6.10 – Representação esquemática e malhas do corpo macroscópico e do elemento de volume representativo para o Problema 6.4.

(a) Solução até $t = 100.000$ s.

(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.11 – Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.4, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.

que possui uma difusividade térmica muito inferior a das inclusões. Como as inclusões apresentam uma inércia térmica relativamente baixa, elas estão sempre “acompanhando” a distribuição de temperatura na matriz.

Por outro lado, questiona-se qual seria o comportamento se os materiais fossem invertidos. Esse problema é a seguir enunciado.

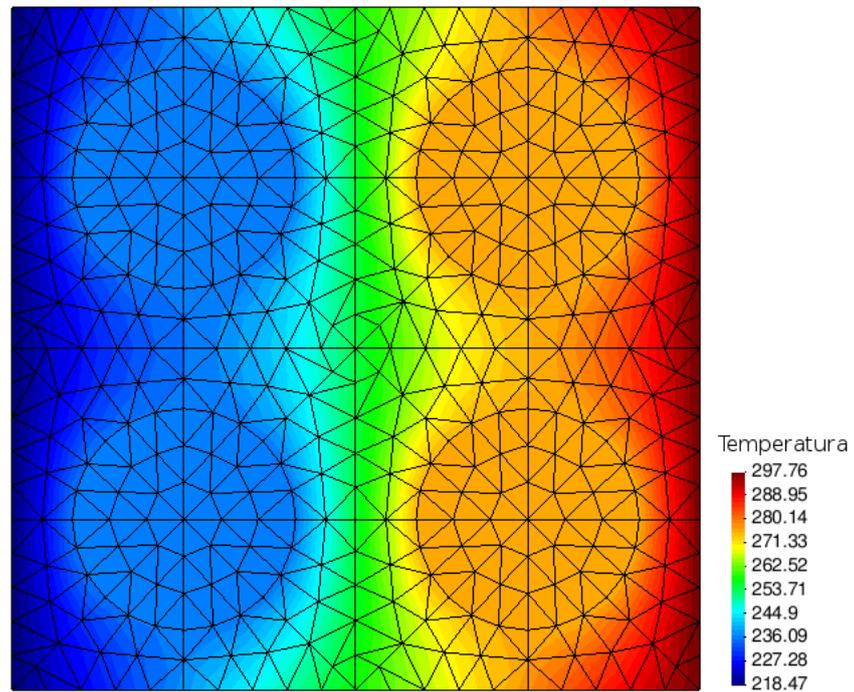
PROBLEMA 6.5 (MATRIZ COM ELEVADA DIFUSIVIDADE TÉRMICA): Este problema é semelhante ao Problema 6.4, exceto pelo fato de que os materiais são invertidos, conforme indica a Tab. 6.5, de forma que a matriz tenha difusividade térmica relativamente elevada em comparação às inclusões. As discretizações espaciais são mantidas iguais, tanto para a macroescala quanto para a microescala. Para este problema, no entanto, o passo de tempo precisa ser alterado. Utilizou-se $\Delta t = 12$ s nas simulações.

De acordo com a Fig. 6.13, observa-se que a diferença nas soluções macroscópicas é grande para os instantes iniciais, especialmente em posições onde o gradiente de temperatura é elevado. A Fig. 6.14 apresenta as soluções na microescala para o primeiro incremento de tempo, tanto para o modelo microscópico transiente quanto para o modelo microscópico estacionário. Nesse caso, a inércia térmica da microescala torna-se clara. A condução térmica se dá principalmente pela matriz, com difusividade 400 vezes maior que as inclusões, as quais, portanto, apresentam uma inércia térmica relativamente elevada. Em contraste, na solução com o modelo microscópico estacionário, observa-se uma distribuição mais “linear” de temperatura. Intuitivamente, sabe-se que a solução para o modelo microscópico transiente se parecerá muito mais com a solução verdadeira; não seria esperado um mapa de temperaturas conforme aquele mostrado na Fig. 6.14b para os instantes iniciais de tempo, uma vez que a baixa difusividade térmica impede que as inclusões tenham a distribuição de temperaturas mostrada. Esse resultado é importante, já que apresenta um caso em que é fundamental considerar-se a inércia térmica da microescala.

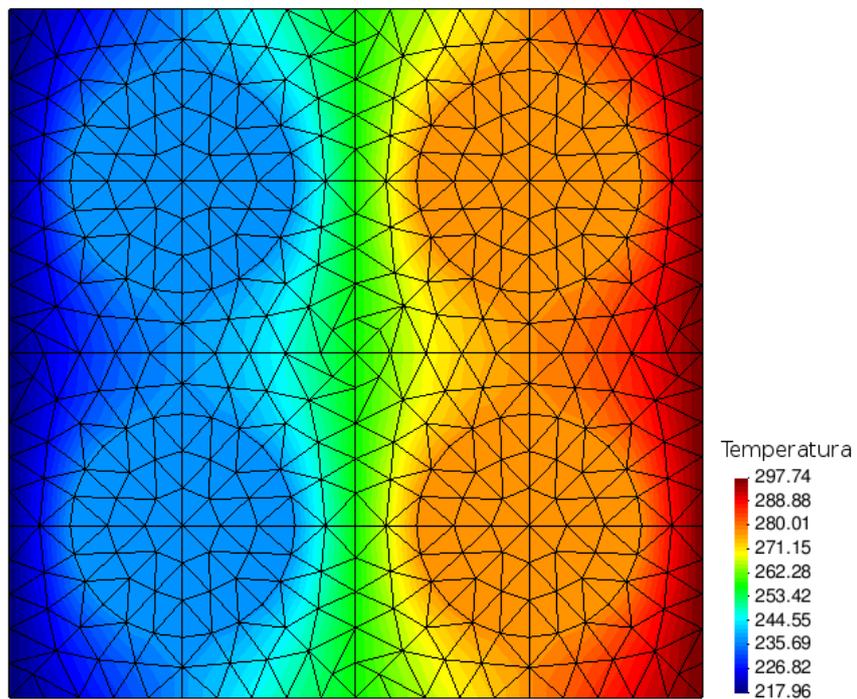
Tabela 6.5 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.5

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Matriz	Inclusões
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,9 \times 10^2$	$3,9 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$	$1,0 \times 10^0 \mathbf{1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,0 \times 10^3$	$9,0 \times 10^3$
Elementos	—	20 Quad4	800 Tri3	
Nós	—	42	441	

A Fig. 6.15 apresenta a solução no nó central da inclusão superior direita do EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, tanto para a microescala em

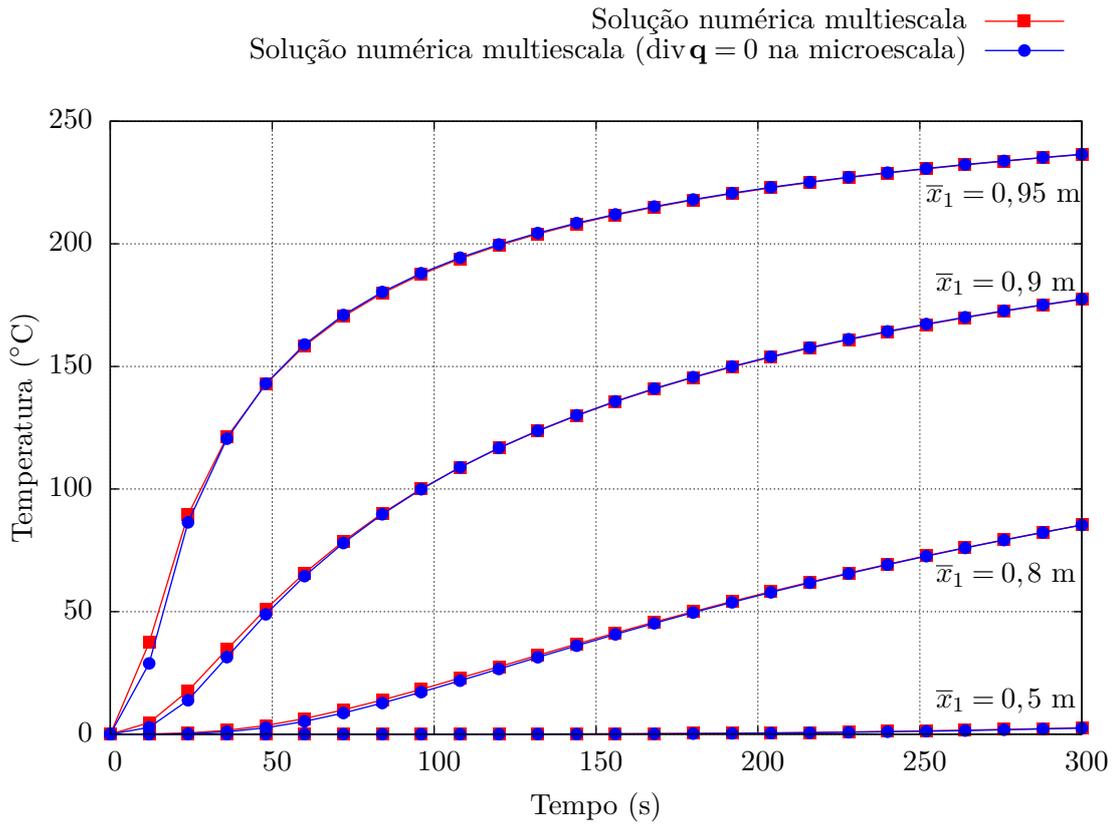


(a) Microescala em regime transiente.

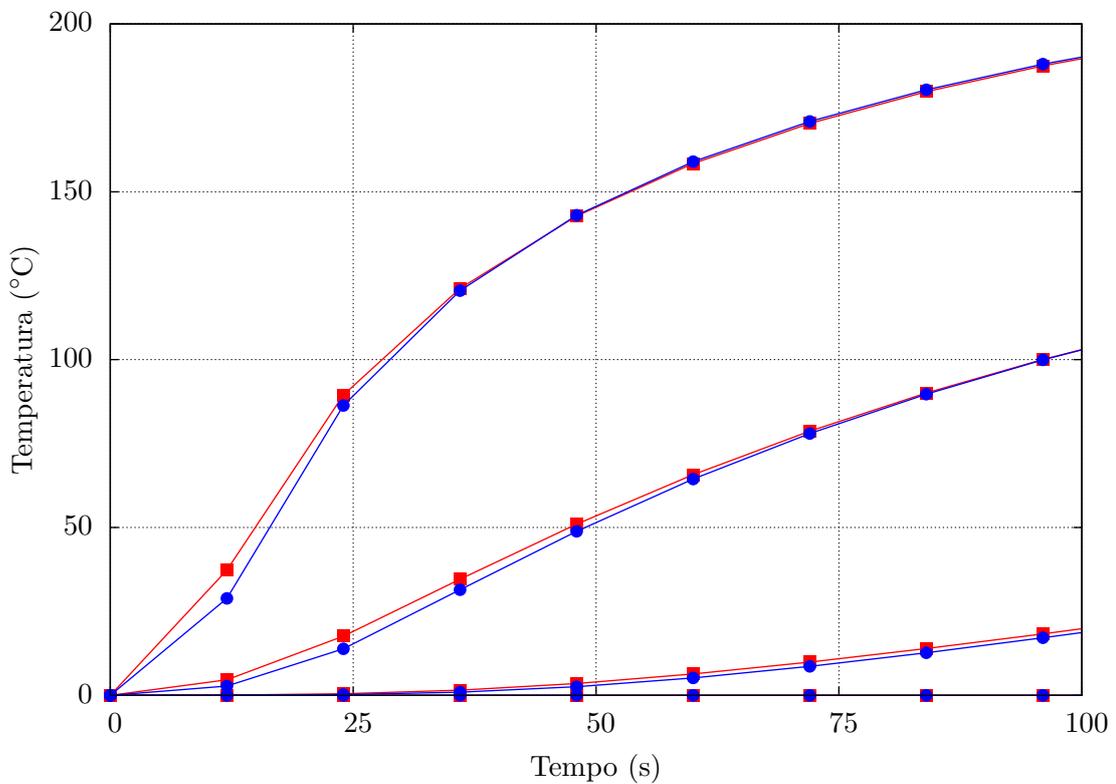


(b) Microescala em regime estacionário.

Figura 6.12 – Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.4 para o primeiro incremento de tempo ($t = 4.000$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{x} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.

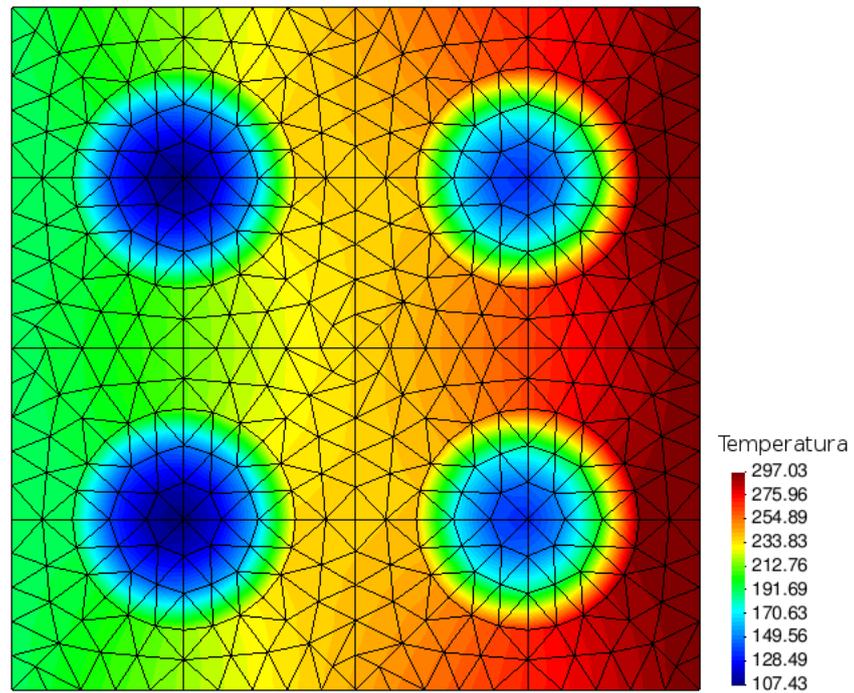


(a) Soluções até 300 s.

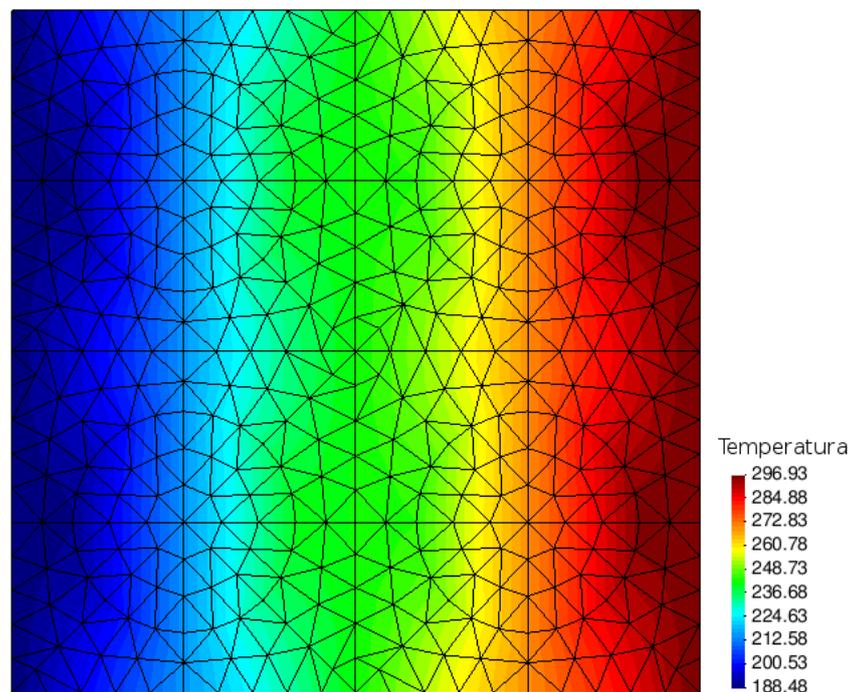


(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.13 – Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.5, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.



(a) Microescala em regime transiente.



(b) Microescala em regime estacionário.

Figura 6.14 – Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.5 para o primeiro incremento de tempo ($t = 12$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.

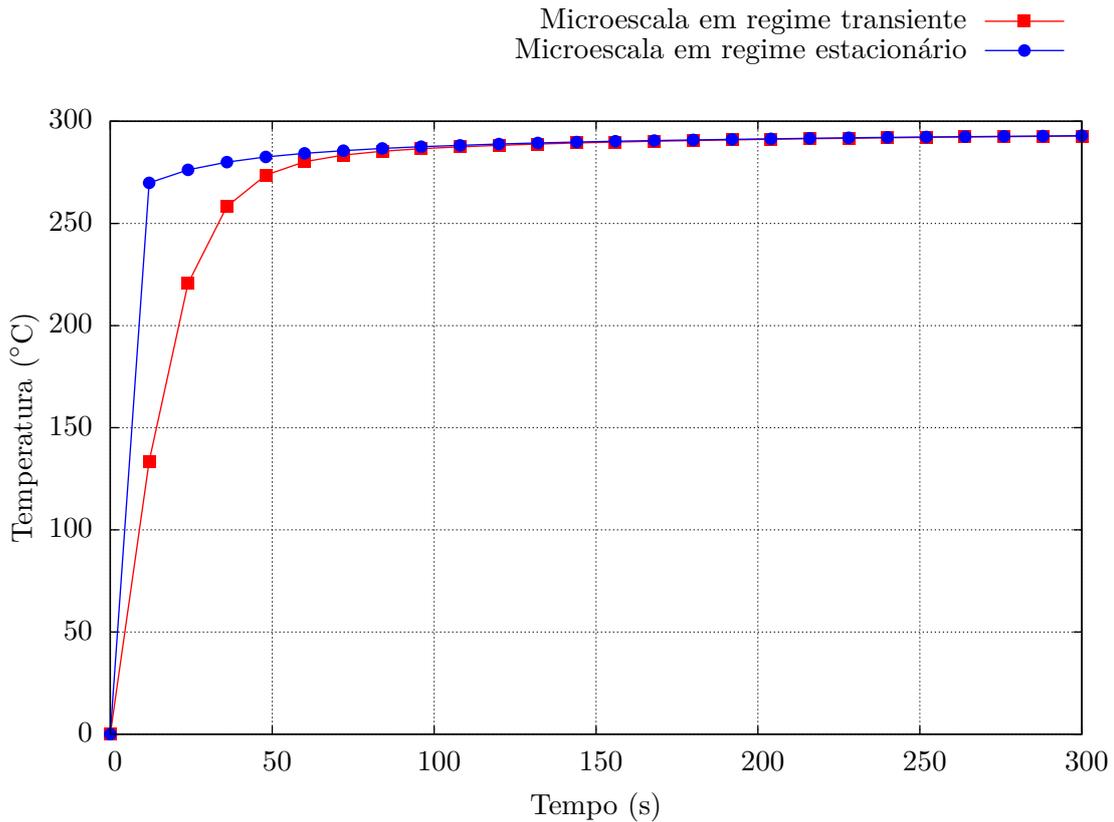


Figura 6.15 – Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 6.10c) associado ao ponto de integração localizado em $\bar{x} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, para o Problema 6.5.

regime transiente quanto em regime estacionário. As curvas de temperatura para esse ponto da microescala em particular são muito distintas. O aquecimento é muito mais suave quando se considera a inércia térmica da microescala. Agora será analisada a influência do tamanho do EVR.

PROBLEMA 6.6 (EVR 10 VEZES MENOR): Este problema é idêntico ao Problema 6.5, exceto pelo fato que o EVR tem agora um lado de 2 mm, isto é, 10 vezes menor que o do EVR do Problema 6.5. A discretização do EVR é igual à apresentada na Fig. 6.10c.

Para esse problema, as soluções na macroescala se tornam praticamente idênticas (veja a Fig. 6.16). As soluções na microescala para o primeiro incremento de tempo estão apresentadas na Fig. 6.17 e demonstram que a influência da inércia térmica sobre a solução microscópica é muito pequena na magnitude da temperatura. Entretanto, as formas dos mapas de temperatura são ligeiramente diferentes. A Fig. 6.18 apresenta a solução no nó central da inclusão superior direita do EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{x} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, tanto para a microescala em regime transiente quanto em regime estacionário. As curvas de temperatura para esse ponto da microescala em particular são muito semelhantes, em oposição ao que ocorre quando o EVR é 10 vezes maior. Isso pode ser explicado pelo fato de que à medida que o EVR é reduzido, as inclusões também o

são, diminuindo, portanto, suas inércias térmicas.

OBSERVAÇÃO 6.2: Esse último resultado demonstra que a importância de levar em consideração a inércia térmica da microescala na modelagem depende do tamanho do EVR. De fato, talvez a terminologia *elemento de volume representativo* não seja a mais adequada, uma vez que algumas teorias pressupõem que o EVR deva ser infinitesimal, tal como a teoria de homogeneização assintótica. Os teoremas de convergência da teoria de homogeneização são baseados matematicamente na condição de que o parâmetro de escala ϵ que define o tamanho do EVR tende a zero ($\epsilon \rightarrow 0$). Na prática de engenharia, a validade da abordagem clássica por homogeneização é garantida desde que $\epsilon \ll 1$, com efeitos de escala podendo prevalecer quando ϵ cresce. Por outro lado, essa terminologia (EVR) tem sido utilizada na literatura mais recente para fazer menção a elementos de volume para os quais ϵ não é infinitesimal. A questão das palavras, no entanto, não deve se sobrepor à conclusão: quando o elemento de volume tem um tamanho l suficientemente pequeno em comparação ao comprimento característico macroscópico L , a inércia térmica não precisa ser levada em consideração.

Uma pergunta pertinente é: qual é a solução completa (uma única escala) de um problema tal como os Problemas 6.4, 6.5 ou 6.6? Esse problema completo está descrito a seguir.

PROBLEMA 6.7: Um problema semelhante ao Problema 6.5 é analisado, porém *com apenas uma escala*. O corpo é construído por meio do posicionamento, lado a lado, de elementos de volume tal como o apresentado na Fig. 6.10c, porém com lado igual a aproximadamente 7,14286 mm. Dada as condições de contorno do problema, utiliza-se apenas a metade do EVR para construir o corpo (Veja a Fig. 6.24a), que tem domínio $\bar{x}_1 = [0, 1]$ m e $\bar{x}_2 = [0, 3,57143]$ mm. As propriedades térmicas dos constituintes e as características da malha de elementos finitos estão apresentadas na Tab. 6.6. A solução deste problema será referida como solução completa, ou ainda como solução convencional por elementos finitos.

Tabela 6.6 – Propriedades térmicas e características da malha de elementos finitos para o Problema 6.7

Grandeza	Unidade	Matriz	Inclusões
c	J kg ⁻¹ K ⁻¹	$3,9 \times 10^2$	$3,9 \times 10^2$
κ	W m ⁻¹ K ⁻¹	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$	$1,0 \times 10^0 \mathbf{1}$
ρ	kg m ⁻³	$9,0 \times 10^3$	$9,0 \times 10^3$
Elementos	—	56.000	Tri3
Nós	—	30.811	

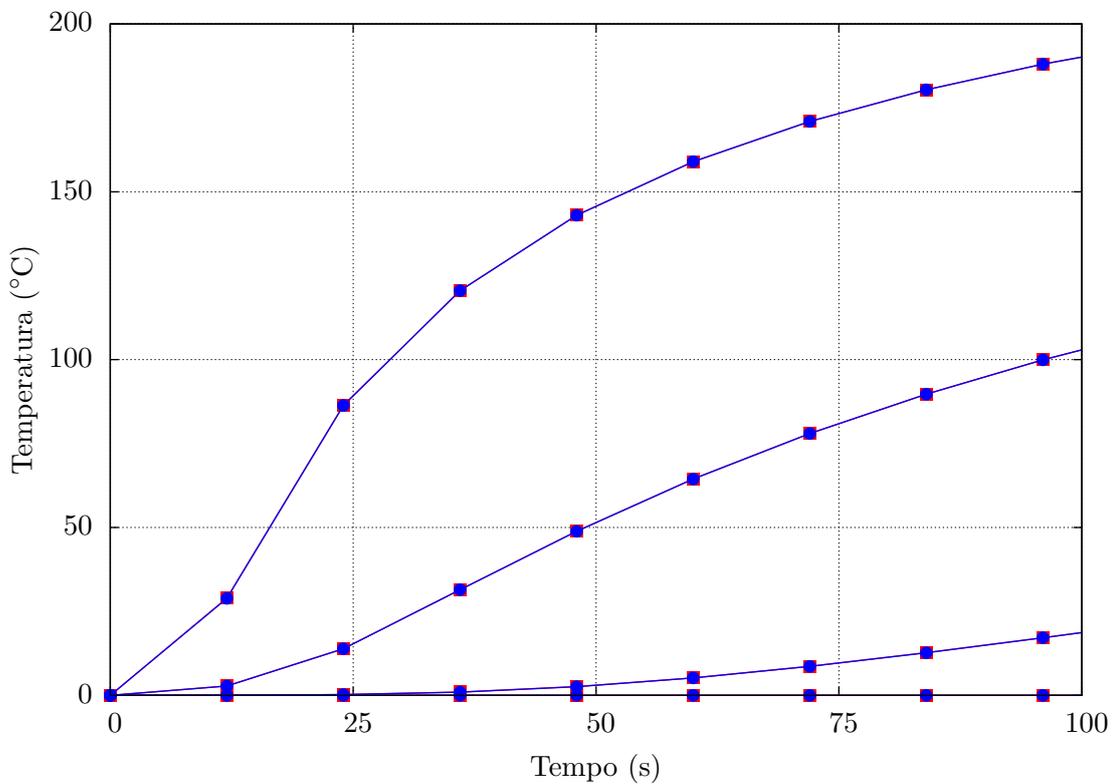
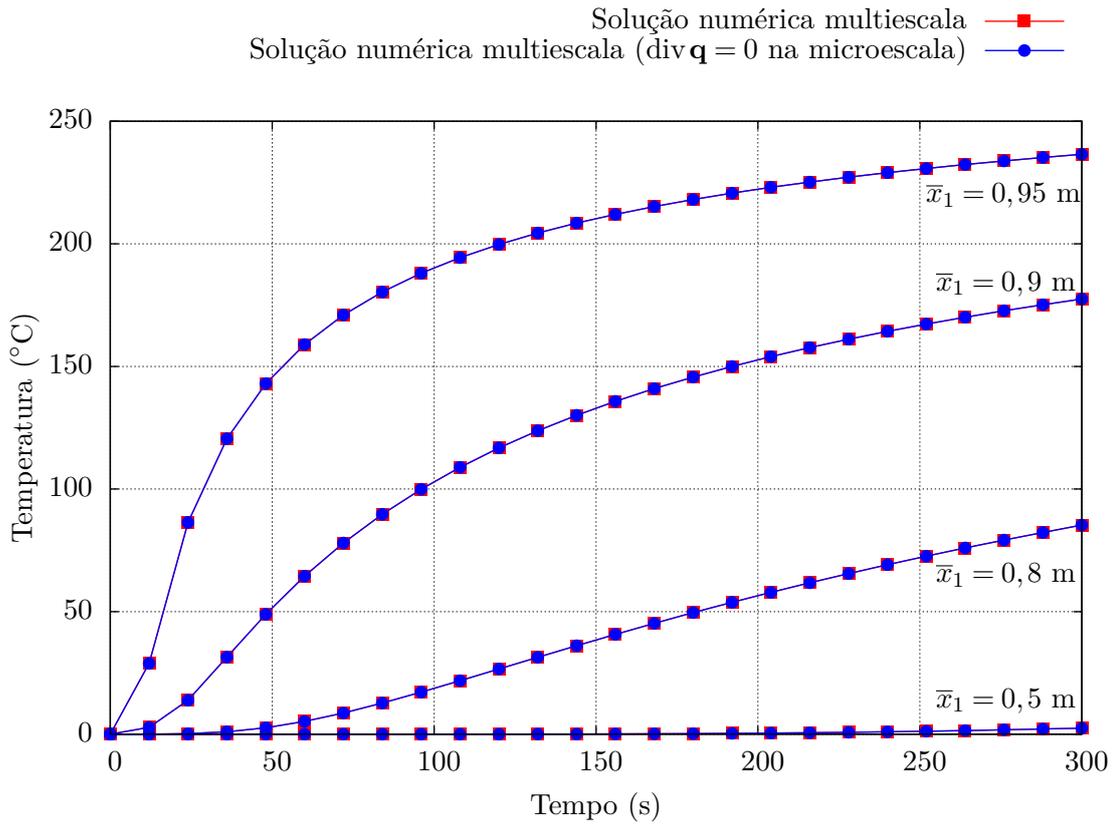
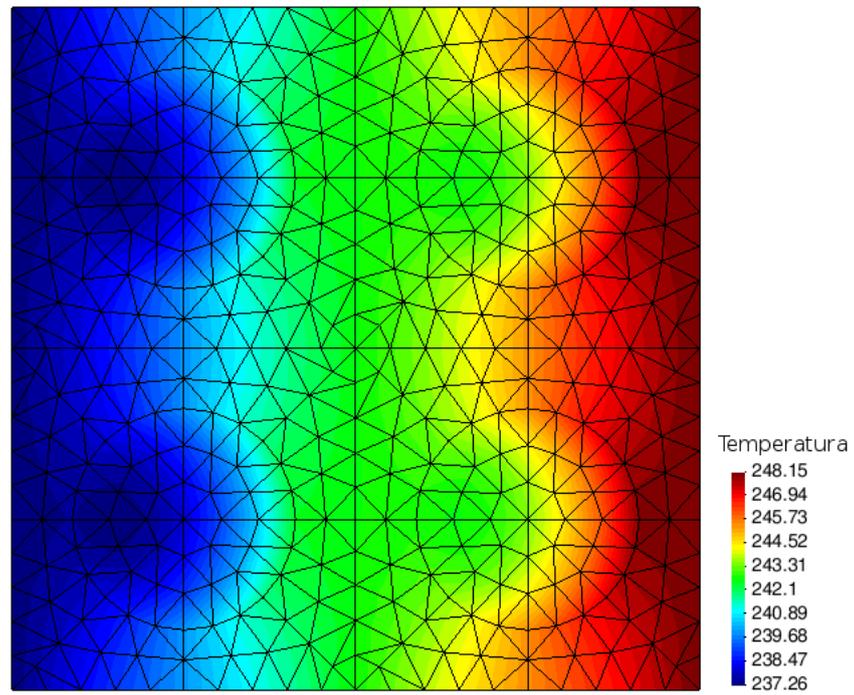
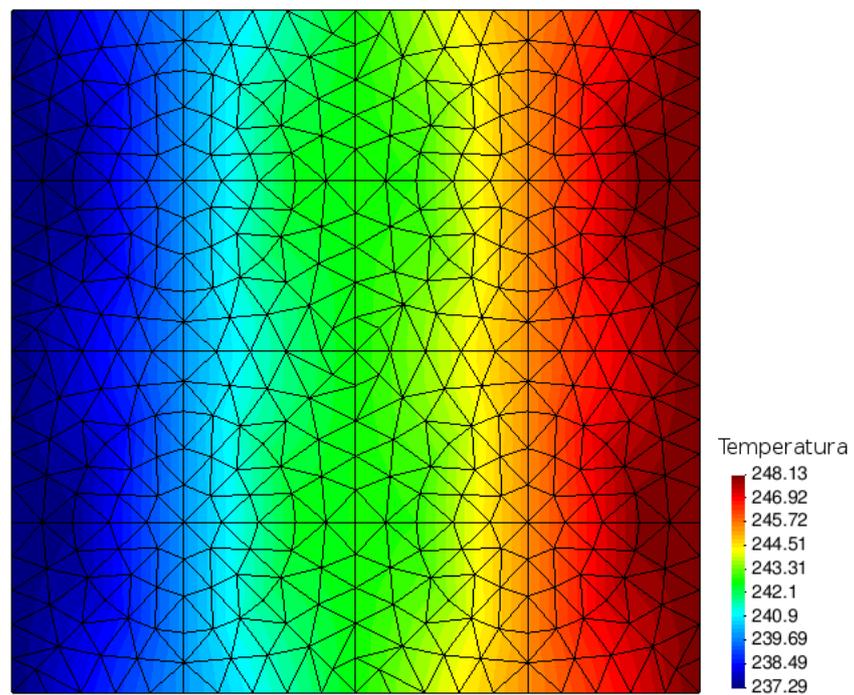


Figura 6.16 – Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.6, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.



(a) Microescala em regime transiente.



(b) Microescala em regime estacionário.

Figura 6.17 – Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.6 para o primeiro incremento de tempo ($t = 12$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.

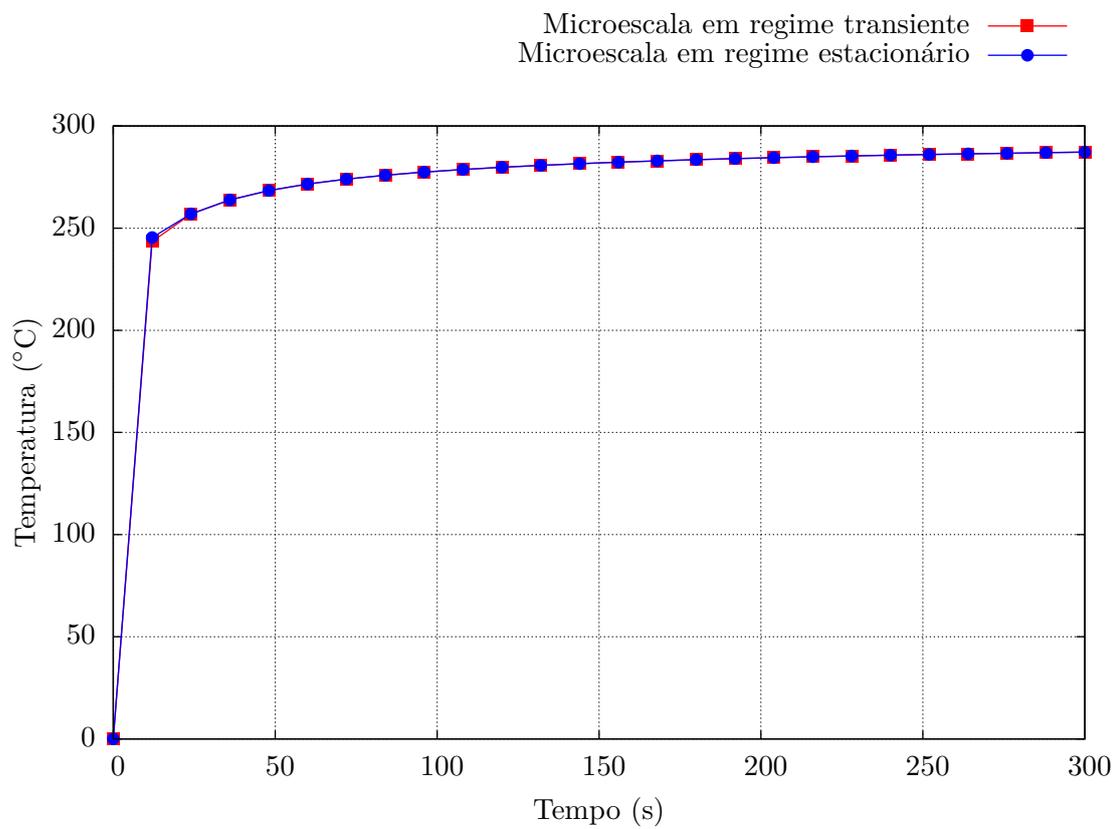


Figura 6.18 – Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 6.10c) associado ao ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, para o Problema 6.6.

O comprimento de 7,14286 mm para a aresta do elemento de volume do Problema 6.7 justifica-se pelo fato de que existirão elementos de volume centralizados em uma posição muito próxima à posição dos pontos de integração macroscópicos dos elementos quadrilaterais bilineares utilizados na simulação multiescala descrita no Problema 6.8 (veja a Fig. 6.19). Dessa forma, espera-se que a solução na microescala associada a um determinado ponto de integração reproduza a solução completa na região correspondente.

PROBLEMA 6.8: Esse problema corresponde à modelagem multiescala da Problema 6.7, utilizando elementos quadrilaterais bilineares e EVRs conforme a Fig. 6.10c, porém em uma escala menor, isto é, com um lado de 7,14286 mm. As propriedades térmicas dos constituintes e as características das malhas de elementos finitos macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 6.7.

Tabela 6.7 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.8

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Matriz	Inclusões
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,9 \times 10^2$	$3,9 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$	$1,0 \times 10^0 \mathbf{1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,0 \times 10^3$	$9,0 \times 10^3$
Elementos	—	20 Quad4	800 Tri3	
Nós	—	42	441	

A Fig. 6.20 apresenta uma comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução completa em alguns pontos selecionados. De fato, para a comparação ser consistente, é necessário levar em consideração a flutuação da temperatura na microescala no centro do EVR. Porém, como sabe-se que a flutuação térmica é pequena no referido ponto, a comparação é feita (apenas em caráter preliminar). Observa-se na Fig. 6.20 que a solução multiescala, ao contrário do esperado, é bastante diferente da solução completa, ao menos nos locais onde o gradiente de temperatura é elevado. A existência de um gradiente elevado próximo a $\bar{x} = 1$ m, com uma modelagem que utiliza elementos quadrilaterais bilineares com tamanhos relativamente elevados, é uma possível causa para a diferença observada. Tendo isso em vista, a seguir será definida uma modelagem multiescala utilizando elementos quadrilaterais quadráticos (incompletos). Com isso, embora nem todos pontos de integração dos elementos macroscópicos estejam diretamente associados a “fatias” da modelagem completa, os pontos de integração com coordenada $\bar{\xi} = 0$ têm uma correspondência direta com regiões do corpo modelado em uma única escala (veja a Fig. 6.21).

EVR associado ao ponto de integração B

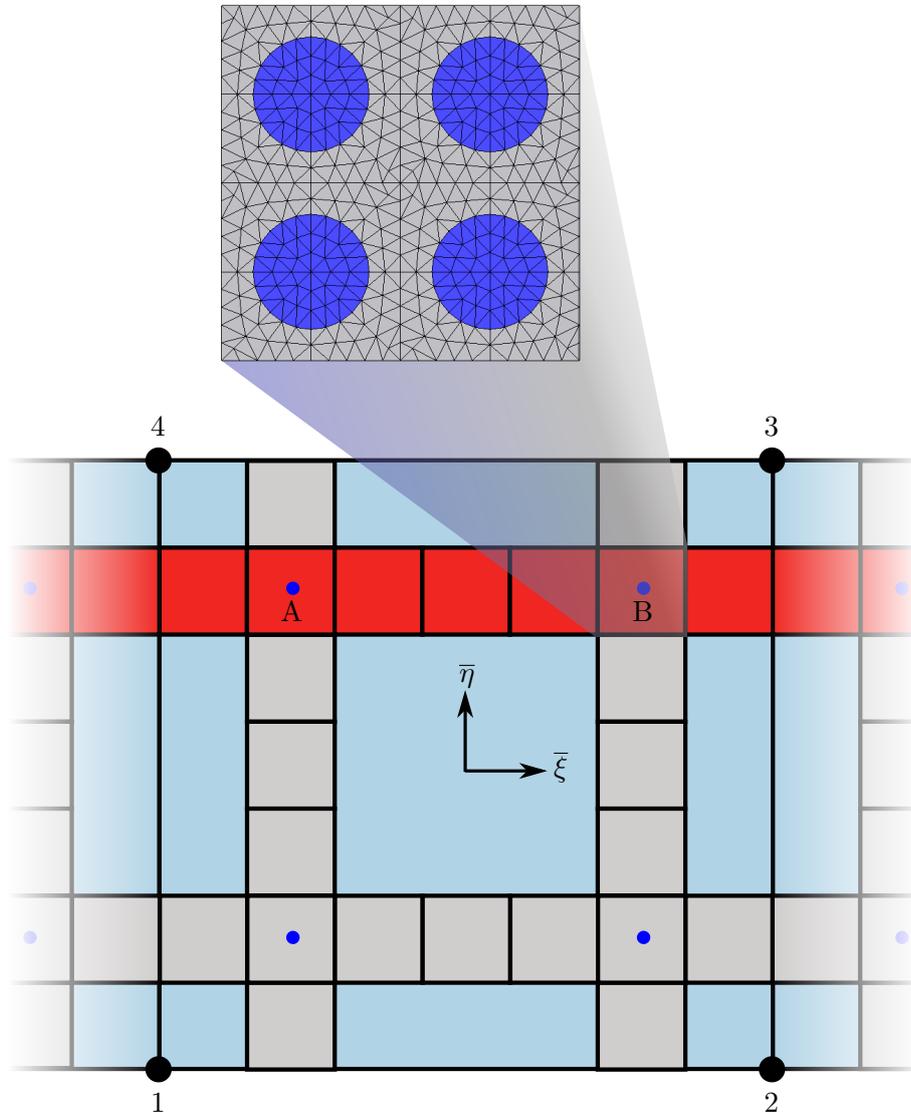


Figura 6.19 – Representação esquemática de um elemento finito macroscópico quadrilateral bilinear, definido pelas coordenadas $\bar{\xi}$ e $\bar{\eta}$, e parte de outros dois elementos finitos adjacentes. Os quatro nós desse elemento estão apresentados na figura. Os EVRs, representados pelos quadrados menores, têm um tamanho tal que quando colocados lado a lado, a posição de cada ponto de integração macroscópico (indicado em azul) praticamente coincide com o centro de um desses EVRs, como por exemplo, aqueles indicados por A e B. O Problema 6.7 pode ser modelado, por exemplo, pela faixa de EVRs mostrados em vermelho, quando estendida ao longo de todo o corpo macroscópico.

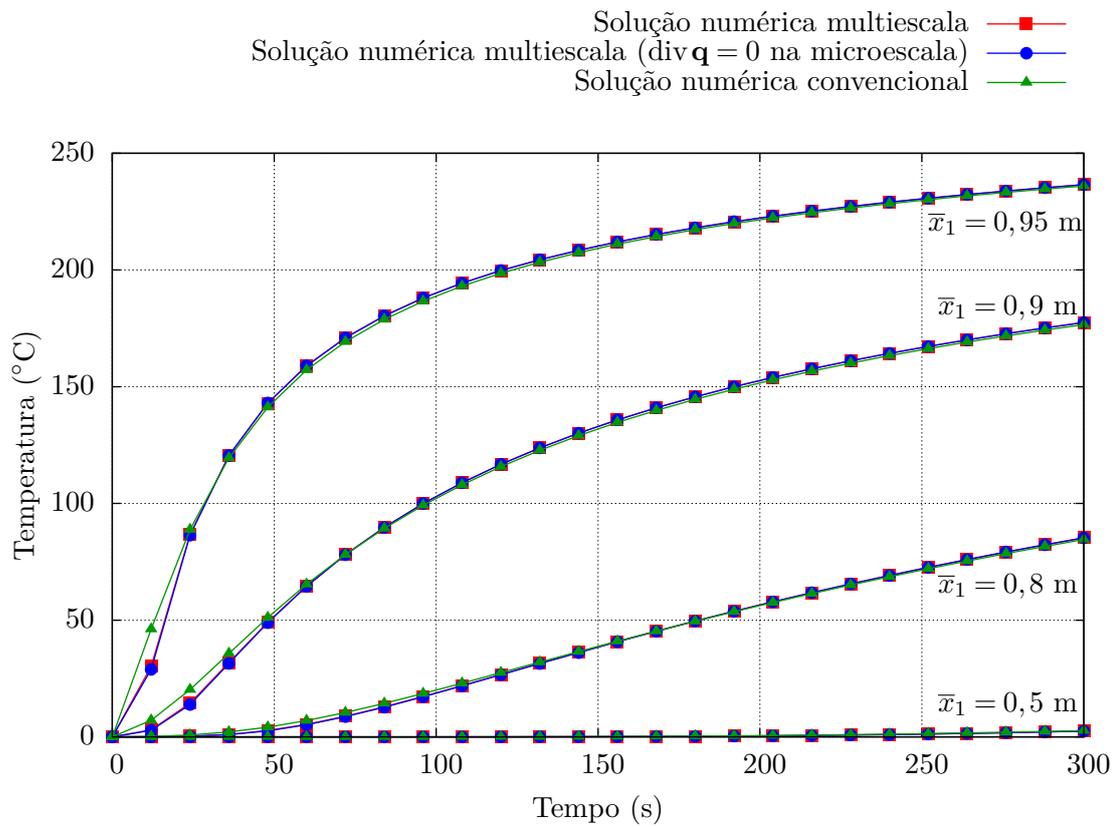


Figura 6.20 – Comparação entre a solução convencional por elementos finitos (solução completa) correspondente ao Problema 6.7 e as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.8, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário. Para a solução completa, as curvas são obtidas em $\bar{x}_2 = 0$.

PROBLEMA 6.9: Esse problema corresponde à modelagem multiescala do Problema 6.7, porém utilizando elementos quadrilaterais quadráticos incompletos. As propriedades térmicas dos constituintes e as características das malhas de elementos finitos macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 6.8.

Tabela 6.8 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.9

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Matriz	Inclusões
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,9 \times 10^2$	$3,9 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$	$1,0 \times 10^0 \mathbf{1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,0 \times 10^3$	$9,0 \times 10^3$
Elementos	—	20 Quad8 ^a	800 Tri3	
Nós	—	103	441	

^a Quad8: Quadrilateral quadrático incompleto (8 nós).

Conforme observa-se na Fig. 6.22, as soluções multiescala macroscópicas, com ou sem a consideração da inércia térmica da microescala, têm ótima concordância com a solução completa, embora essa comparação seja preliminar, conforme discutido anteriormente. Uma vez que as curvas são semelhantes, faz-se a comparação da solução completa com a solução na microescala. A Fig. 6.23 apresenta a solução no centro da inclusão superior direita dos EVRs associados aos pontos macroscópicos $\bar{\mathbf{x}} = (0,925, 0,025)$ m e $\bar{\mathbf{x}} = (0,975, 0,025)$ m, bem como a solução nas posições correspondentes na modelagem completa. A concordância entre a solução multiescala microscópica transiente e a solução completa é excelente, ao contrário do que ocorre para a solução multiescala quando a inércia térmica da microescala é desprezada. Esse resultado indica a importância de considerar-se a inércia térmica nesse caso. Além, disso, a concordância entre os mapas de temperatura para o problema completo e para o problema multiescala com a consideração da inércia térmica da microescala é muito boa, como pode-ser observar na Fig. 6.24.

PROBLEMA 6.10: Analisa-se agora um problema com geração de calor, em que uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 1$ m contém inclusões (fios) de um material condutor que geram calor (por efeito Joule, por exemplo), os quais estão inseridos em uma matriz com baixa difusividade térmica. A placa, que inicialmente se encontra a $\bar{\theta} = 0$ °C, tem suas faces isoladas termicamente para $t > 0$ (veja a Fig. 6.25a). Devido à simetria do problema em torno de $\bar{x}_1 = 0,5$ m, é possível considerar apenas o domínio $\bar{x}_1 = [0, 0,5]$ m, com a face $\bar{x}_1 = 0,5$ m novamente sendo sujeita à condição $\bar{q} = 0$. De fato, pode-se prosseguir dividindo o domínio de maneira sucessiva. Como resultado dessa argumentação, segue que apenas 1 elemento macroscópico precisa ser utilizado na solução deste problema (veja a Fig. 6.25b). A malha

EVR associado ao ponto de integração A

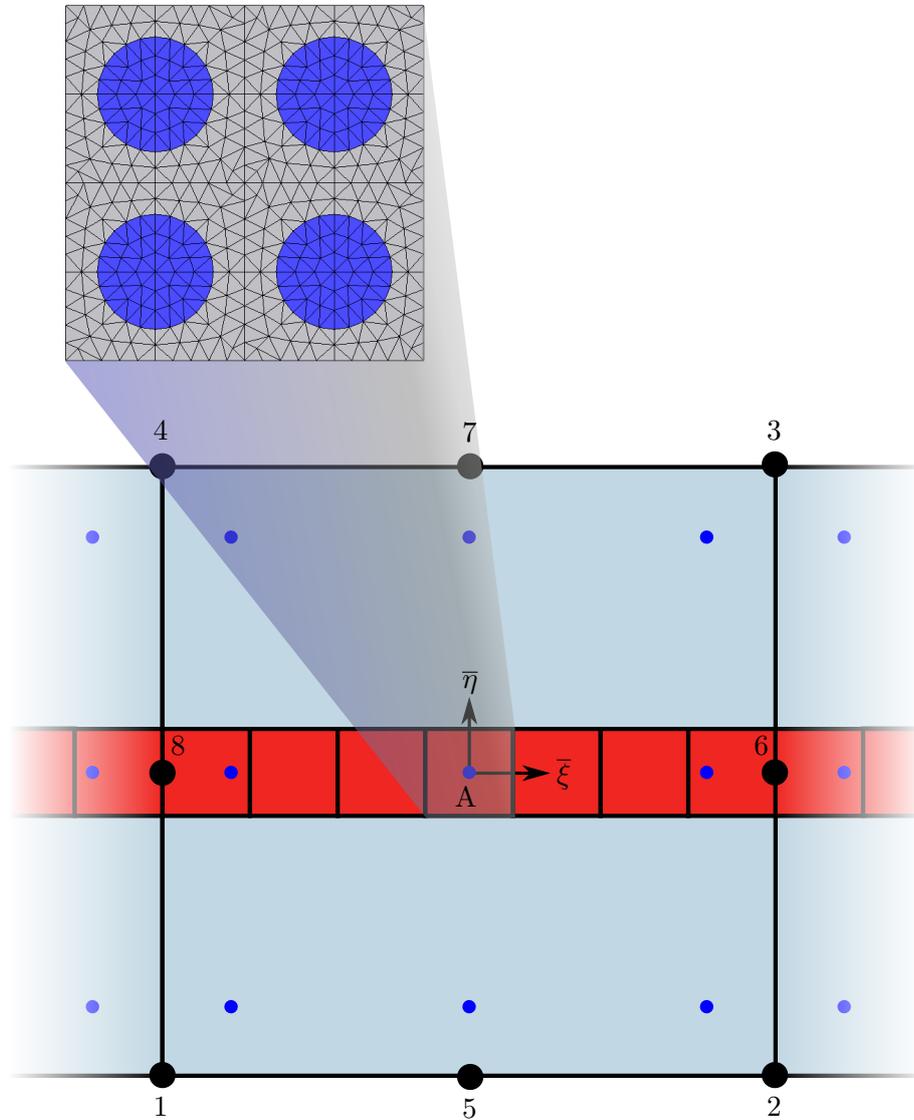
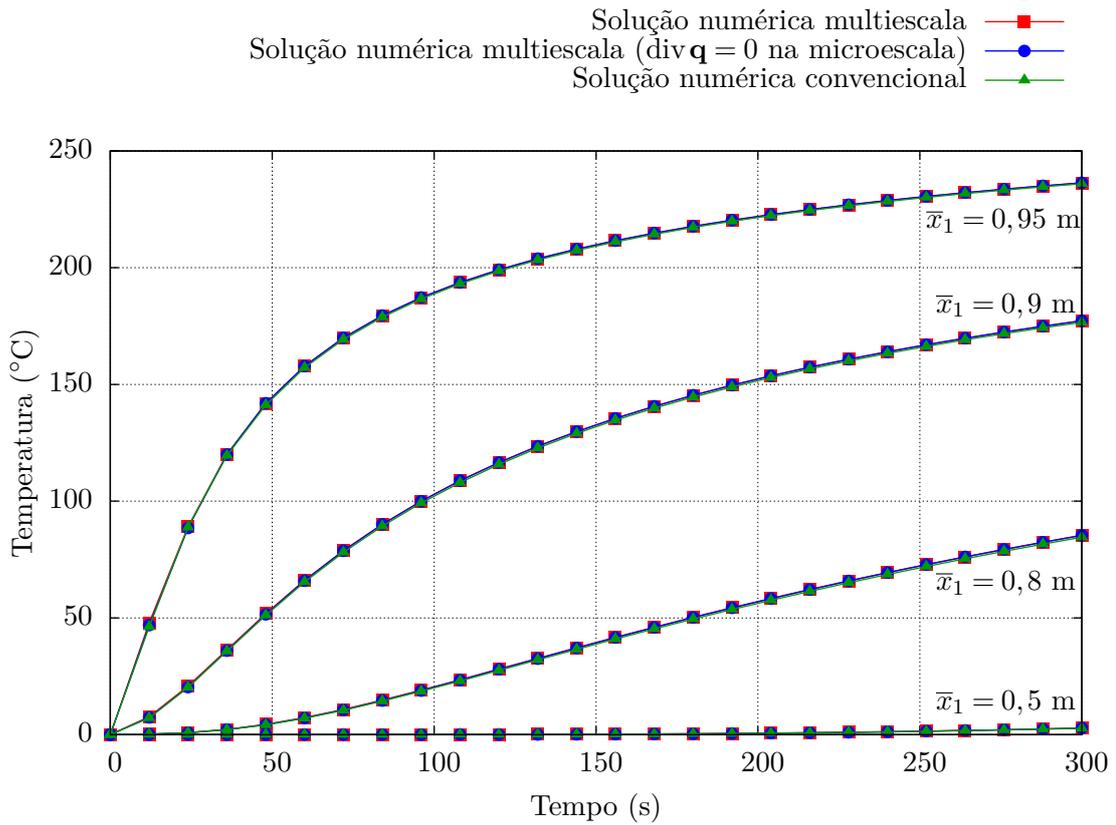
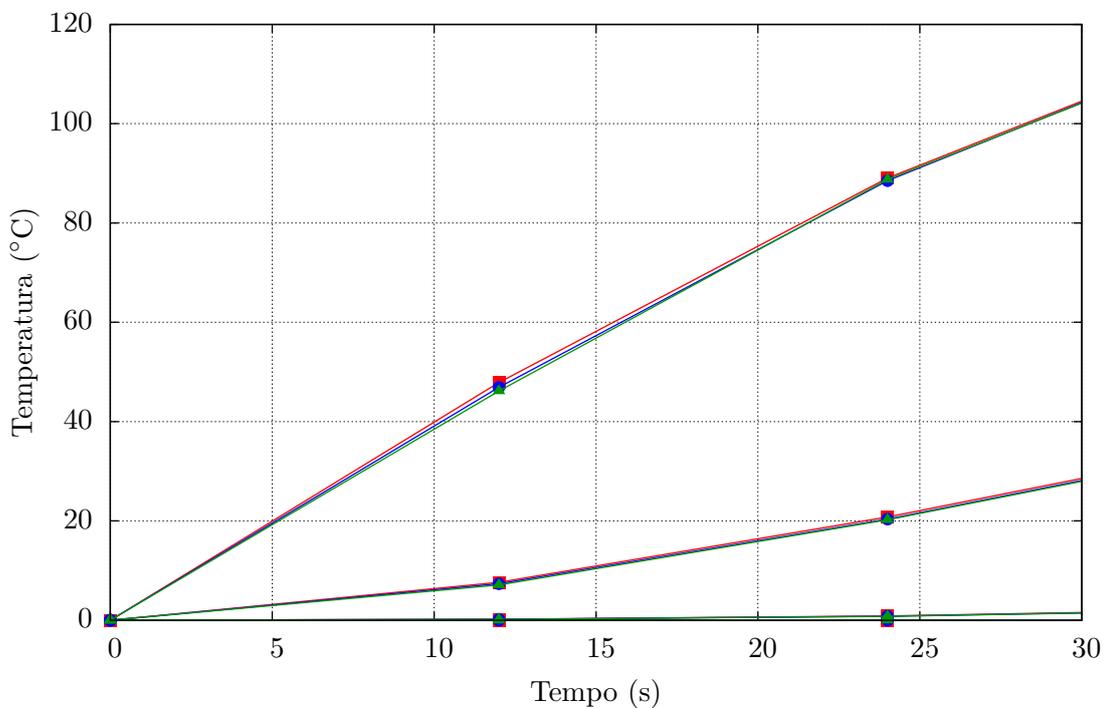


Figura 6.21 – Representação esquemática de um elemento finito macroscópico quadrilateral quadrático incompleto, definido pelas coordenadas $\bar{\xi}$ e $\bar{\eta}$, e parte de outros dois elementos finitos adjacentes. Os oito nós desse elemento estão apresentados na figura. Os EVRs, representados pelos quadrados menores, têm um tamanho tal que quando colocados lado a lado, um ponto de integração com coordenada $\bar{\xi} = 0$ coincide com o centro de um desses EVRs, tal como aquele indicado por A. Novamente, o Problema 6.7 pode ser modelado, por exemplo, pela faixa de EVRs mostrados em vermelho, quando estendida ao longo de todo o corpo macroscópico.

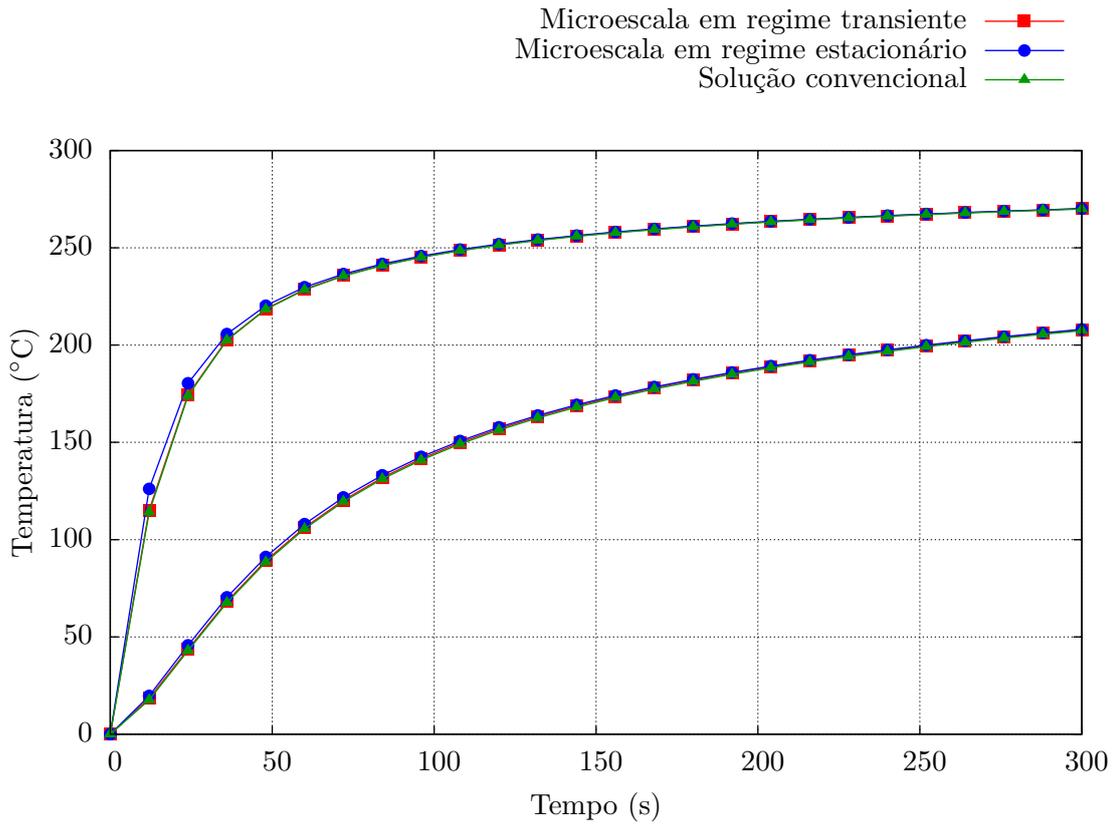


(a) Soluções até 300 s.

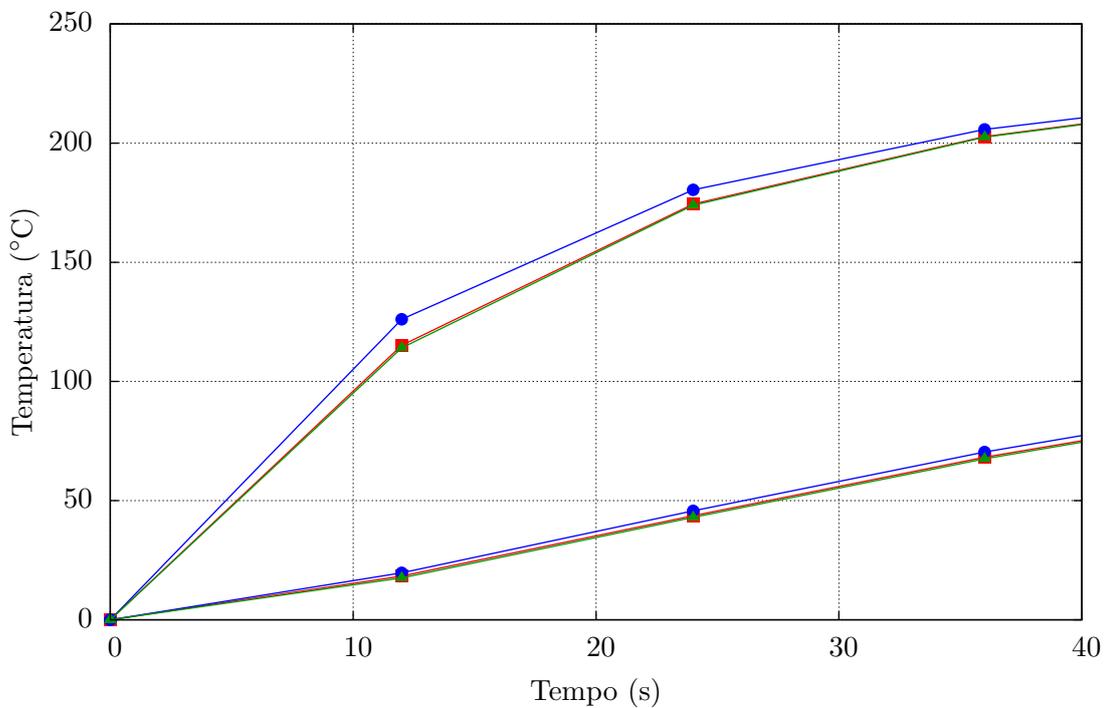


(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.22 – Comparação entre a solução convencional por elementos finitos (solução completa) correspondente ao Problema 6.7 e as soluções multiescala macroscópicas do Problema 6.9, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário.

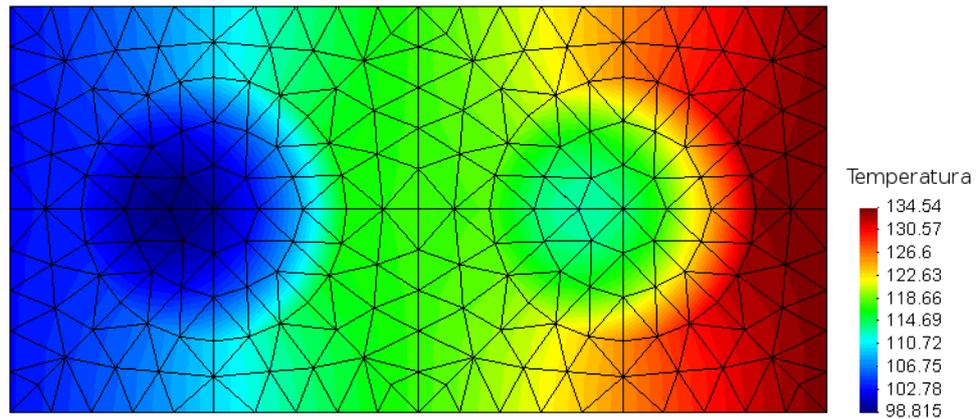


(a) Soluções até 300 s.

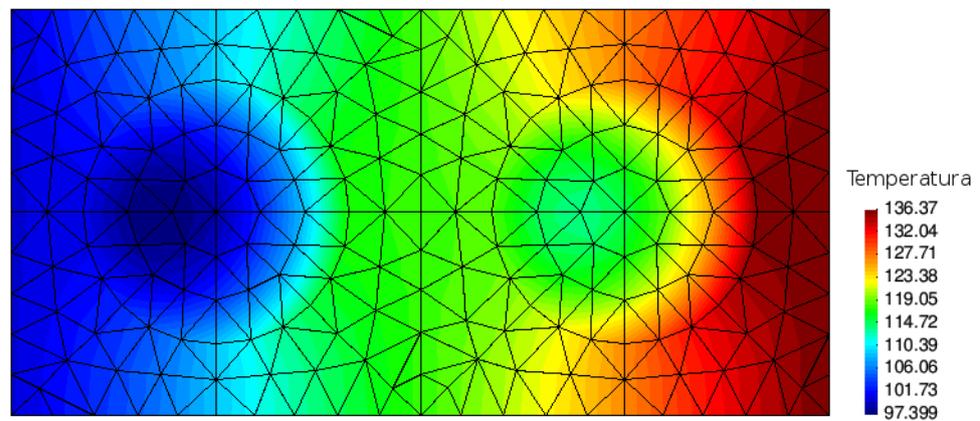


(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 6.23 – Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 6.10c) associado aos pontos macroscópicos $\bar{x} = (0,925, 0,025)$ m (curvas inferiores) e $\bar{x} = (0,975, 0,025)$ m (curvas superiores), para o Problema 6.9. A solução completa nos nós correspondes também estão apresentadas.



(a) Solução completa em torno de $\bar{x}_1 = 0,975$ m.



(b) Solução no EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} = (0,975, 0,025)$ m para o modelo multiescala com a microescala em regime transiente. Apenas a metade superior do EVR está apresentada.

Figura 6.24 – Comparação dos mapas de temperatura em $t = 12$ s para a solução convencional por elementos finitos (solução completa) e para a solução multiescala com a consideração da inércia térmica da microescala.

microscópica é igual à da Fig. 6.10c. As propriedades das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 6.9, que também contém as propriedades térmicas dos constituintes. Utilizou-se para as simulações um incremento de tempo $\Delta t = 2$ s.

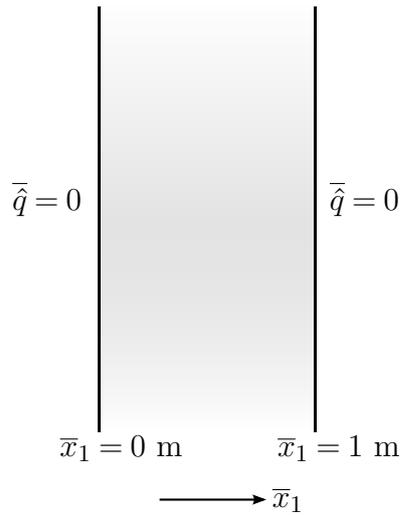
Tabela 6.9 – Propriedades térmicas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 6.10

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Matriz	Inclusões
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,9 \times 10^2$	$3,9 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$1,0 \times 10^0 \mathbf{1}$	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,0 \times 10^3$	$9,0 \times 10^3$
r	W m^{-3}	—	0	$9,0 \times 10^7$
Elementos	—	1 Quad4	800 Tri3	
Nós	—	4	441	

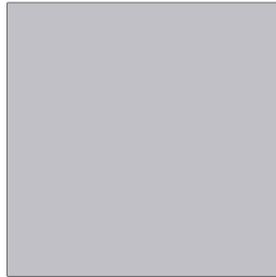
A solução na macroescala apresenta uma grande diferença para os modelos microscópicos transiente e com $\text{div } \mathbf{q} = 0$ (veja a Fig. 6.26). A diferença para as soluções na microescala, no entanto, é ainda maior. Para o modelo microscópico transiente, os fios apresentam-se mais quentes que a matriz e o nó central do EVR é aquele em que a temperatura é mais defasada em relação aos fios. Já para o modelo microscópico com $\text{div } \mathbf{q} = 0$, a temperatura é constante no EVR para cada instante de tempo (veja a Fig. 6.27).

Agora será suposto que o material é perfeitamente periódico, de forma que possa ser modelado pela união de vários EVRs, lado a lado. A atenção ficará restrita à simulação desse problema completo, isto é, considerando as inclusões diretamente sobre a escala macroscópica, sem fazer uso do modelo multiescala. Utilizando argumentos similares aos utilizados para justificar a escolha de apenas 1 elemento macroscópico, o problema recém descrito pode ser simulado apenas com o elemento apresentado na Fig. 6.28, com fluxo de calor nulo prescrito em todas as faces. Espera-se que a solução desse problema seja reproduzida pelo método multiescala.

As soluções em nós de particular interesse estão apresentadas na Fig. 6.29. Há uma boa concordância entre a solução convencional por elementos finitos e a solução na microescala, quando seus efeitos de inércia térmica são considerados. Por outro lado, a consideração de $\text{div } \mathbf{q} = 0$ na microescala dá origem a valores de temperatura muito distantes do esperado. A Fig. 6.30 apresenta a solução na microescala com a consideração dos seus efeitos de inércia térmica, bem como a solução convencional por elementos finitos, para o instante de tempo $t = 8$ s. A consideração dos efeitos de inércia térmica da microescala é particularmente importante quando a microestrutura do material depende de sua história térmica.



(a) Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 1 \text{ m}$, com temperatura inicial nula e geração de calor na microescala, é submetida às condições de contorno apresentadas acima.



(b) Malha macroscópica, definida no domínio $\bar{x}_1 = [0, 0,05] \text{ m}$ e $\bar{x}_2 = [0, 0,05] \text{ m}$. Todas as faces estão isoladas termicamente.

Figura 6.25 – Representação esquemática e malha macroscópica para o Problema 6.10. A malha microscópica é igual à da Fig. 6.10c.

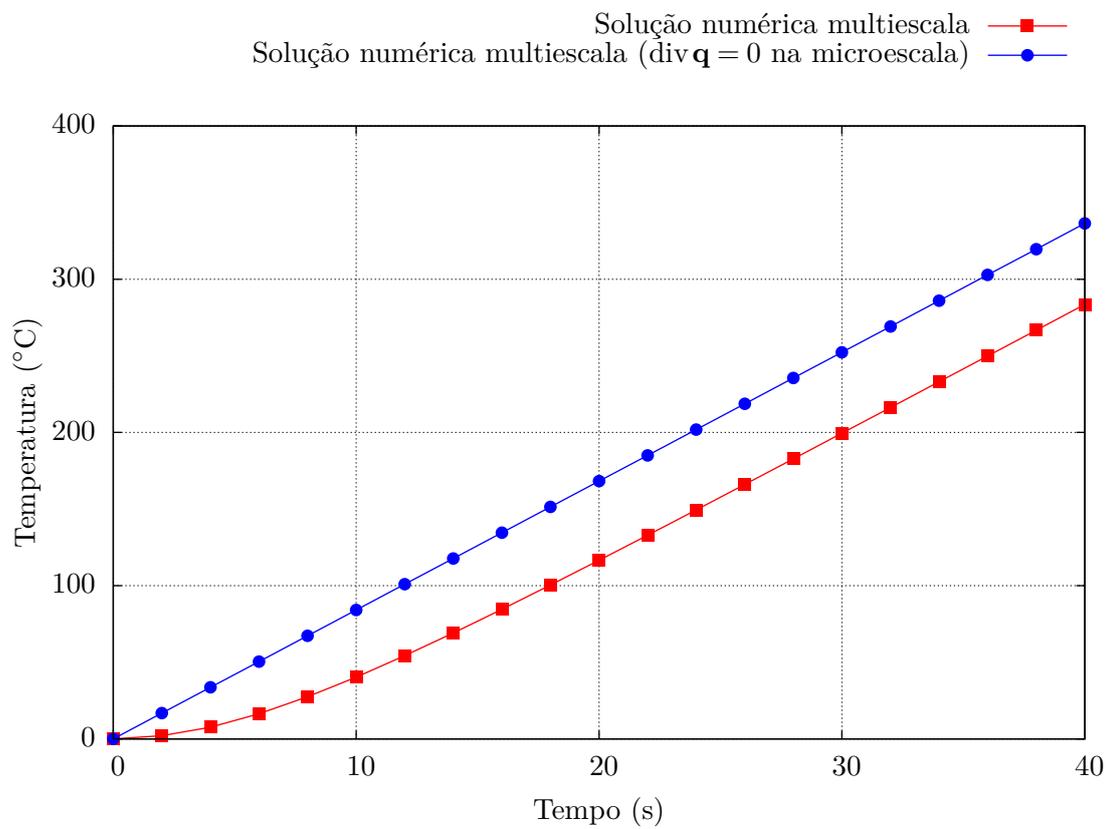
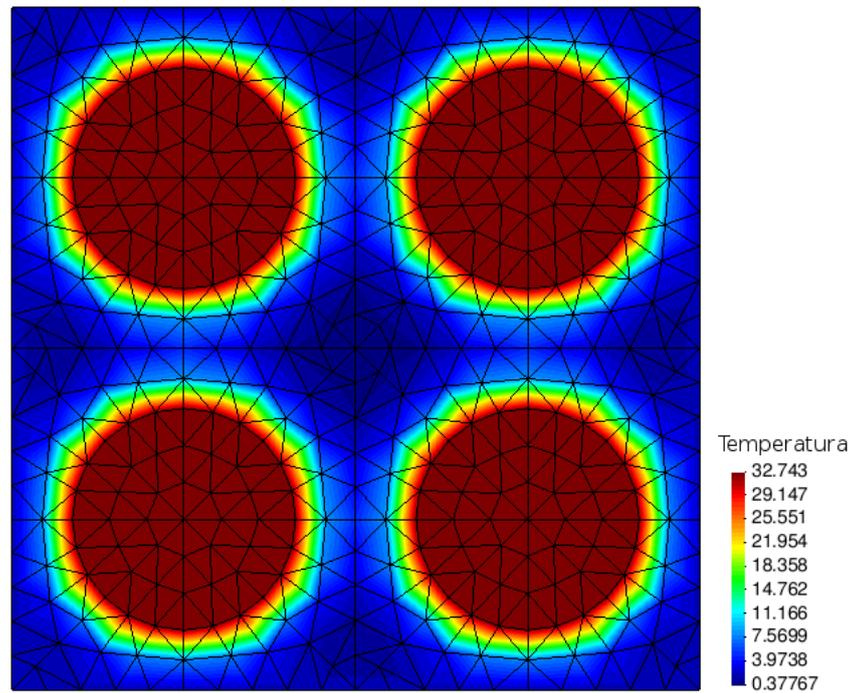
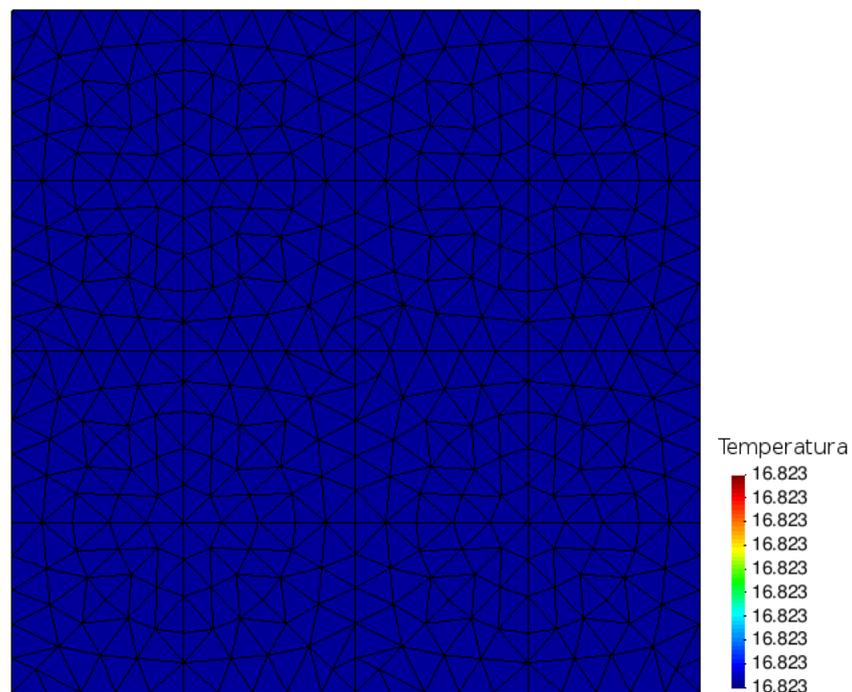


Figura 6.26 – Comparação entre as soluções macroscópicas do Problema 6.10, considerando a microescala em regime transiente ou estacionário sem geração de calor ($\text{div} \mathbf{q} = 0$). A solução apresentada diz respeito ao nó em $\bar{\mathbf{x}} = (0, 0)$.



(a) Microescala em regime transiente.



(b) Microescala em regime estacionário sem geração de calor.

Figura 6.27 – Comparação entre as soluções microscópicas do Problema 6.10 para o primeiro incremento de tempo ($t = 2$ s), com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário sem geração de calor. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,0106, 0,0106)$ m.

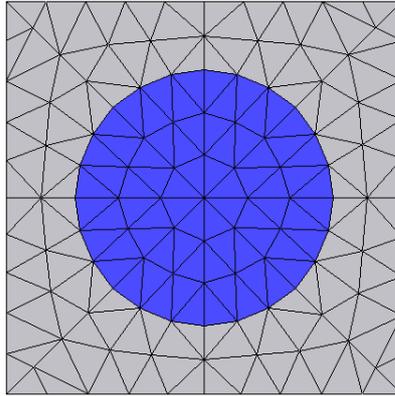


Figura 6.28 – Malha utilizada na solução convencional por elementos finitos do Problema 6.10.

Esse possivelmente seja o resultado numérico mais importante desta tese. Seria interessante, fazendo o uso de simulações semelhantes à recém descrita, verificar o efeito que algumas alterações no modelo trariam aos resultados, tais como (a) impor que a temperatura macroscópica fosse dada pela média da temperatura na microescala, (b) prescrever condições de contorno periódicas, dentre outras. De fato, a simulação descrita anteriormente poderia servir de base para várias comparações entre diferentes modelos multiescala.

OBSERVAÇÃO 6.3: A solução macroscópica obtida para o Problema 6.10 não é perfeitamente homogênea. Isso provavelmente é um artefato causado pela assimetria da malha do EVR.

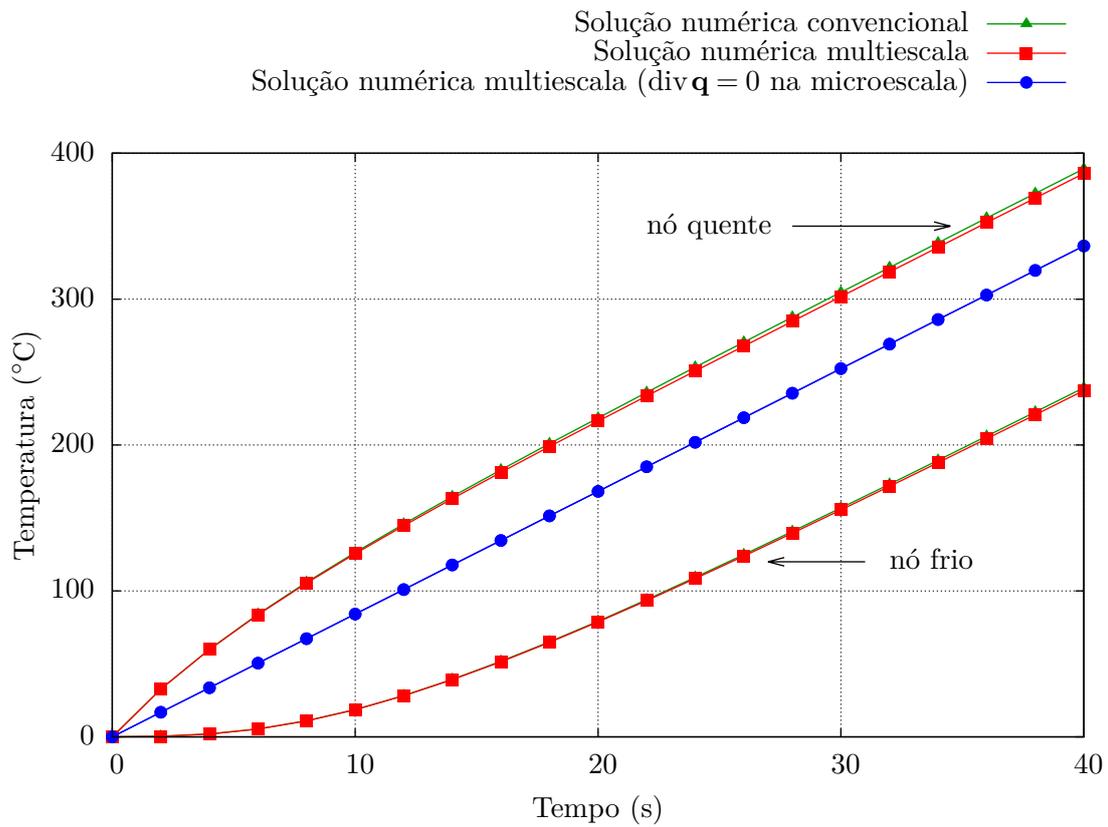
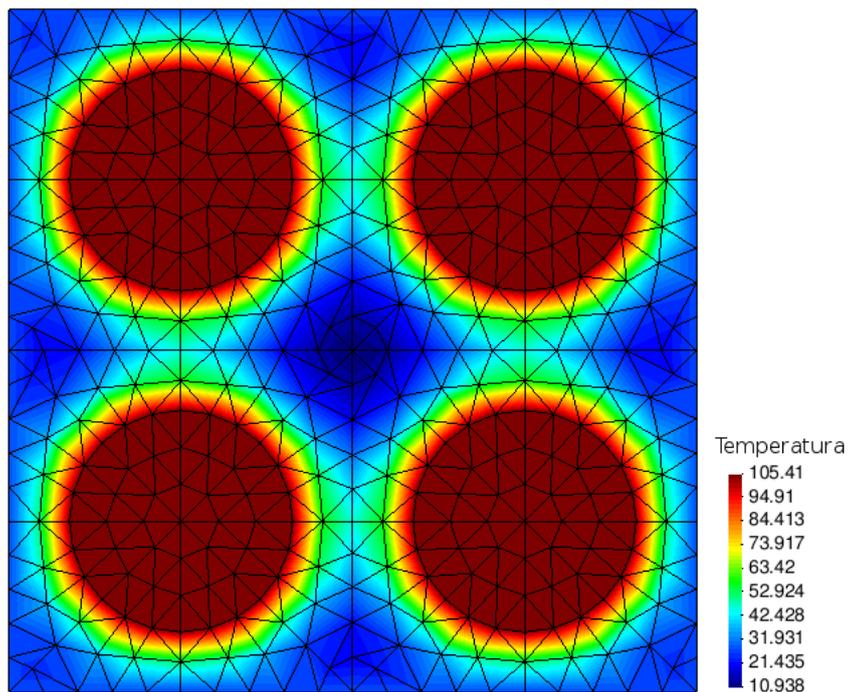
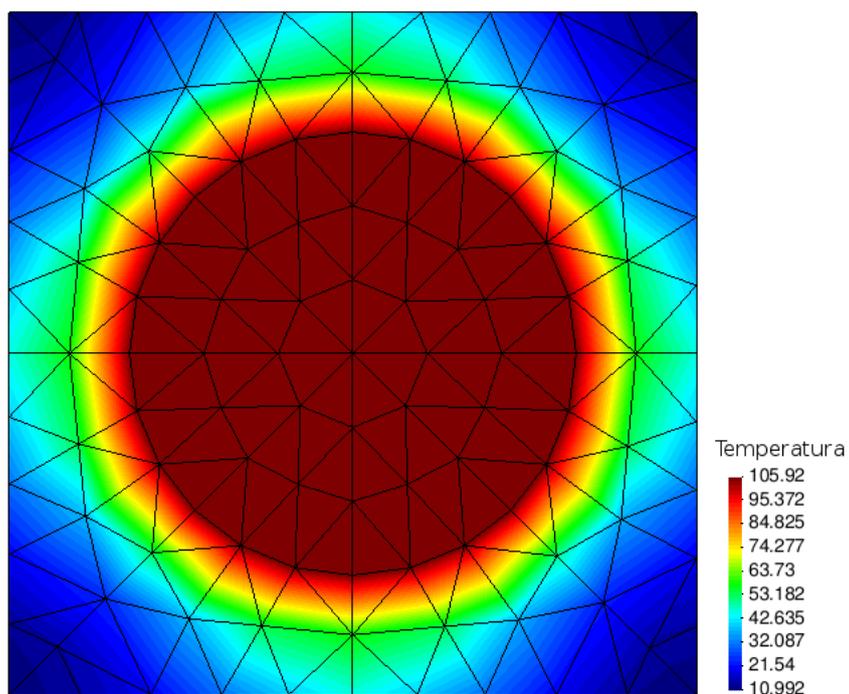


Figura 6.29 – Soluções do Problema 6.10 no nó frio (nó central do EVR) e no nó quente (nó central da inclusão) para o EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,0106, 0,0106)$ m. Para a microescala em regime estacionário sem geração de calor, a solução é igual para todos os nós do EVR em cada instante de tempo. A forma pela qual se obtém a solução convencional é descrita no texto.



(a) Solução na microescala obtida pelo método multiescala.



(b) Solução convencional obtida pelo método dos elementos finitos ao prescrever-se fluxo de calor nulo em todas as faces do corpo.

Figura 6.30 – Comparação entre as soluções do Problema 6.10 para o instante de tempo $t = 8$ s.

7 APLICAÇÃO: CURA DE ELASTÔMEROS CARREGADOS

Neste capítulo o método multiescala desenvolvido é aplicado para a modelagem dos fenômenos acoplados de condução de calor e cinética química associados à cura de um elastômero. Tendo em vista a dificuldade de conhecer-se as propriedades dos materiais, bem como das interfaces, este capítulo representa apenas uma exposição das possibilidades de aplicação do método desenvolvido neste trabalho. Uma modelagem mais realista torna necessário um conhecimento mais preciso das propriedades dos materiais.

Inicialmente, na Seção 7.1 será descrito o processo de cura de um elastômero. Logo após, na Seção 7.2, será descrita a modelagem do fenômeno de cura. Na Seção 7.3 serão feitas mais verificações do modelo multiescala: inicialmente um problema acoplado de condução de calor e cinética química em um material homogêneo será resolvido pelo método multiescala e pelo método convencional de elementos finitos; após, será simulado um caso totalmente hipotético, para o qual será verificada a importância de considerar a inércia térmica da microescala. Por fim, na Seção 7.4, serão simulados dois problemas de cura de um elastômero carregado. Conforme discutido neste capítulo, essas simulações têm como principal objetivo demonstrar a aplicabilidade do método. A modelagem de um fenômeno real exige o conhecimento mais preciso de determinadas propriedades dos materiais.

7.1 Cura de elastômeros carregados

Elastômeros são polímeros que exibem elasticidade como a da borracha¹ [Alemán *et al.*, 2007], ou seja, apresentam deformações elevadas e recuperáveis produzidas a baixos níveis de tensão [Callister e Rethwisch, 2009, p. 571]. Os elastômeros podem sofrer alongamentos reversíveis de até 600 – 1.000% [François *et al.*, 2012, p. 91].

Um elastômero, como sintetizado, é essencialmente um líquido com baixa elasticidade e resistência [Hamed, 2001, p. 19]. O exemplo mais comum de elastômero é a borracha natural, a qual é produzida a partir do látex da seringueira (*Hevea brasiliensis*), e consiste principalmente de *cis*-poliisopreno [Hamed, 2001, p. 14], cuja estrutura química está apresentada na Fig. 7.1. A denominação *cis* resulta do fato de que, na cadeia polimérica, o grupo CH₃ e o átomo H estão posicionados do mesmo lado da ligação dupla [Callister e Rethwisch, 2009, p. 549].

Para adquirir propriedades mais interessantes do ponto de vista de aplicações, o elastômero sofre um processo denominado *vulcanização*, ou *cura*, que consiste na formação de uma rede molecular com ligações cruzadas, cuja consequência é aumentar a elasticidade e diminuir a plasticidade do material. Uma ligação cruzada é uma ligação química entre as cadeias e pode consistir, por exemplo, de um único átomo de enxofre ou de um grupo

¹Por esse motivo, elastômeros são popularmente conhecidos como *borrachas*.

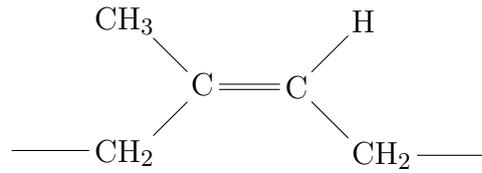


Figura 7.1 – Estrutura química do *cis*-poliisopreno.

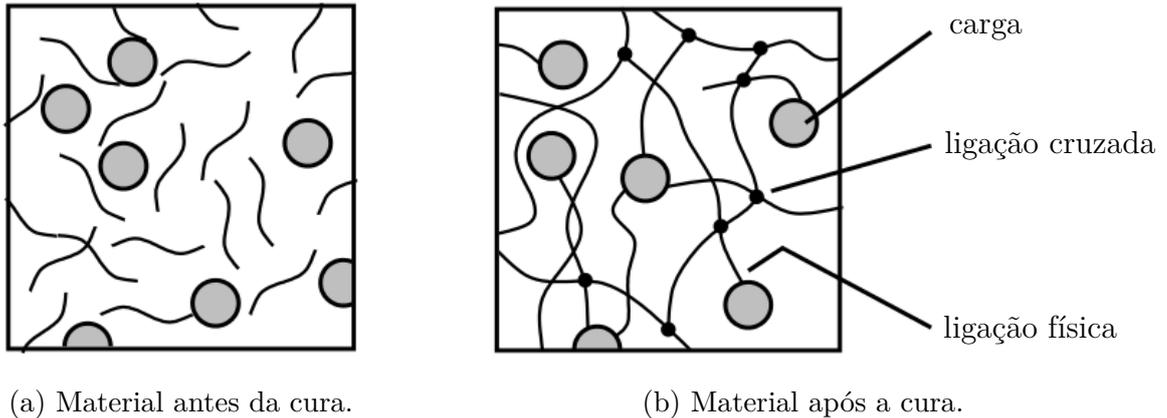


Figura 7.2 – Modelo molecular do processo de cura de um elastômero carregado. Adaptado de André e Wriggers, 2005.

deles, de uma ligação carbono-carbono, etc. [Coran, 2005, p. 322–323].

A Fig. 7.2 apresenta esquematicamente um elastômero (com cargas) antes e após a cura. A vulcanização geralmente se realiza por meio do aquecimento do elastômero, misturado a *agentes vulcanizantes* em um molde sob pressão. O primeiro método comercial de vulcanização data do ano de 1841 e é atribuído a Charles Goodyear, consistindo do aquecimento da borracha natural com enxofre, que é, até os dias atuais, o agente vulcanizante mais utilizado para a fabricação de compostos de borracha. Após a cura, a borracha se torna praticamente insolúvel em qualquer solvente, impossibilitando processamentos em que a borracha precise fluir, como por exemplo, na extrusão. Assim, a cura deve ser aplicada ao corpo em sua forma final [Coran, 2005, p. 321–323], [Guimarães, 2008].

Um conceito importante associado ao problema de cura é o estado, ou grau, de cura de um elastômero², que indica a razão da reação de cura que se processou, e que pode ser estimado a partir de medidas obtidas em equipamentos denominados reômetros. Um dos reômetros existentes é o de disco oscilatório, apresentado na Fig. 7.3. A amostra elastomérica é inserida na cavidade e então o torque necessário para manter uma dada amplitude de oscilação é medido, em uma certa temperatura [Coran, 2005, p. 326]. Curvas típicas obtidas nestes experimentos estão apresentadas na Fig. 7.4. Inicialmente, quando a amostra é aquecida, a viscosidade diminui, causando uma redução no torque. Quando o

²A expressão estado, ou grau, de vulcanização também é válida.

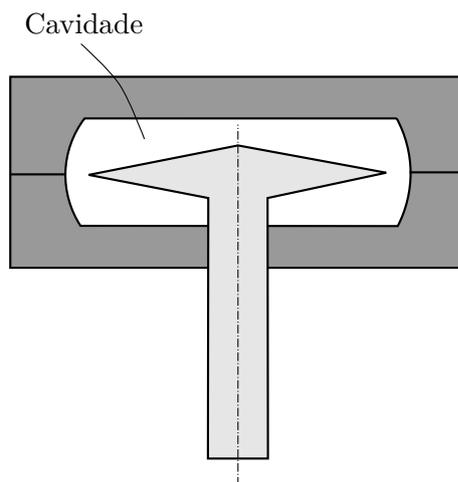


Figura 7.3 – Reômetro de disco oscilatório. Adaptado de Coran, 2005, p. 326.

material começa a vulcanizar³, o comportamento elástico se acentua e, conseqüentemente, observa-se um aumento no torque. Embora possa haver cisão de cadeias simultaneamente, o aumento no torque significa que a formação das ligações cruzadas é o fenômeno dominante. Se a curva atinge um platô, o material está curado e tem-se uma rede estável. No entanto, quando o processo de cisão de cadeias torna-se dominante, observa-se uma diminuição do torque com o tempo. Esse fenômeno é denominado *reversão*. Alguns compostos apresentam um aumento de torque com o tempo. Isso geralmente ocorre devido à quebra de ligações polissulfídricas e posterior formação de ligações cruzadas com menor quantidade de átomos de enxofre, aumentando o número total de ligações cruzadas [Hamed, 2001, p. 21]. Esse fenômeno é conhecido como *marcha*⁴ [Coran, 2005, p. 327].

A adição de cargas (partículas) pode aumentar a resistência de uma borracha amorfa em até 10 vezes [Hamed, 2001, p. 23] (ver Fig. 7.2). De fato, não fosse pela presença desses materiais particulados, a ampla gama de aplicações existente para os elastômeros não seria possível [Donnet e Custodero, 2005, p. 367]. Como materiais utilizados como cargas, pode-se citar o negro de fumo, a sílica, argilas, grafeno, dentre outras [Valentín *et al.*, 2010]. Para um melhor reforço, as partículas devem ser pequenas. Uma carga grosseira geralmente não irá reforçar o material. Essas cargas até podem ser utilizadas para aumentar levemente o módulo de elasticidade do composto, porém reduzem significativamente a deformação de ruptura [Donnet e Custodero, 2005, p. 368]. Outros fatores importantes das cargas são a estrutura, descrita mais adiante para o negro de fumo, e as características químicas da superfície [Hamed, 2001, p. 24]. Uma formulação típica para um composto de borracha natural carregado com negro de fumo, para uso geral em engenharia, pode ter, por exemplo, 25, 50, 75 phr de carga, em que a unidade phr vem do inglês *Parts per Hundred Rubber* e significa *partes por 100 partes de borracha*

³O tempo necessário para o início do processo de vulcanização é denominado *tempo de indução*.

⁴O termo *marcha* foi traduzido livremente da expressão *marching cure*, encontrada em algumas literaturas em língua inglesa.

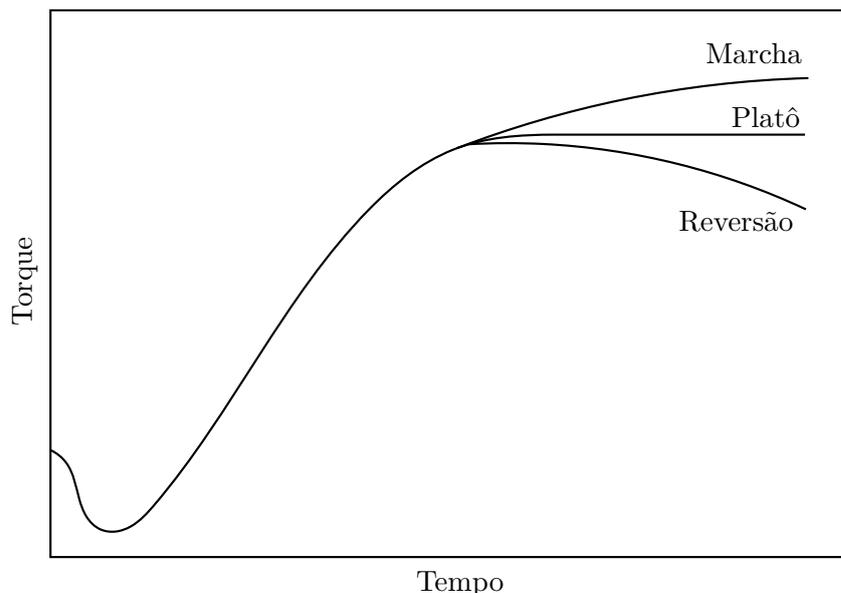


Figura 7.4 – Três tipos de respostas distintas observadas nas medidas obtidas em um reômetro de disco oscilatório. Adaptado de Hamed, 2001, p. 21.

(em peso) [Hamed, 2001, p. 30].

A borracha é um material que apresenta baixa difusividade térmica. Em um regime transiente de condução de calor, tal como no processo de cura de um corpo espesso, a distribuição de temperatura será significativamente heterogênea. Uma vez que a reação de cura é ativada pela temperatura, o grau de cura do material será não-uniforme. Por outro lado, já que a reação de cura libera calor, observa-se um acoplamento entre os problemas de transferência de calor e de cinética química. Nesse contexto, é importante observar que as cargas geralmente modificam a difusividade térmica do composto elastomérico e, como consequência, alteram a cinética de cura. No trabalho de Bafrnec *et al.*, 1999, por exemplo, observa-se um aumento de 1×10^{-7} para $1,8 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ na difusividade térmica de um certo composto elastomérico ao se aumentar a quantidade de negro de fumo de 27% para 44% em peso. De acordo com o trabalho de De *et al.*, 2013, o tempo ótimo de cura e o tempo de indução diminuem ao se adicionar negro de fumo a um compósito elastomérico de borracha natural, borracha de polibutadieno e borracha recuperada.

Na indústria de pneus, por exemplo, utiliza-se termopares em diversas regiões do produto para monitoramento da temperatura [Pinheiro, 2001, p. 64], com a finalidade de estimar o grau de cura local. Entretanto, esse processo de obtenção da história térmica demanda um longo tempo, além de ser destrutivo [Pinheiro, 2001, p. 65]. Uma alternativa é resolver o problema acoplado de cinética química e condução de calor numericamente, o que pode ser realizado determinando-se previamente as propriedades do composto em análise. Para cada composto, é obviamente necessário determinar as propriedades de interesse antes de resolver o problema numericamente. Um trabalho importante nesse sentido é o de Toth *et al.*, 1991, onde os autores acoplam o problema de condução de

calor e cinética química para simular a cura de pneus utilizando o método dos elementos finitos.

Nesse contexto, a tentativa de considerar o comportamento individual dos componentes, para então resolver o problema por meio da modelagem da microestrutura do material, consiste em um avanço interessante.

Sabe-se, entretanto, conforme discutido nos Caps. 1 e 4, que os recursos computacionais atualmente disponíveis impossibilitam a solução do problema nessa *escala fina* (veja a idealização da Fig. 4.1). Para lidar com essa situação, será empregado o método multiescala desenvolvido nesta tese. Existem, no entanto, várias dificuldades para executar a modelagem proposta. A primeira delas é escassez de trabalhos na literatura com as propriedades do elastômero não-carregado, bem como das cargas isoladamente.

Para as simulações, os efeitos de difusão de massa serão desprezados. Além disso, embora seja notório que um corpo elastomérico se deforme durante o processo de cura, o material a ser modelado será assumido como infinitamente rígido, já que o modelo desenvolvido neste trabalho não incorpora os efeitos mecânicos. Portanto, apesar de ser um importante passo na modelagem completa da cura de um composto elastomérico carregado, o acoplamento com o problema mecânico é indicado como um trabalho futuro.

Outro ponto a ser destacado é que *serão consideradas duas fases*:⁵ a *matriz*, constituída pelo elastômero (ou elastômeros) e por todos os outros componentes, tais como aceleradores de cura, exceto as cargas; e as *cargas*, as quais serão individualmente consideradas se houver mais de um tipo. A ideia é que, conhecendo as propriedades individuais da matriz e da(s) carga(s), seja possível modelar a microestrutura (fração de cada fase, distribuição e morfologia) e então resolver o problema acoplado de cinética química e condução de calor. Uma hipótese fundamental adotada nessa aplicação é de que não há necessidade de modelar os fenômenos de interface. Alternativamente, essa hipótese pode ser enunciada como:

HIPÓTESE 7.1: Assume-se que o modelo cinético para a matriz (sem cargas), cujos parâmetros são determinados experimentalmente, pode ser aplicado na descrição do fenômeno de cura do ponto de vista da microescala; ou seja, assume-se que a carga (quantidade, configuração, etc.) não tenha influência sobre a cinética de cura da matriz.

Essa hipótese nem sempre é válida. Sabe-se, por exemplo, que a densidade de ligações cruzadas diminui significativamente em compostos de borracha natural e em compostos de estireno-butadieno (SBR) ao se adicionar sílica [Valentín *et al.*, 2010], ou seja, a sílica adicionada interage com a matriz de forma a modificar a cinética de cura do composto elastomérico.

Por outro lado, a densidade de ligações cruzadas praticamente não se altera com a quantidade de carga em diversos compósitos, como por exemplo, borracha natural com

⁵Ou dois *tipos* de fases, para ser mais preciso.

negro de fumo e nanocompósitos de borracha natural e grafeno [Valentín *et al.*, 2010]. Essa observação é utilizada como justificativa para a razoabilidade da hipótese mencionada.

7.2 Cinética Química

Nesta seção serão introduzidos alguns conceitos de cinética química utilizados na modelagem da cura de um elastômero.

7.2.1 Conversão e taxa da reação química

Seja uma reação estequiométrica representada por

$$0 = \sum_i \nu_i A_i, \quad (7.1)$$

em que A_i é o i -ésimo reagente ou produto e ν_i é o número de moles de A_i , sendo negativo para reagentes e positivo para produtos.

DEFINIÇÃO 7.1: Seja n_i o número de moles da substância A_i no tempo t . A conversão da reação é definida como [Connors, 1990]

$$\alpha := \frac{n_i - n_i^0}{\nu_i}, \quad (7.2)$$

em que n_i^0 é o número de moles da substância no tempo $t = 0$.

OBSERVAÇÃO 7.1: A grandeza ν_i representa o número de moles que aparece na representação da reação química, Eq. (7.1), ou seja, correspondente à reação completa. Por outro lado, n_i^0 e n_i representam o número de moles presentes nos instantes $t = 0$ e t , respectivamente, ou seja, no início e durante a reação química.

Em termos práticos, a conversão da reação de cura é designada pelo termo estado, ou grau, de cura,⁶ a seguir definido.

DEFINIÇÃO 7.2: De acordo com a norma DIN 53529-2, o estado, ou grau, de cura é definido por

$$\alpha := \frac{S - S_{mín}}{S_{máx} - S_{mín}}, \quad (7.3)$$

onde S é o torque no tempo t e $S_{máx}$ e $S_{mín}$ são, respectivamente, os torques mínimo e máximo (ver Fig. 7.4). Alternativamente, o grau de cura pode ser calculado pela expressão [Isayev e Deng, 1988, p. 341]⁷

⁶Em trabalhos de língua inglesa é muito utilizada a expressão *state of cure* (SOC) para referir-se a essa variável de conversão (veja Isayev e Deng, 1988).

⁷Na referência citada, as grandezas são absolutas, e não por unidade de volume. Aqui, achou-se conveniente expressá-las por unidade de volume.

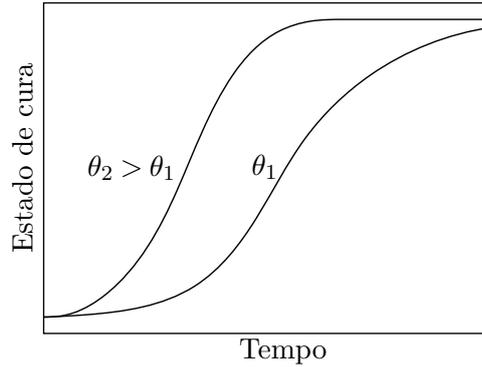


Figura 7.5 – Representação esquemática de como o estado de cura evolui com o tempo nas temperaturas θ_1 e $\theta_2 > \theta_1$.

$$\alpha := \frac{\int_0^t r \, dt}{\int_0^\infty r \, dt}, \quad (7.4)$$

onde as integrais que aparecem no numerador e no denominador representam, respectivamente, o calor liberado pela reação de cura, por unidade de volume, até o instante t e o calor total da reação de cura por unidade de volume. Tais quantidades podem ser obtidas por meio de calorimetria exploratória diferencial (DSC) [Höhne *et al.*, 2003].

A Fig. 7.5 apresenta uma representação esquemática de como o grau de cura evolui para reações de cura isotérmicas em duas temperaturas distintas: θ_1 e $\theta_2 > \theta_1$.

HIPÓTESE 7.2: Para a reação de cura de um elastômero a temperatura constante (processo isotérmico), assume-se que a taxa de reação seja dada por [Chan *et al.*, 1993]

$$\frac{d\alpha}{dt} = K(\theta) f(\alpha), \quad (7.5)$$

onde $K(\theta)$ e $f(\alpha)$ indicam, respectivamente, uma função de θ e uma função de α .

Os modelos de cura isotérmicos são normalmente utilizados para modelar processos de cura não-isotérmicos, por meio da hipótese a seguir enunciada.

HIPÓTESE 7.3: Assume-se, em conformidade com Chan *et al.*, 1993, que um processo não-isotérmico consista de muitos passos infinitesimais isotérmicos.

7.2.2 Determinação do calor liberado pela reação de cura

O calor liberado pela reação de cura até o tempo t , por unidade de volume, pode ser determinado pela Eq. (7.4) como

$$r = \frac{d\alpha}{dt} \int_0^\infty r \, dt. \quad (7.6)$$

Então, fazendo uso da Eq. (7.5), tem-se

$$r = K(\theta) f(\alpha) \int_0^\infty r dt. \quad (7.7)$$

Observando que o calor total da reação por unidade de volume pode ser escrito como

$$\int_0^\infty r dt = -\rho\Delta h, \quad (7.8)$$

onde Δh é a variação de entalpia específica devida à reação, obtém-se a forma final para a densidade de fornecimento de calor:

$$r = -\rho\Delta h K(\theta) f(\alpha). \quad (7.9)$$

7.2.3 Tempo de indução

Há um período inicial no processo de cura de elastômeros durante o qual não há reação química, denominado *tempo de indução*.

HIPÓTESE 7.4: Assume-se, em conformidade com Claxton e Liska, 1964 [apud Isayev e Deng, 1988], que o tempo de indução em um processo de cura *isotérmico* seja descrito por uma equação do tipo Arrhenius:

$$t_i(\theta) = t_0 \exp\left(\frac{\theta_0}{\theta}\right), \quad (7.10)$$

em que t_0 e θ_0 são parâmetros do material que independem da temperatura.

É importante ressaltar que Isayev e Deng, 1988, determinaram o tempo de indução para vários processos de cura isotérmicos e verificaram que a Eq. (7.10) é adequada. A Hipótese 7.3 motiva a seguinte definição para o tempo de indução em um processo de cura não-isotérmico.

DEFINIÇÃO 7.3: Para um processo de cura não-isotérmico, define-se o tempo de indução t_I como aquele para o qual a expressão

$$\int_0^{t_I} \frac{dt}{t_i(\theta)} = 1 \quad (7.11)$$

é satisfeita, onde t_i é dado pela Eq. (7.10) [Isayev e Deng, 1988].

7.2.4 Modelo cinético de Kamal e Sourour

O modelo cinético de Kamal e Sourour, 1973 [apud Shyu *et al.*, 1994] para a cura *isotérmica* é dado por

$$\alpha = \frac{kt^{*n}}{1 + kt^{*n}}, \quad (7.12)$$

em que $t^* := t - t_i$, n é a ordem da reação e a constante de velocidade é dada por uma

função do tipo Arrhenius,

$$k(\theta) = k_0 \exp\left(-\frac{E}{R\theta}\right), \quad (7.13)$$

onde k_0 é o fator pré-exponencial, E é a energia de ativação e $R = 8,3144621(75) \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ é a constante dos gases ideais. Esse modelo descreve muito bem a cura isotérmica de diversos compostos elastoméricos [Chan *et al.*, 1993] e, por esse motivo, foi o escolhido para ser implementado nesta tese.

Como consequência da Hipótese 7.3, a Eq. (7.12) é válida para cada instante de tempo e, por isso, será utilizada neste trabalho para modelar processos de cura não-isotérmicos. Conforme observa-se na Eq. (7.9), a densidade de fornecimento de calor, r , é escrita em termos de $K(\theta)$ e $f(\alpha)$. Portanto, deve-se reescrever o modelo dado pela Eq. (7.12) na forma dada pela Eq. (7.5). Para tal, inicia-se derivando a Eq. (7.12) em relação a t^* [Shyu *et al.*, 1994, p. 320]:

$$\frac{d\alpha}{dt^*} = \frac{nkt^{*n-1}}{[1 + kt^{*n}]^2}. \quad (7.14)$$

O tempo t^* , por sua vez, pode ser determinado a partir da Eq. (7.12) como

$$t^* = \left[\frac{\alpha}{k(1-\alpha)} \right]^{1/n}. \quad (7.15)$$

Substituindo a Eq. (7.15) na Eq. (7.14), tem-se uma nova expressão para o modelo de Kamal e Sourour [Shyu *et al.*, 1994, p. 320]:

$$\frac{d\alpha}{dt^*} = nk^{1/n} \alpha^{(n-1)/n} (1-\alpha)^{(n+1)/n} = K(\theta) f(\alpha), \quad (7.16)$$

onde

$$K(\theta) = k(\theta)^{1/n} \quad (7.17)$$

e

$$f(\alpha) = n\alpha^{(n-1)/n} (1-\alpha)^{(n+1)/n}. \quad (7.18)$$

Na solução do problema de cinética química, detalhado mais adiante, será necessário o conhecimento de $df(\alpha)/d\alpha$. É adequado, entretanto, que essa expressão seja apresentada neste ponto do texto. Da Eq. (7.18), pode-se escrever

$$\frac{df(\alpha)}{d\alpha} = (n-1)\alpha^{-1/n} (1-\alpha)^{(n+1)/n} - (n+1)\alpha^{(n-1)/n} (1-\alpha)^{1/n}. \quad (7.19)$$

7.2.5 Determinação dos parâmetros do modelo

Os parâmetros cinéticos do modelo, tal como o tempo de indução, podem ser determinados por meio do ajuste do modelo a dados experimentais obtidos em várias varreduras isotérmicas em um calorímetro exploratório diferencial [Isayev e Deng, 1988,

p. 347].

7.2.6 Cálculo de r'

A partir da Eq. (7.9), a derivada de r com θ (veja a Eq. (5.5)) pode ser escrita como

$$r' = \frac{rE}{nR\theta^2}. \quad (7.20)$$

7.2.7 Solução do problema de cinética química

Ao longo desta seção foram apresentadas as equações relativas à cinética química. Foi mostrada a dependência da densidade de fornecimento de calor, r , com o estado de cura, α , dada pela Eq. (7.9). Nesta subseção serão apresentadas as discretizações temporais das equações pertinentes. Conforme observa-se da Eq. (7.11), para que a reação química seja ativada em um determinado ponto da matriz elastomérica, é necessário que a grandeza

$$Z := \int_0^t \frac{dt}{t_i(\theta)} \quad (7.21)$$

atinja o valor unitário. A discretização temporal dessa equação pode ser expressa conforme a seguir.

Enunciado 7.1 (Determinação do início da reação de cura): Para cada intervalo de tempo \mathcal{I}_n , $n = 1, 2, \dots, N$, calcule

$$dZ = \frac{\Delta t}{t_i(\theta_n)} \quad (7.22)$$

e, então, determine o novo valor de Z por meio de

$$Z_n = Z_{n-1} + dZ, \quad (7.23)$$

com $Z_0 = 0$. Quando $Z_n \geq 1$, a reação de cura tem início.

Já a forma discreta da equação de cinética química, Eq. (7.16), é expressa como:

Enunciado 7.2 (Forma discreta da equação de cinética química): Para cada intervalo de tempo \mathcal{I}_n , $n = 1, 2, \dots, N$, se $Z_n \geq 1$ e $\alpha_{n-1} < 1$, encontre α_n , tal que

$$G(\alpha_n) = (\alpha_n - \alpha_{n-1}) - K(\theta_n) f(\alpha_n) \Delta t = 0, \quad (7.24)$$

com $0 \leq \alpha_n \leq 1$ e $\alpha_0 = 0$.

Da Eq. (7.24), pode-se expressar o diferencial de $G(\alpha_n)$ como

$$G'(\alpha_n; d\alpha) = \frac{dG(\alpha_n)}{d\alpha_n} d\alpha \quad (7.25)$$

$$= \left(1 - K(\theta_n) \frac{df(\alpha_n)}{d\alpha_n} \Delta t \right) d\alpha. \quad (7.26)$$

Seja uma determinada iteração k , com conversão correspondente α_n^k . A nova estimativa para a conversão é dada por

$$\alpha_n^{k+1} = \alpha_n^k + d\alpha, \quad (7.27)$$

em que a atualização $d\alpha$ é obtida de

$$-G'(\alpha_n^k; d\alpha) = G(\alpha_n^k). \quad (7.28)$$

Em geral, a estimativa inicial pode ser assumida como

$$\alpha_n^0 = \alpha_{n-1}. \quad (7.29)$$

7.2.8 Algoritmo para a solução do problema de cinética química

A subrotina `Cinetica_Quimica` e a função `Determine_Alfa`, apresentadas por meio de seus Algoritmos 17 e 18, são utilizadas nos cálculos do vetor resíduo e da matriz tangente associados à densidade de fornecimento de calor no problema associado à microescala, bem como na atualização das variáveis internas.

OBSERVAÇÃO 7.2: A escolha de Δt tem influência no algoritmo de solução para o problema de cinética química. De fato, observou-se que a partir de um determinado valor de Δt pode ocorrer de, ao iniciar o fenômeno de cura, obter-se valores negativos para α dentro do método de Newton-Raphson (veja a linha 11 do Algoritmo 18), o que resultará em indeterminação no cálculo de $df/d\alpha$ na próxima iteração (veja a linha 8 do Algoritmo 18 e a Eq. (7.19)). Nesse caso, uma possível estratégia para correção do problema é dividir o intervalo de tempo Δt em intervalos menores apenas para a solução do problema de cinética química. Essa foi a estratégia utilizada no Problema 7.4 (descrito mais adiante, na pág. 128), uma vez que o passo de tempo utilizado no problema multiescala dá origem à indeterminação recém descrita. Nesse procedimento alternativo, o valor das propriedades, em cada um dos novos instantes intermediários de tempo, estão sendo todos assumidos como correspondentes ao instante de tempo n . Essa estratégia relativamente simples é utilizada porque o objetivo do Problema 7.4 é apenas mostrar a aplicabilidade do método. Uma análise mais profunda deste problema e da melhor estratégia de correção será feita futuramente.

Algoritmo 17 Subrotina Cinetica_Quimica

```

1: procedimento CINETICA_QUIMICA( $\theta, t, \Delta t, Z, \alpha, r$ )
2:   Compute o tempo de indução para um processo isotérmico:  $t_i$ . .....▷ (7.10)
3:   Compute o incremento na integral utilizada no tempo de indução:  $dZ$ . .....▷ (7.22)
4:   Atualize o valor da integral:  $Z \leftarrow Z + dZ$ . .....▷ (7.23)
   ▷ Em  $t = 0$ , a variável  $Z$  é inicializada externamente:  $Z \leftarrow 0$ .
5:   se  $Z \geq 1$  então
6:     se  $\alpha < 1$  então
7:       se  $\alpha = 0$  então
8:         Inicialize o estado de cura:  $\alpha \leftarrow 1 \times 10^{-3}$ .
         ▷ Observe que  $\alpha$  não pode ser igual a zero na Eq. (7.19).
9:       fim se
10:      Compute a constante de velocidade da reação química:  $k$ . .....▷ (7.13)
11:      Compute o termo dependente de  $\theta$  na taxa de reação química:  $K$ . .....▷ (7.17)
12:      Compute o estado de cura:  $\alpha = \text{DETERMINE\_ALFA}(\alpha, K, n, \Delta t)$ .
         ▷  $n$  é a ordem da reação.
13:      Compute o termo dependente de  $\alpha$  na taxa de reação química:  $f$ . .....▷ (7.18)
14:      Compute a densidade de fornecimento de calor:  $r$ . .....▷ (7.9)
15:     fim se
16:   fim se
17: fim procedimento

```

Algoritmo 18 Função Determine_Alfa

```

1: função DETERMINE_ALFA( $\alpha_{n-1}, K, n, \Delta t$ )
2:   Inicialize o estado de cura:  $\alpha \leftarrow \alpha_{n-1}$ . .....▷ (7.29)
3:   Inicialize o erro na equação de cinética química:  $e_G \leftarrow 1$ .
4:   enquanto  $e_G > tol_G$  faça
5:     Compute o termo dependente de  $\alpha$  na taxa de reação química:  $f$ . .....▷ (7.18)
     ▷ Se  $\alpha > 1$ , faz-se  $f \leftarrow 0$ .
6:     Compute o resíduo da equação de cinética química:  $G$ . .....▷ (7.24)
7:     Compute o erro em  $G$ :  $e_G \leftarrow |G|$ .
8:     Compute a derivada de  $f$  em relação a  $\alpha$ :  $df/d\alpha$ . .....▷ (7.19)
9:     Compute a derivada de  $G$  em relação a  $\alpha$ :  $dG/d\alpha$ . .....▷ ver (7.26)
10:    Resolva a equação  $-(dG/d\alpha)d\alpha = G$  para  $d\alpha$ . .....▷ (7.25) e (7.28)
11:    Atualize o estado de cura:  $\alpha \leftarrow \alpha + d\alpha$ .
12:  fim enquanto
13:  retorne  $\alpha$ 
14: fim função

```

Tabela 7.1 – Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.1

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$1,5 \times 10^3$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,0 \times 10^{-1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$1,0 \times 10^3$
n	—	—	$1,0 \times 10^0$
k_0	s^{-1}	—	$1,0 \times 10^8$
E	J mol^{-1}	—	$9,0 \times 10^4$
t_0	s	—	$1,0 \times 10^{-9}$
θ_0	K	—	$1,0 \times 10^4$
Δh	J kg^{-1}	—	$-1,0 \times 10^4$
Elementos	—	10 Quad4	4 Quad4
Nós	—	22	9

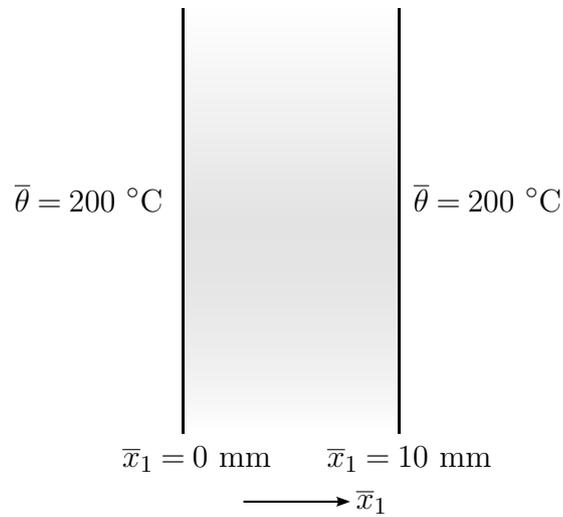
7.3 Problema acoplado de condução de calor e cinética química: verificações do modelo

Nesta seção serão feitas mais duas simulações com o intuito de verificar o modelo. Na primeira delas será utilizado um material homogêneo, e espera-se que a solução na macroescala seja próxima da solução convencional por elementos finitos. Depois, será simulado um caso totalmente hipotético, para o qual será verificada a importância de considerar a inércia térmica da microescala.

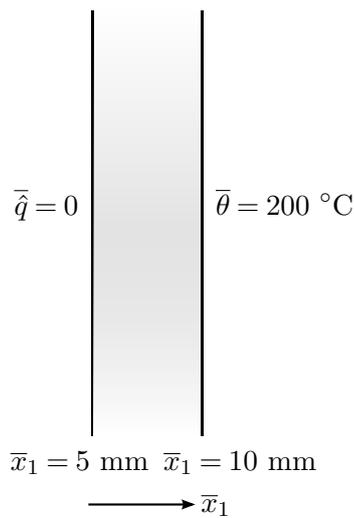
PROBLEMA 7.1: Novamente é proposta a solução de um problema 1D por meio de simulações com elementos 2D. Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 10$ mm homogênea, com temperatura inicial nula, tem suas faces mantidas a 200°C para $t > 0$ (veja a Fig. 7.6a). Devido à simetria em torno de $\bar{x}_1 = 5$ mm, apenas metade do corpo macroscópico é discretizado para a simulação por elementos finitos, impondo-se, então, a condição de fluxo normal nulo em $\bar{x}_1 = 5$ mm (veja a Fig. 7.6b). A discretização do corpo macroscópico está apresentada na Fig. 7.6c, na qual as condições de contorno estão descritas. Utiliza-se um EVR com lado igual a $2 \mu\text{m}$, discretizado de acordo com a Fig. 6.1c. As características das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 7.1, bem como as propriedades térmicas e cinéticas do constituinte. Embora as propriedades do material sejam constantes, há não-linearidade no problema devida à reação de cura. Para a solução do problema utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 1$ s.

Novamente uma solução convencional pelo método dos elementos finitos foi obtida. As soluções multiescala macroscópica e convencional mais uma vez são bastante próximas, conforme a Fig. 7.7.

O próximo caso a ser analisado correspondente a um problema hipotético, no qual uma matriz com elevada difusividade térmica contém inclusões elastoméricas.



(a) Problema original: uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 10 \text{ mm}$ homogênea, com temperatura inicial nula, é submetida às condições de contorno apresentadas acima.



(b) Problema simplificado devido à simetria em $\bar{x}_1 = 5 \text{ mm}$.



(c) Malha macroscópica, definida no domínio $\bar{x}_1 = [5, 10] \text{ mm}$ e $\bar{x}_2 = [0, 0,5] \text{ mm}$. As condições de contorno nas faces verticais estão indicadas em (b), enquanto nas faces horizontais prescreve-se $\bar{q} = 0$, dado o caráter unidimensional do problema.

Figura 7.6 – Representação esquemática e malha do corpo macroscópico para o Problema 7.1.

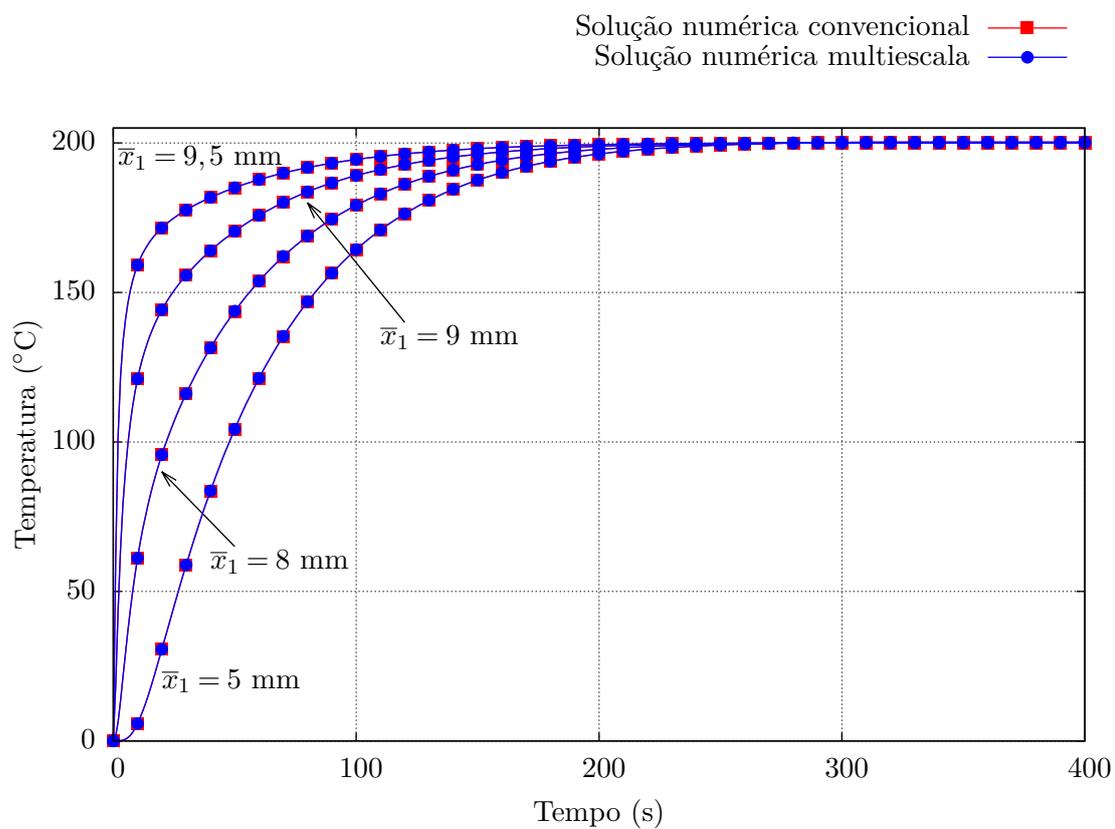
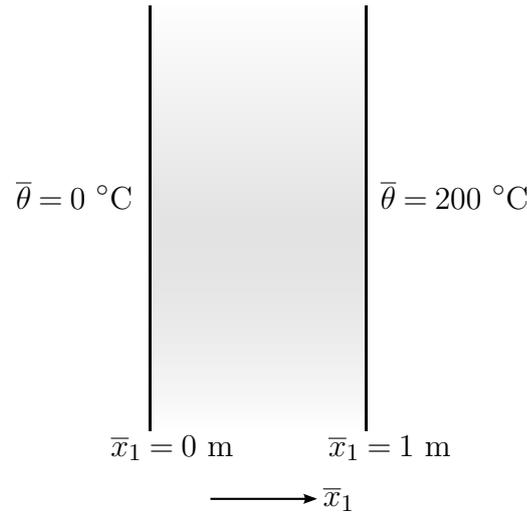
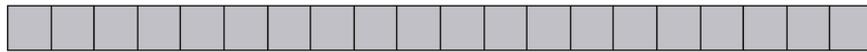


Figura 7.7 – Comparação entre a solução multiescala macroscópica e a solução convencional por elementos finitos para o Problema 7.1. Apenas 1 a cada 10 pontos está apresentado.



(a) Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 1$ m heterogênea, com temperatura inicial nula, é submetida às condições de contorno apresentadas acima.



(b) Malha macroscópica, definida no domínio $\bar{x}_1 = [0, 1]$ m e $\bar{x}_2 = [0, 0,05]$ m. As condições de contorno nas faces verticais estão indicadas em (a), enquanto nas faces horizontais prescreve-se $\bar{q} = 0$, dado o caráter unidimensional do problema.

Figura 7.8 – Representação esquemática e malha macroscópica para o Problema 7.2.

PROBLEMA 7.2: Uma placa $0 \leq \bar{x}_1 \leq 1$ m heterogênea, com temperatura inicial $\bar{\theta}_0 = 0$ °C, tem a face $\bar{x}_1 = 0$ mantida a 0 °C, enquanto a face $\bar{x}_1 = 1$ m é mantida a 200 °C para $t > 0$ (veja a Fig. 7.8a). A Fig. 7.8b apresenta a malha macroscópica utilizada na solução deste problema, bem como a descrição de suas condições de contorno. No que diz respeito à microescala, cada EVR é um quadrado de lado 20 mm, conforme a Fig. 6.10c. As características das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 7.2, que também contém as propriedades térmicas e cinéticas dos constituintes. Para a solução do problema utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 12$ s.

A Fig. 7.9 apresenta as temperaturas macroscópicas correspondentes à microescala em regime transiente ou em regime estacionário sem geração de calor. Conforme pode-se observar, as curvas apresentam uma diferença razoável. Embora esse problema seja hipotético, no sentido de que a matriz é condutora e o elastômero é o material das inclusões, é possível que uma condição semelhante ocorra na prática. Existem cargas com elevada condutividade térmica que têm sido estudadas para reforço de materiais poliméricos. Tal é o caso dos nanotubos de carbono e das folhas de grafeno. Se houver uma situação prática na qual o calor seja conduzido por um caminho condutivo formado pelas inclusões, então a matriz deverá apresentar uma certa defasagem na temperatura em relação às inclusões adjacentes. Nesse caso, como já se demonstrou, a consideração do caráter transiente da

Tabela 7.2 – Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.2

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Matriz	Inclusões
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$3,9 \times 10^2$	$1,5 \times 10^3$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$4,0 \times 10^2 \mathbf{1}$	$3,0 \times 10^{-1} \mathbf{1}$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,0 \times 10^3$	$1,0 \times 10^3$
n	—	—	—	$1,0 \times 10^0$
k_0	s^{-1}	—	—	$1,0 \times 10^8$
E	J mol^{-1}	—	—	$9,0 \times 10^4$
t_0	s	—	—	$1,0 \times 10^{-9}$
θ_0	K	—	—	$1,0 \times 10^4$
Δh	J kg^{-1}	—	—	$-1,0 \times 10^4$
Elementos	—	20 Quad4	800 Tri3	
Nós	—	42	441	

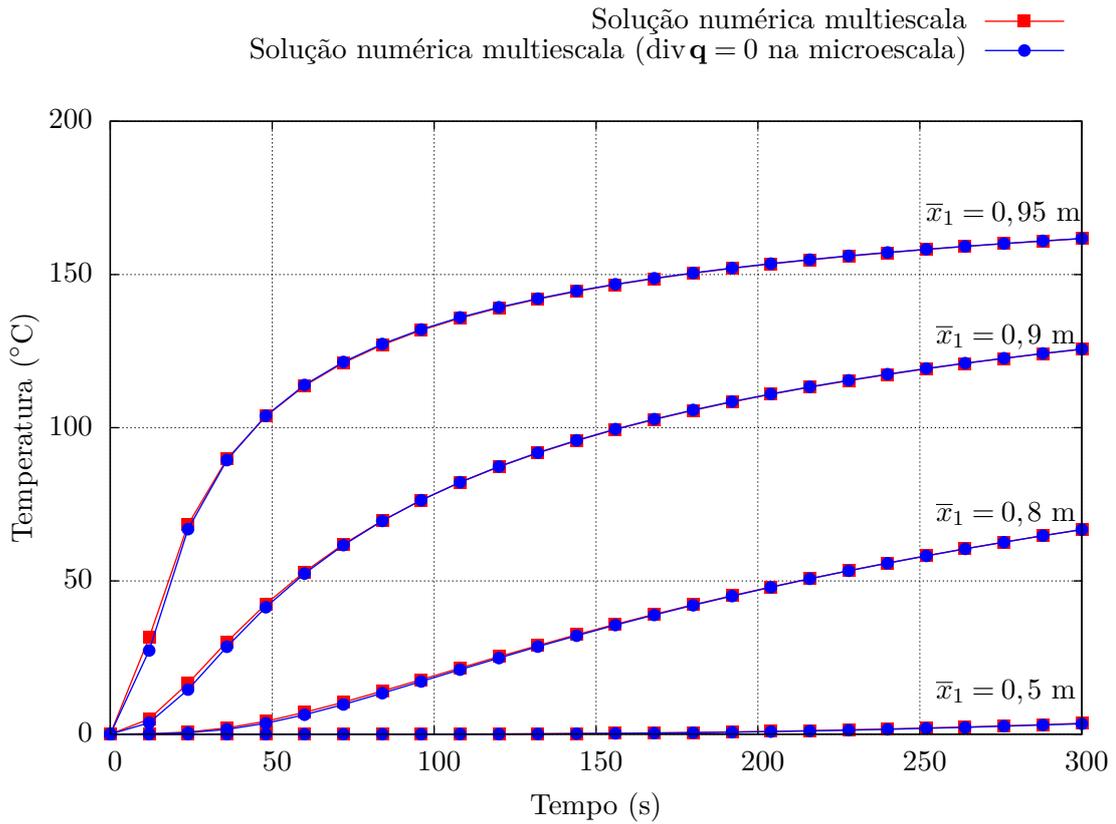
microescala seria fundamental.

A Fig. 7.10 apresenta a solução no nó central da inclusão superior direita do EVR associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, tanto para a microescala em regime transiente quanto em regime estacionário sem geração de calor. As curvas de aquecimento para esse ponto da microescala em particular são muito distintas, com o aquecimento correspondente ao modelo com a microescala transiente sendo muito mais suave.

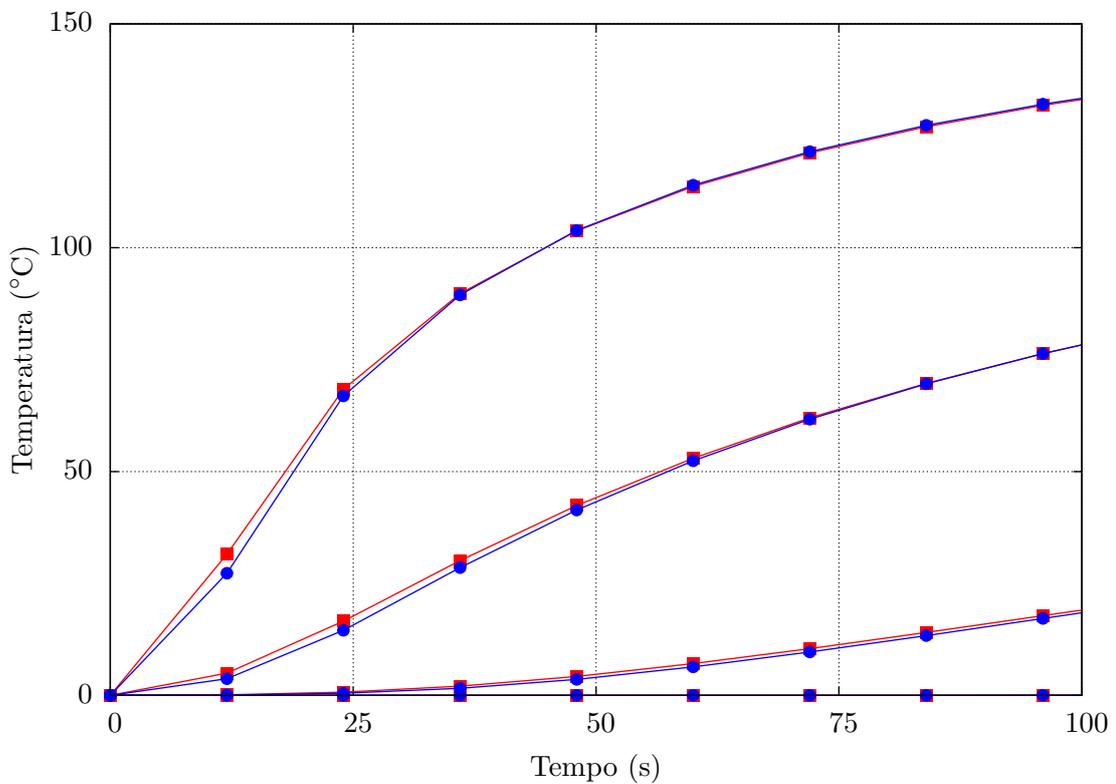
A Fig. 7.11 apresenta o estado de cura das inclusões elastoméricas para a microescala em regime transiente ou com $\text{div} \mathbf{q} = 0$.

OBSERVAÇÃO 7.3: Os valores do estado de cura dizem respeito, originalmente, aos pontos de integração. Para o pós-processamento, os valores dos pontos de integração são extrapolados para os nós, e sobre esses valores nodais extrai-se a média. Por esse motivo, o estado de cura apresenta as características observadas na Fig. 7.11, tal como variar desde zero até um dado valor na transição da matriz para a inclusão; na realidade, a matriz possui estado de cura igual a zero, ou de forma alternativa, não possui estado de cura definido, uma vez que não há reação de cura na matriz.

A diferença entre ambas as soluções é ainda mais facilmente visualizada por meio da Fig. 7.12, que apresenta o estado de cura no centro da inclusão superior direita do EVR ao longo do tempo. De acordo com a Observação 7.3, o valor nodal corresponde a uma extrapolação. Como pode-se observar, é fundamental considerar-se a microescala em regime transiente nesse caso.



(a) Soluções até 300 s.



(b) Visualização de uma porção reduzida do gráfico.

Figura 7.9 – Comparação entre as soluções multiescala macroscópicas para a microescala em regime transiente ou com $\text{div } \mathbf{q} = 0$ para o Problema 7.2.

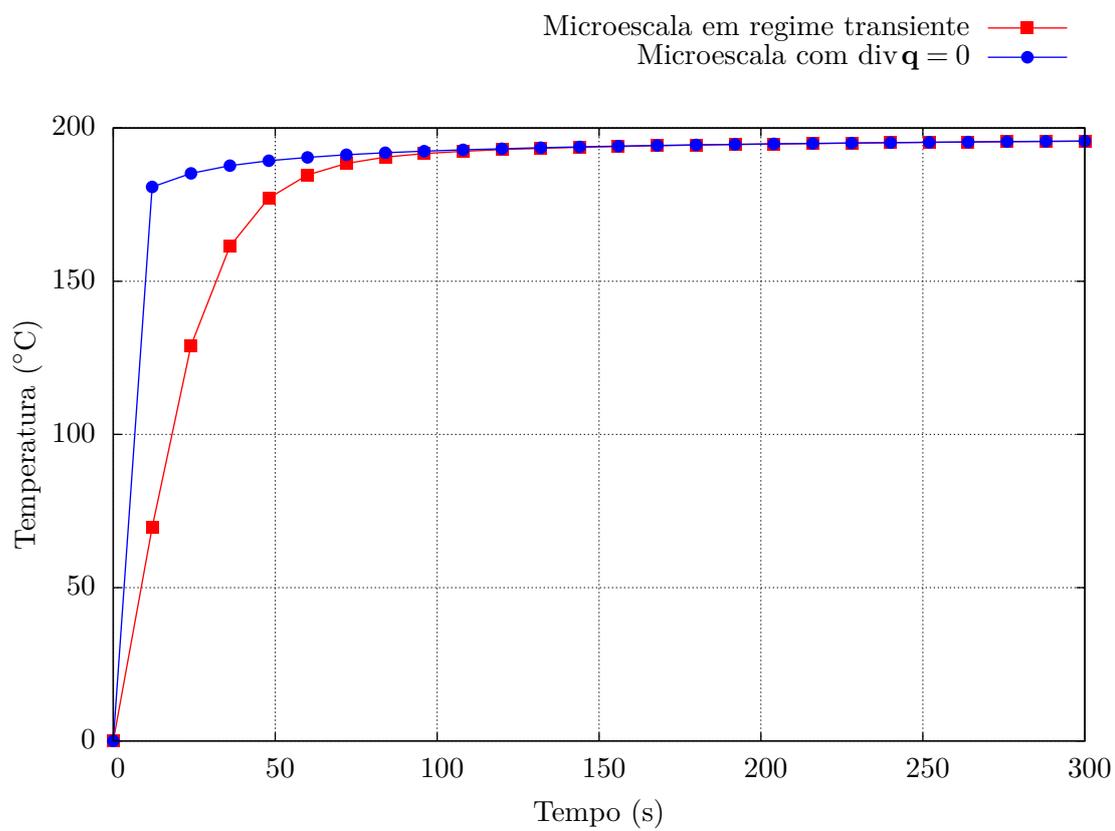
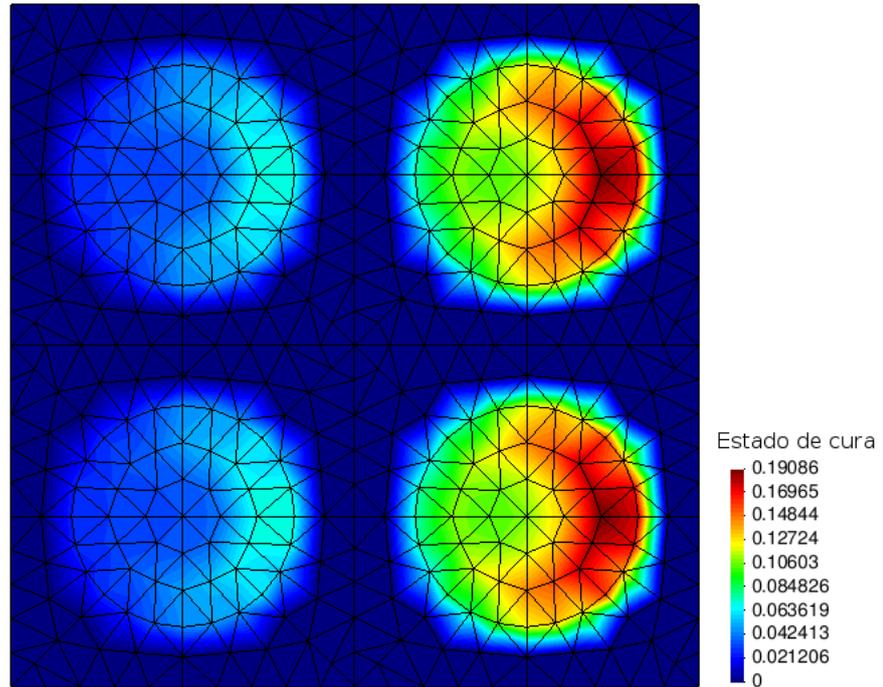
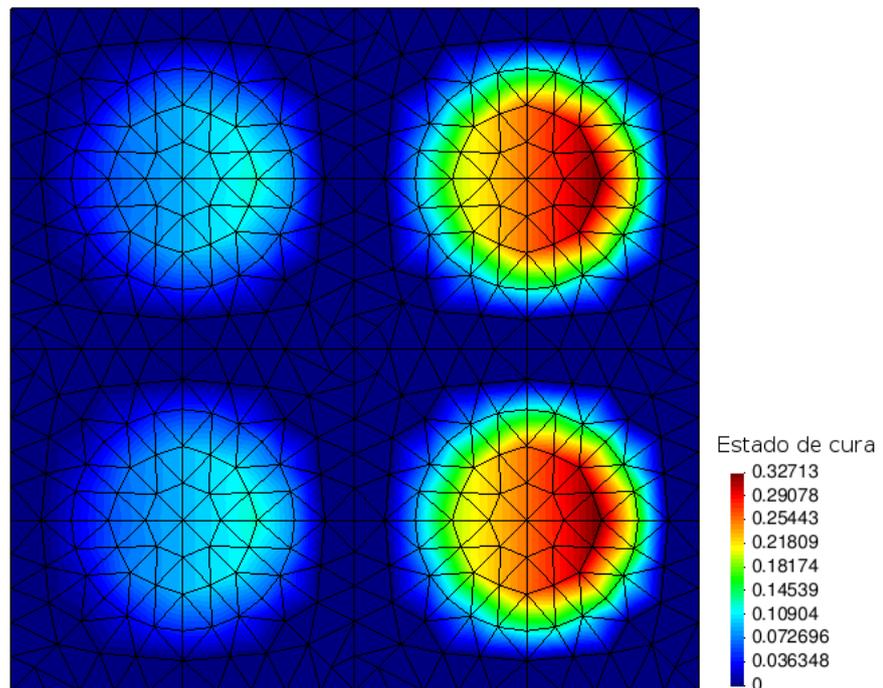


Figura 7.10 – Curva de aquecimento no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 7.11) associado ao ponto de integração localizado em $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$, para o Problema 7.2.



(a) Microescala em regime transiente.



(b) Microescala em regime estacionário sem geração de calor.

Figura 7.11 – Comparação entre o estado de cura para o Problema 7.2 para $t = 60$ s, com a microescala (a) em regime transiente ou (b) em regime estacionário sem geração de calor. Estas soluções dizem respeito a um ponto de integração localizado em $\bar{x} \approx (0,9894, 0,0394)$ m.

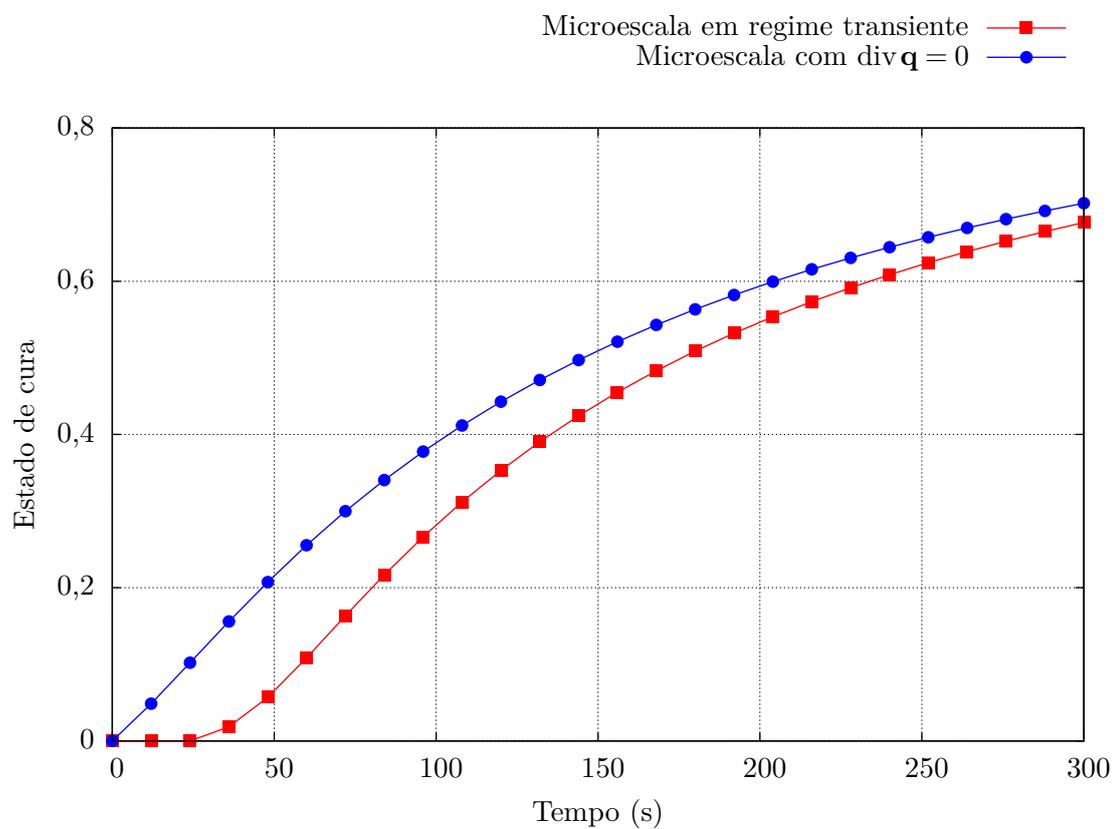


Figura 7.12 – Estado de cura no nó central da inclusão superior direita do EVR (ver Fig. 7.11) associado ao ponto macroscópico $\bar{\mathbf{x}} \approx (0,9894, 0,0394)$ m, para o Problema 7.2.

7.4 Simulação da cura de um elastômero carregado com negro de fumo

Nesta seção pretende-se fazer uma simulação 2D da cura de um elastômero carregado com negro de fumo. O objetivo é demonstrar a aplicabilidade do modelo multiescala desenvolvido.

Para fazer a simulação da cura de um elastômero carregado com negro de fumo, é necessário conhecer as propriedades tanto do elastômero quanto da carga. As propriedades térmicas para formulações típicas de elastômeros podem ser encontradas na literatura com certa facilidade. As propriedades cinéticas, por outro lado, geralmente são fornecidas para um modelo cinético em particular, e são relativamente escassas as referências com as propriedades cinéticas de elastômeros sem cargas. Com relação ao negro de fumo, há dificuldade na determinação do valor da condutividade térmica, conforme será discutido mais adiante.

OBSERVAÇÃO 7.4: A Lei de Fourier é assumida como válida também para os problemas analisados a seguir, embora existam questionamentos quanto à sua validade para materiais de característica (tamanho) nanométrica. Veja, por exemplo, o trabalho de Chang *et al.*, 2008, que evidencia que a referida lei não é válida para nanotubos de carbono e nanotubos de nitreto de boro. Uma modelagem mais realista do fenômeno implica na necessidade de verificar se tal relação constitutiva é válida para elastômeros carregados com negro de fumo.

O negro de fumo é um material em que partículas esféricas com diâmetro de 10 a 90 nm, formadas por camadas *quasi*-grafíticas, se arranjam de maneira complexa [Leblanc, 2002]. O termo *quasi*-grafíticas se refere ao fato de que as camadas da partícula de negro de fumo são formadas por arranjos hexagonais de átomos de carbono, de maneira similar às camadas da grafita. Contudo, no negro de fumo as camadas estão mais afastadas que na grafita, são menores e menos extensas, e não têm orientação vertical [Sofri, 2005]. As partículas existem em várias formas de agregação, dependendo do processo de fabricação, e o grau com que os agregados formam objetos tridimensionais complexos é denominado estrutura [Leblanc, 2002]. As partículas que constituem o agregado são parcialmente fundidas entre si e nunca existem sozinhas [Donnet e Custodero, 2005, p. 370]. Os agregados, por sua vez, são unidos entre si para formar os aglomerados. A Fig. 7.13 ilustra esquematicamente as dimensões relevantes do negro de fumo.

Durante a mistura do negro de fumo e da borracha, além da quebra dos aglomerados e da dispersão dos agregados de negro de fumo, ocorrem fortes interações entre o elastômero e o negro de fumo [Leblanc, 1997]. No entanto, parece não haver um consenso quanto à natureza da interação, isto é, se ocorrem ligações químicas ou físicas. Enquanto alguns autores argumentam que a natureza é física [Leblanc, 1997], outros descrevem as ligações como consistindo de um espectro de forças, com algumas cadeias ligadas quimicamente ao negro de fumo e outras ligadas fisicamente, com magnitude variável [Hamed,

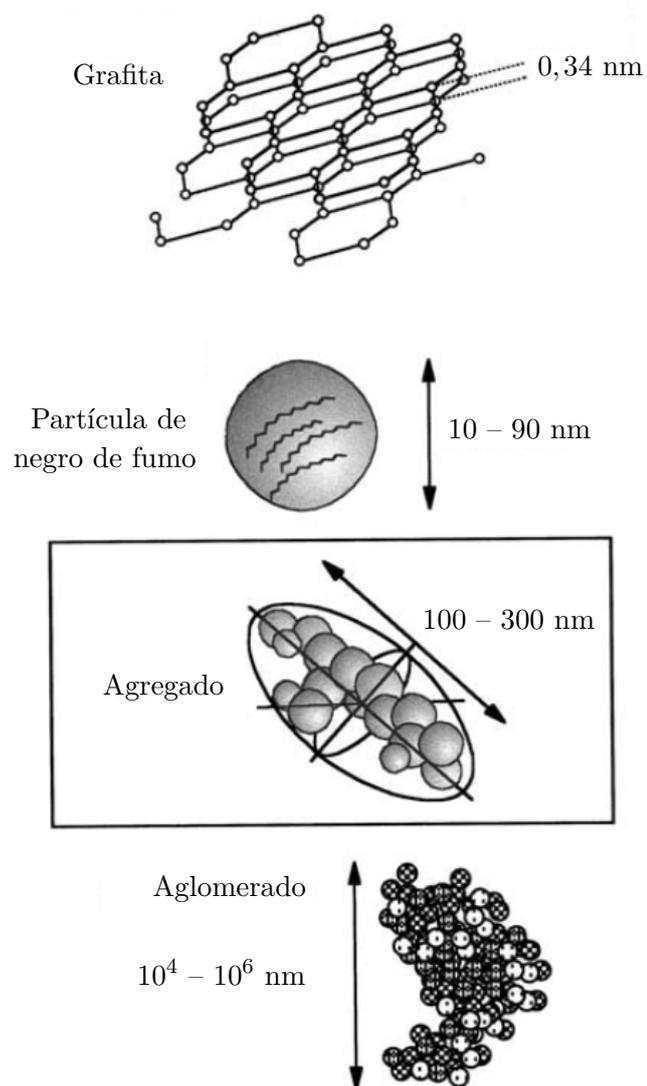


Figura 7.13 – Dimensões relevantes do negro de fumo. Adaptado de Leblanc, 2002.

2001, p. 24].

Existem alguns estudos publicados sobre a condutividade térmica do negro de fumo [Smith e Wilkes, 1944; Ebert *et al.*, 1998; Maquin *et al.*, 2000], mas todos os trabalhos citados relatam valores para a condutividade térmica que são, aparentemente, inconsistentes com o fato de que a inclusão de negro de fumo aumenta a condutividade térmica da borracha.⁸ Enquanto a borracha natural, por exemplo, apresenta condutividade térmica da ordem de $140 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [Gent, 2001, p. 359], os valores medidos para o negro de fumo não atingem esse valor. Mesmo quando a condutividade térmica aparente⁹ é corrigida, de forma a identificar-se apenas a condutividade térmica do negro de fumo propriamente dito, os valores permanecem muito abaixo do que seria esperado. Maquin *et al.*, 2000, por exemplo, obtêm valores de 3 a $5 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ para a condutividade térmica aparente de diversos negros de fumo de acetileno, quando as amostras se encontram evacuadas e no seu estado de compactação natural, a $20 \text{ }^\circ\text{C}$. Ao estimar a condutividade térmica do negro de fumo propriamente dito, os autores obtêm valores que não chegam a $100 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ para nenhuma das amostras de negro de fumo analisadas. Para o negro de fumo N990, por exemplo, o valor estimado é de $10 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

A explicação para o fenômeno recém exposto parece repousar na existência da resistência térmica interfacial, definida por

$$R_K = \frac{\Delta\theta}{q_n},$$

onde $\Delta\theta$ é o salto na temperatura na interface e q_n é o fluxo de calor líquido que cruza a superfície [Balasubramanian e Puri, 2011], e cujo efeito é reduzir a condutividade térmica do material. A resistência (ou, de forma inversa, a condutância) térmica interfacial depende do caráter da ligação interfacial. Possivelmente, a resistência térmica interfacial seja menor entre os agregados de negro de fumo e a borracha natural do que entre os agregados entre si.

Essa breve discussão ilustra a dificuldade na determinação das propriedades do negro de fumo, bem como a existência da resistência térmica interfacial, cuja medição experimental é bastante complexa, conforme pode-se inferir do trabalho de Losego *et al.*, 2012. A resistência térmica interfacial também poderia ser determinada por meio de simulações de dinâmica molecular, de maneira semelhante ao que Hu *et al.*, 2009, fizeram para determinar a resistência térmica interfacial entre silício e polietileno amorfo, porém essa abordagem está naturalmente fora do escopo do presente trabalho. De maneira alternativa, a resistência térmica interfacial e a condutividade térmica do negro de fumo

⁸Pode-se citar o trabalho de Nasr *et al.*, 1995, como uma exceção a essa tendência. Os autores obtiveram valores para a condutividade térmica de uma borracha de estireno-butadieno com negro de fumo do tipo *Fast Extrusion Furnace* (FEF) que, para três temperaturas medidas, em geral decrescem com a quantidade de carga até cerca de 80 phr, para então começar a crescer.

⁹Aqui se utiliza o termo *aparente* pelo fato de o negro de fumo ser um material poroso.

poderiam ser estimadas por meio da solução de um problema inverso, uma vez que a microestrutura do material e a condutividade térmica efetiva fossem conhecidas. Neste ponto é interessante recordar que o modelo multiescala desenvolvido não prevê a descontinuidade de temperatura e/ou fluxo de calor nas interfaces dos constituintes. Porém, para modelar a resistência térmica interfacial não seria estritamente necessário utilizar saltos finitos em quantidades físicas; em vez disso, a modelagem poderia ser realizada considerando-se uma fina camada de material isolante em torno dos agregados de negro de fumo, tal como proposto em Kothari *et al.*, 2013, para a modelagem da condutividade térmica efetiva de uma matriz de resina epóxi com nanopartículas de sílica.

Dada a dificuldade em se determinar a resistência térmica interfacial, ela não será considerada neste trabalho. Além disso, considerando-se a dificuldade em conhecer a condutividade térmica dos agregados de negro de fumo, será utilizada uma condutividade térmica arbitrária de $1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ para esse material, apenas para demonstrar a aplicabilidade do modelo. Futuramente, com dados precisos, será possível fazer uma modelagem, de fato, da reação de cura de um elastômero carregado.

Outro fenômeno digno de nota é a formação de cadeias de condução pelo negro de fumo quando presente em quantidade elevada [Hands e Horsfall, 1977]¹⁰. Segundo Elimat *et al.*, 2012, o negro de fumo tem uma elevada habilidade de formar redes contínuas em matrizes poliméricas, levando a condutividades térmicas (efetivas) mais elevadas.

Para finalizar, é importante citar um fenômeno observado para borrachas carregadas com negro de fumo: a diminuição da condutividade térmica efetiva a partir de uma certa concentração de carga. Por exemplo, Sircar e Wells, 1982, observaram que quando a fração volumétrica de negro de fumo N990 adicionado a uma borracha clorobutil (CIIR) supera cerca de 20%, há uma redução na condutividade térmica efetiva do composto elastomérico. Um fenômeno semelhante foi observado por Hands e Horsfall, 1977, ao estudarem a condutividade térmica da borracha natural carregada com diferentes concentrações de negro de fumo do tipo *Super Abrasion Furnace* (SAF). Esse fenômeno, perceptível nas medidas de condutividade térmica efetiva somente quando a presença de cargas atinge uma concentração relativamente elevada, não é capturado pela Lei de Fourier.

Para os problemas analisados a seguir, admite-se, a título de teste, que o material seja periódico.

PROBLEMA 7.3: Estuda-se agora um problema semelhante ao Problema 7.1. A diferença é a microescala, tanto no que diz respeito aos materiais quanto à discretização. A malha microscópica está apresentada na Fig. 7.14. As características das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 7.3. A tabela também contém as propriedades dos constituintes. O calor específico e a densidade do negro de fumo foram obtidos em

¹⁰Esse fenômeno também é observado, por exemplo, ao carregar polietileno com negro de fumo [Agari e Uno, 1985]. Porém, nesse caso o fenômeno se observa já a partir de uma fração volumétrica de carga de somente 3%.

Tabela 7.3 – Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.3

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Elastômero	Negro de fumo
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$1,574 \times 10^3$	$6,5 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$2,3 \times 10^{-1}$	$1,0 \times 10^0$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,5 \times 10^2$	$1,9 \times 10^3$
n	—	—	$3,178 \times 10^0$	—
k_0	$\text{s}^{-3,178}$	—	$1,16 \times 10^{13}$	—
E	J mol^{-1}	—	$1,66 \times 10^5$	—
t_0	s	—	$8,336 \times 10^{-13}$	—
θ_0	K	—	$1,406 \times 10^4$	—
Δh	J kg^{-1}	—	$-2,105 \times 10^4$	—
Elementos	—	10 Quad4	3.374 Tri3	
Nós	—	22	1.772	

Maquin *et al.*, 2000. Com relação ao elastômero, as propriedades dizem respeito a uma formulação de estireno-butadieno descrita e caracterizada em Isayev e Deng, 1988. Está sendo assumido, portanto, que o negro de fumo não altera a cinética de cura da borracha de estireno-butadieno. Conforme mencionado anteriormente, isto é apenas uma ilustração da aplicabilidade do modelo multiescala. Para este problema utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 1,5$ s.

A solução obtida considerando-se a inércia térmica da microescala é virtualmente igual àquela obtida desprezando-se a inércia térmica (veja a Fig. 7.15), indicando que, nesse caso, não é necessário considerar-se a inércia térmica da microescala.

A seguir será simulado um problema um pouco mais complexo, intrinsecamente 2D.

PROBLEMA 7.4: A banda de rodagem de um pneu, de dimensões $240 \text{ mm} \times 14 \text{ mm}$, com temperatura inicial de $30 \text{ }^\circ\text{C}$, tem suas faces mantidas a $190 \text{ }^\circ\text{C}$ para $t > 0$ (veja a Fig. 7.16a). Devido à simetria, apenas metade do corpo macroscópico é discretizado para a simulação por elementos finitos, impondo-se, então, a condição de fluxo normal nulo no eixo de simetria (veja a Fig. 7.16b). A discretização do corpo macroscópico está apresentada na Fig. 7.16c, na qual as condições de contorno estão descritas. Utiliza-se um EVR com lado igual a 600 nm , discretizado de acordo com a Fig. 7.16d. As características das malhas macroscópica e microscópica estão apresentadas na Tab. 7.4, bem como as propriedades térmicas e cinéticas dos constituintes. O material é igual ao do Problema 7.3. Para a solução do problema utilizou-se um passo de tempo $\Delta t = 15$ s.

A Fig. 7.17 apresenta mapas da temperatura macroscópica para os primeiros incrementos de tempo. Já a Fig. 7.18 apresenta o mapa de temperatura microscópica, para

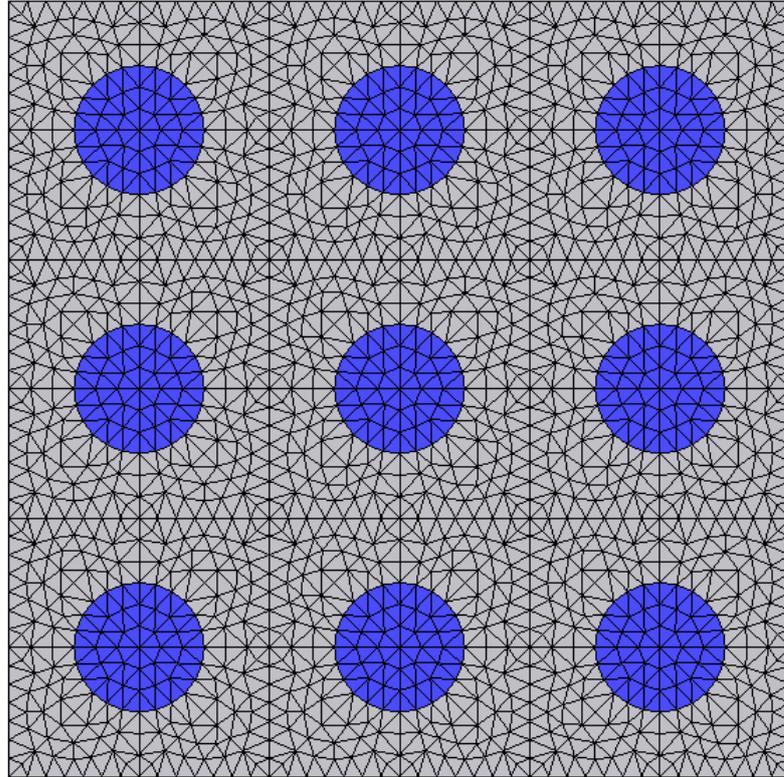


Figura 7.14 – Elemento de volume representativo, de lado igual a 900 nm, do Problema 7.3. O subdomínio em cinza representa a matriz elastomérica, enquanto os subdomínios em azul representam as inclusões de negro de fumo, com diâmetro de 150 nm.

Tabela 7.4 – Propriedades térmicas e cinéticas e características das malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.4

Grandeza	Unidade	Macroescala	Microescala	
			Elastômero	Negro de fumo
c	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$1,574 \times 10^3$	$6,5 \times 10^2$
κ	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	—	$2,3 \times 10^{-11}$	$1,0 \times 10^0$
ρ	kg m^{-3}	—	$9,5 \times 10^2$	$1,9 \times 10^3$
n	—	—	$3,178 \times 10^0$	—
k_0	$\text{s}^{-3,178}$	—	$1,16 \times 10^{13}$	—
E	J mol^{-1}	—	$1,66 \times 10^5$	—
t_0	s	—	$8,336 \times 10^{-13}$	—
θ_0	K	—	$1,406 \times 10^4$	—
Δh	J kg^{-1}	—	$-2,105 \times 10^4$	—
Elementos	—	793 Tri3	1.472 Tri3	
Nós	—	500	793	

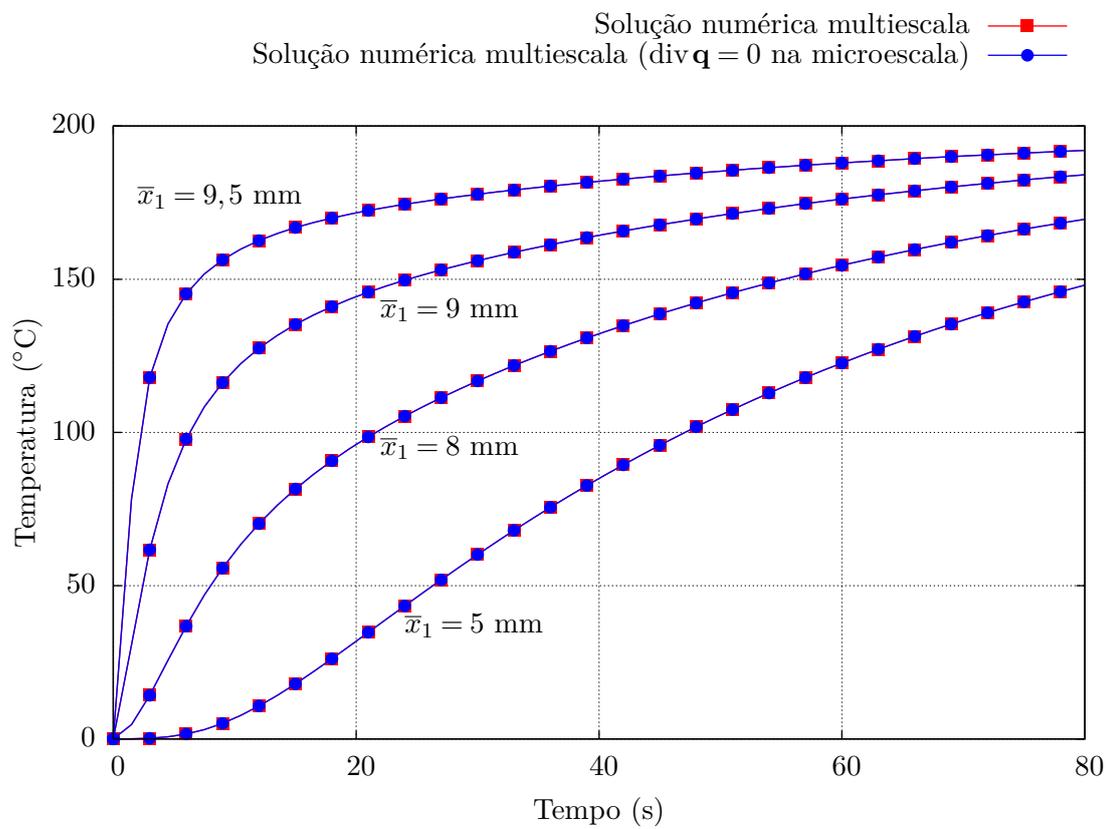
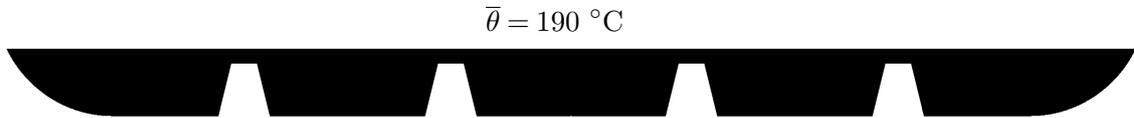
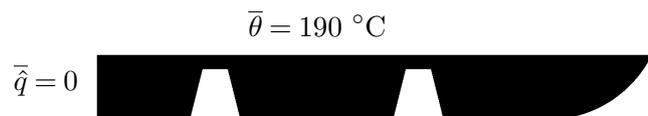


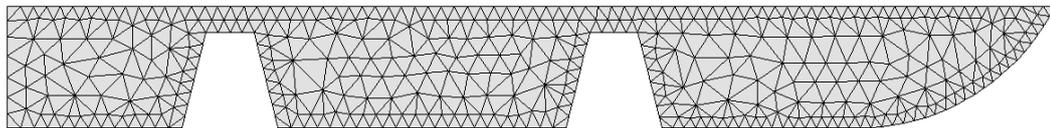
Figura 7.15 – Soluções até 80 s para o Problema 7.3. Apenas 1 a cada 2 pontos está marcado.



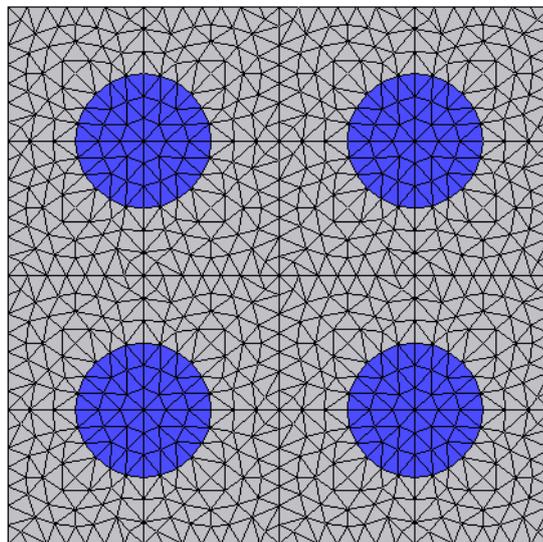
(a) Problema original: a banda de rodagem de um pneu, com temperatura inicial de $30 \text{ }^\circ\text{C}$, tem suas faces mantidas a $\bar{\theta} = 190 \text{ }^\circ\text{C}$ para $t > 0$.



(b) Problema simplificado devido à simetria.



(c) Malha macroscópica. A face vertical está isolada termicamente, conforme (b), enquanto as demais faces estão a $190 \text{ }^\circ\text{C}$.



(d) Elemento de volume representativo, de lado igual a 600 nm . O subdomínio em cinza representa a matriz elastomérica, enquanto os subdomínios em azul representam as inclusões de negro de fumo, com diâmetro de 150 nm .

Figura 7.16 – Representação esquemática e malhas macroscópica e microscópica para o Problema 7.4.

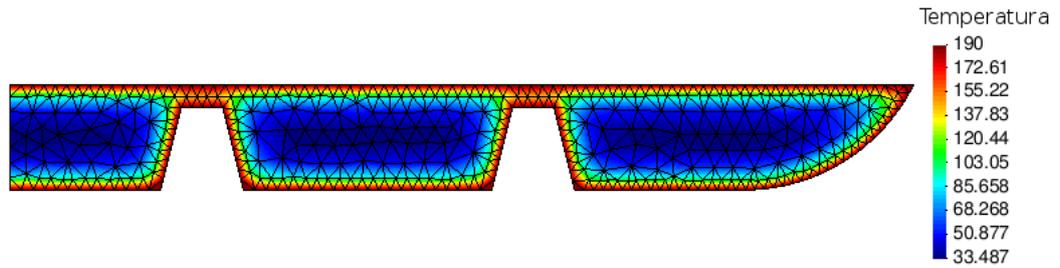
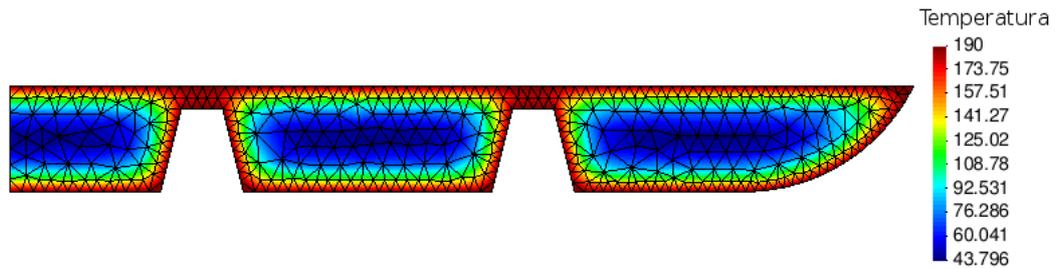
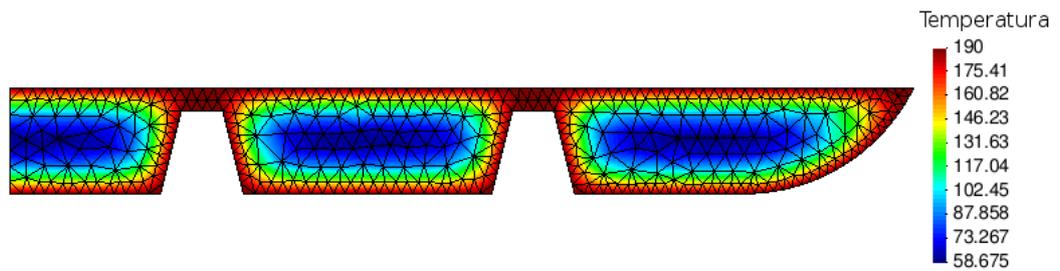
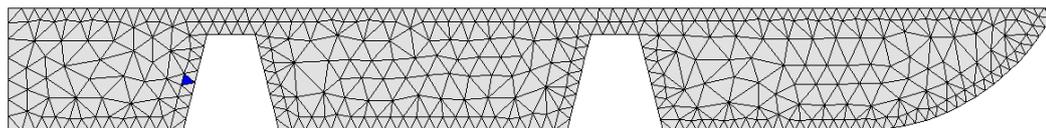
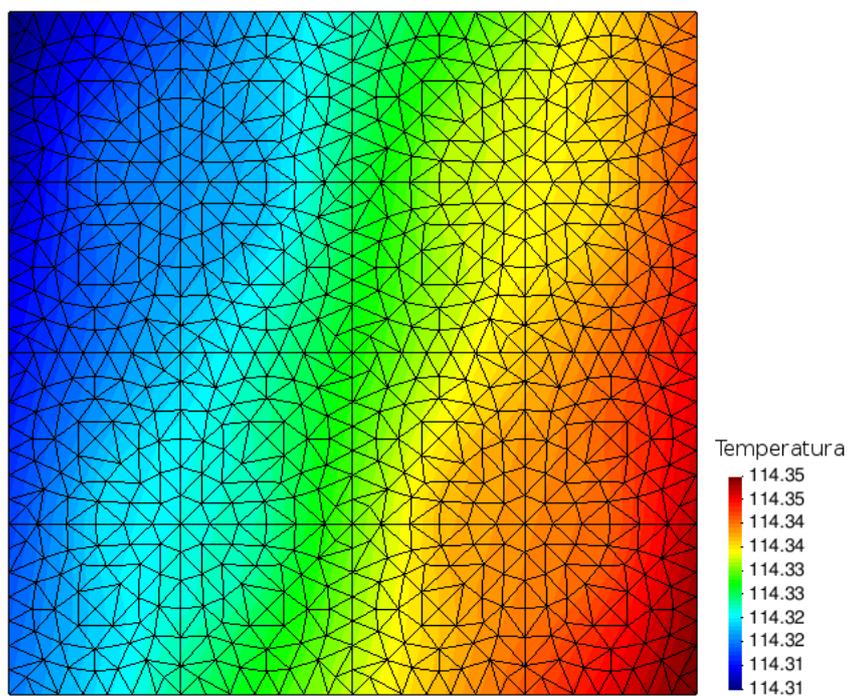
(a) $t = 15$ s.(b) $t = 30$ s.(c) $t = 45$ s.

Figura 7.17 – Mapas de temperatura macroscópica para os primeiros incrementos de tempo para o Problema 7.4.

o primeiro incremento de tempo, em um EVR específico, enquanto o início do fenômeno de cura para o mesmo EVR está apresentado na Fig. 7.19.

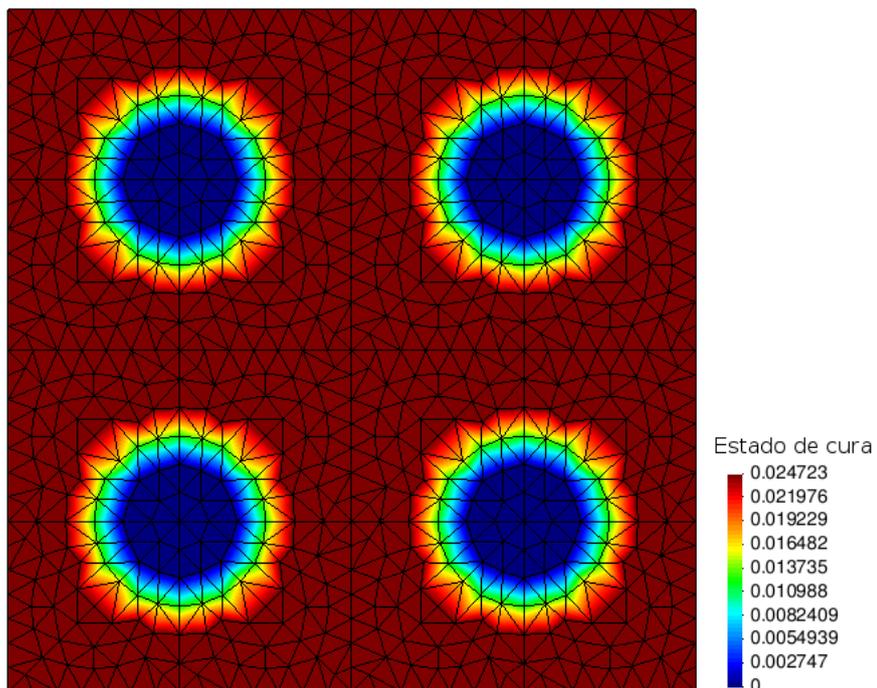


(a) O mapa apresentado em (b) corresponde ao EVR associado a um ponto de integração do elemento em destaque.

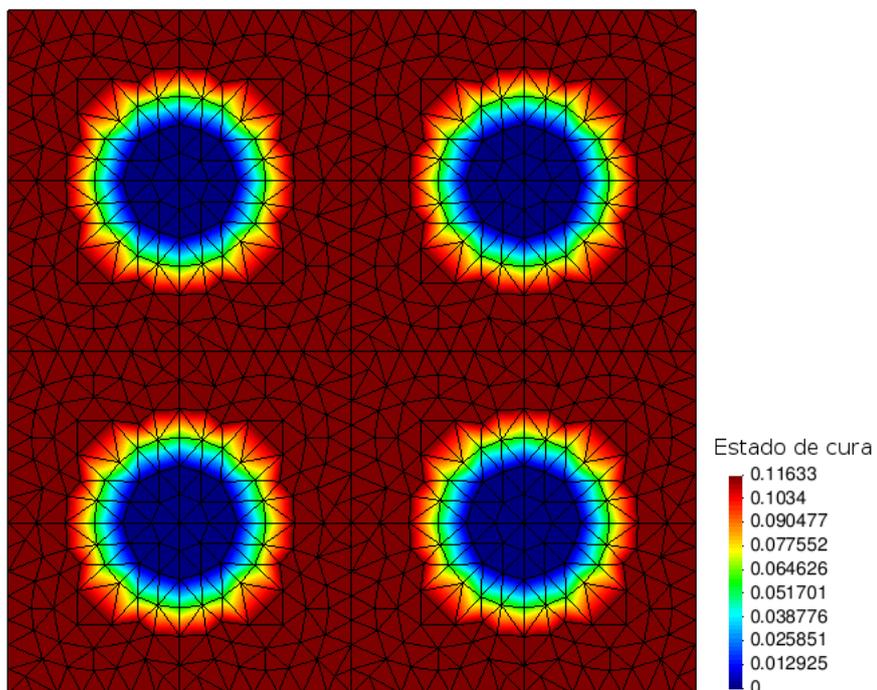


(b) Mapa de temperatura no EVR associado a um ponto de integração do elemento em destaque em (a) para $t = 15$ s.

Figura 7.18 – Mapa de temperatura em um EVR específico para o Problema 7.4.



(a) EVR associado a um ponto de integração do elemento em destaque na Fig. 7.18a para $t = 90$ s.



(b) EVR associado a um ponto de integração do elemento em destaque na Fig. 7.18a para $t = 105$ s.

Figura 7.19 – Mapas de estado de cura em um EVR específico para o Problema 7.4.

8 CONCLUSÕES

Nesta tese desenvolveu-se um método multiescala baseado em homogeneização computacional FE^2 para a modelagem da condução de calor transiente com geração de calor, que pode ser aplicado a materiais cuja microescala necessite ser modelada por um elemento de volume representativo finito, sendo possível considerar efeitos de inércia térmica.

Tendo por base a análise dos problemas variacionais da macro e microescala e algumas hipóteses centrais de homogeneização, foi proposto um desenvolvimento alternativo, mais claro e direto para o modelo multiescala, o qual é consistente com resultados recentemente apresentados na literatura. A nova metodologia é estabelecida, principalmente, a partir da hipótese de um enunciado macroscópico, escrito em termos de grandezas desconhecidas, determinadas *a posteriori*, durante o desenvolvimento da metodologia multiescala. Ainda, foi proposta a incorporação de uma geração de calor não homogênea na microescala, permitindo, por exemplo, a modelagem de materiais com constituintes/fases que apresentem, ou não, geração de calor.

O modelo foi implementado em um *software* próprio e as verificações realizadas foram satisfatórias. Os testes feitos com materiais homogêneos reproduziram a solução convencional (uma única escala) por elementos finitos. Além disso, para o caso em que comparou-se a solução multiescala à solução completa, a solução na microescala teve excelente concordância com a solução completa quando sua inércia térmica foi levada em consideração. O mesmo pode ser dito com relação ao caso com geração de calor em um corpo isolado termicamente; a solução na microescala, ao considerar-se sua inércia térmica, se mostrou satisfatória em comparação com a solução convencional, enquanto a relação $\text{div } \mathbf{q} = 0$ na microescala levou a resultados distantes dos esperados.

Como perspectivas futuras, pode-se implementar diferentes condições de contorno na microescala, bem como estudar mais detalhadamente se a média da flutuação da temperatura na microescala realmente pode ser diferente de zero, o que é assumido neste trabalho. Quanto à última questão, os resultados numéricos já obtidos corroboram as hipóteses adotadas nesta tese.

A especialidade do método multiescala proposto, de modelar a geração de calor não homogênea na microescala, foi aplicada à cura de materiais compósitos, a saber, elastômeros carregados. Embora a modelagem requeira um conhecimento maior das propriedades e interações dos constituintes, sendo necessário, inclusive, verificar a própria validade da Lei de Fourier para esse problema, o potencial de aplicação do modelo foi mostrado considerando uma matriz formada por um polímero elastomérico, onde ocorre a cinética/geração, e por cargas inertes do ponto de vista cinético, mas que contribuem para (acoplam) o problema de condução de calor na microescala. Para esse caso, embora a inércia térmica da microescala possivelmente não precise ser considerada, o fato de o modelo descrever a reação de cura no nível da microescala facilita o aperfeiçoamento da

modelagem do fenômeno, sendo possível incorporar vários efeitos, tal como uma cinética química diferenciada nas regiões de interface.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agari, Y.; Uno, T. Thermal Conductivity of Polymer Filled with Carbon Materials: Effect of Conductive Particle Chains on Thermal Conductivity. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 30, n. 5, p. 2225–2235, 1985.

Alemán, J.; Chadwick, A. V.; He, J.; Hess, M.; Horie, K.; Jones, R. G.; Kratochvíl, P.; Meisel, I.; Mita, I.; Moad, G.; Penczek, S.; Stepto, R. F. T. Definitions of terms relating to the structure and processing of sols, gels, networks, and inorganic-organic hybrid materials (IUPAC Recommendations 2007). **Pure and Applied Chemistry**, v. 79, n. 10, p. 1801–1829, 2007.

Amosov, A. A.; Panasenko, G. P. The problem of thermo-chemical formation of a composite material. Properties of solutions and homogenization. **Journal of Mathematical Sciences**, v. 181, n. 5, p. 541–577, 2012.

André, M.; Wriggers, P. Thermo-mechanical behaviour of rubber materials during vulcanization. **International Journal of Solids and Structures**, v. 42, p. 4758–4778, 2005.

Auriault, J.-L.; Boutin, C.; Geindreau, C. **Homogenization of Coupled Phenomena in Heterogenous Media**. London: Wiley-ISTE, 2009.

Bafnec, M.; Juma, M.; Toman, J.; Jurčiová, J.; Kučma, A. Thermal diffusivity of rubber compounds. **Plastics, Rubber and Composites**, v. 28, n. 10, p. 482–486, 1999.

Balasubramanian, G.; Puri, I. K. Heat conduction across a solid-solid interface: Understanding nanoscale interfacial effects on thermal resistance. **Applied Physics Letters**, v. 99, n. 1, p. 013116, 2011.

Bathe, K.-J. **Finite element procedures**. London: Prentice Hall, 1996.

Bensoussan, A.; Lions, J.-L.; Papanicolaou, G. **Asymptotic Analysis for Periodic Structures**. Amsterdam: North-Holland, 1978. (Studies in Mathematics and its Applications).

Callister, W. D.; Rethwisch, D. G. **Materials Science and Engineering: An Introduction**. 8. ed. John Wiley & Sons, Incorporated, 2009.

Carslaw, H. S.; Jaeger, J. C. **Conduction of heat in solids**. 2. ed. Oxford: Clarendon Press, 1959.

Castaneda, P. P. **Heterogeneous Materials**. École Polytechnique, Département de Mécanique, 2004.

Chan, T. W.; Shyu, G. D.; Isayev, A. I. Reduced Time Approach to Curing Kinetics, Part I: Dynamic Rate and Master Curve from Isothermal Data. **Rubber Chemistry and Technology**, v. 66, n. 5, p. 849–864, 1993.

Chang, C. W.; Okawa, D.; Garcia, H.; Majumdar, A.; Zettl, A. Breakdown of Fourier's Law in Nanotube Thermal Conductors. **Physical Review Letters**, v. 101, n. 7, p. 075903, 2008.

Claxton, W. E.; Liska, J. W. Calculation of state of cure in rubber under variable time-temperature conditions. **Rubber Age**, v. 95, p. 237, 1964.

Clerman, N. S.; Spector, W. **Modern Fortran: Style and Usage**. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

Connors, K. A. **Chemical Kinetics: The Study of Reaction Rates in Solution**. John Wiley & Sons, Incorporated, 1990.

Coran, A. Y. Vulcanization. In: Mark, J. E.; Erman, B.; Eirich, F. R. (Ed.). **The Science and Technology of Rubber**. 3. ed. Amsterdam: Elsevier Academic Press, 2005. cap. 7.

De, D.; Panda, P. K.; Roy, M.; Bhunia, S. Reinforcing effect of reclaim rubber on natural rubber/polybutadiene rubber blends. **Materials & Design**, v. 46, p. 142–150, 2013.

de Souza Neto, E. A.; Blanco, P. J.; Sánchez, P. J.; Feijóo, R. A. An RVE-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects. **Mechanics of Materials**, v. 80, p. 136–144, 2015.

Donnet, J.-B.; Custodero, E. Reinforcement of Elastomers by Particulate Fillers. In: Mark, J. E.; Erman, B.; Eirich, F. R. (Ed.). **The Science and Tecnology of Rubber**. 3. ed. Amsterdam: Elsevier Academic Press, 2005. cap. 8.

Ebert, H.-P.; Laudensack, B.; Hemberger, F.; Nisson, O.; Fricke, J. Thermal insulations based on carbon black. **High Temperatures – High Pressures**, v. 30, p. 261–267, 1998.

Elimat, Z.; Al-hussami, S. A.; Zihlif, A. M. Effect of carbon black on the thermo-electrical properties of poly(ethylene-oxide) composites. **Journal of Composite Materials**, v. 47, n. 28, p. 3525–3534, 2012.

Eshelby, J. D. The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 241, p. 376–396, 1957.

Feyel, F. Multiscale FE² elastoviscoplastic analysis of composite structures. **Computational Materials Science**, v. 16, p. 344–354, 1999.

Feyel, F.; Chaboche, J.-L. FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 183, p. 309–330, 2000.

Fish, J.; Filonova, V.; Kuznetsov, S. Micro-inertia effects in nonlinear heterogeneous media. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 91, n. 13, p. 1406–1426, 2012.

François, D.; Pineau, A.; Zaoui, A. **Mechanical Behaviour of Materials, Volume 1: Micro- and Macroscopic Constitutive Behaviour**. Dordrecht: Springer, 2012. 646 p. (Solid Mechanics and Its Applications, v. 57).

Gent, A. N. **Engineering with Rubber: How to Design Rubber Components**. 2. ed. Munich: Hanser Publishers, 2001.

Germain, P.; Nguyen, Q. S.; Suquet, P. Continuum Thermodynamics. **Journal of Applied Mechanics**, v. 50, n. 4b, p. 1010–1020, 1983.

Giusti, S. M.; Blanco, P. J. A Variational Approach for a Thermo-Mechanical Multiscale Constitutive Model. **Mecánica Computacional**, XXXI, p. 1839–1856, 2012.

Guimarães, T. R. Dissertação, **Nanocompósitos de Elastômero SBR e Argilas Organofílicas**. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2008.

Gurtin, M. E.; Fried, E.; Anand, L. **The Mechanics and Thermodynamics of Continua**. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

Hamed, G. R. Materials and Compounds. In: Gent, A. N. (Ed.). **Engineering with Rubber: How to Design Rubber Components**. 2. ed. Munich: Hanser Publishers, 2001. cap. 2.

Hands, D.; Horsfall, F. The thermal diffusivity and conductivity of natural rubber compounds. **Rubber Chemistry and Technology**, v. 50, n. 2, p. 253–265, 1977.

Harari, I. Stability of semidiscrete formulations for parabolic problems at small time steps. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, p. 1491–1516, 2004.

Hashin, Z.; Shtrikman, S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 11, n. 2, p. 127–140, 1963.

Hill, R. Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 11, n. 5, p. 357–372, 1963.

Hill, R. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 326, p. 131–147, 1972.

Höhne, G. W. H.; Hemminger, W.; Flammersheim, H.-J. **Differential scanning calorimetry: an introduction for practitioners**. 2. ed. New York, N.Y.: Springer, 2003.

Hu, M.; Koblinski, P.; Schelling, P. K. Kapitza conductance of silicon-amorphous polyethylene interfaces by molecular dynamics simulations. **Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics**, v. 79, n. 10, p. 104305, 2009.

Hughes, T. J. R. **The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis**. London: Dover Publications, 2000. (Dover Civil and Mechanical Engineering Series).

Isayev, A. I.; Deng, J. S. Nonisothermal Vulcanization of Rubber Compounds. **Rubber Chemistry and Technology**, v. 61, n. 2, p. 340, 1988.

Jiang, M.; Jasiuk, I.; Ostoja-Starzewski, M. Apparent thermal conductivity of periodic two-dimensional composites. **Computational Materials Science**, v. 25, n. 3, p. 329–338, 2002.

Kamal, M. R.; Sourour, S. Kinetics and thermal characterization of thermoset cure. **Polymer Engineering and Science**, v. 13, n. 1, p. 59–64, 1973.

Kanouté, P.; Boso, D. P.; Chaboche, J. L.; Schrefler, B. A. Multiscale Methods for Composites: A Review. **Archives of Computational Methods in Engineering**, v. 16, n. 1, p. 31–75, 2009.

Kothari, R.; Sun, C. T.; Dinwiddie, R.; Wang, H. Experimental and numerical study of the effective thermal conductivity of nano composites with thermal boundary resistance. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 66, p. 823–829, 2013.

Larsson, F.; Runesson, K.; Su, F. Variationally consistent computational homogenization of transient heat flow. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 81, n. 13, p. 1659–1686, 2010.

Leblanc, J. L. A molecular explanation for the origin of bound rubber in carbon black filled rubber compounds. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 66, n. 12, p. 2257–2268, 1997.

Leblanc, J. L. Rubber-filler interactions and rheological properties in filled compounds. **Progress in Polymer Science**, v. 27, n. 4, p. 627–687, 2002.

Losego, M. D.; Grady, M. E.; Sottos, N. R.; Cahill, D. G.; Braun, P. V. Effects of chemical bonding on heat transport across interfaces. **Nature Materials**, v. 11, n. 6, p. 502–506, 2012.

Mandel, J. **Plasticité Classique Et Viscoplasticité**. Wien: Springer-Verlag, 1972. (CISM Courses and Lectures).

Maquin, B.; Goyhénèche, J.-M.; Derré, A.; Trinquocoste, M.; Chadeyron, P.; Delhaès, P. Thermal conductivity of submicrometre particles: carbon blacks and solid solutions containing C, B and N. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 33, n. 1, p. 8–17, 2000.

Markus, A. **Modern Fortran in Practice**. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.

Matine, A.; Boyard, N.; Legrain, G.; Jarny, Y.; Cartraud, P. Transient heat conduction within periodic heterogeneous media: A space-time homogenization approach. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 92, p. 217–229, 2015.

Meliani, S.; Paoli, L. Homogenization of a model of cure process for composites. **Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications**, v. 56, n. 3, p. 385–413, 2004.

Meliani, S.; Paoli, L. Numerical analysis of a model of cure process for composites. **Mathematical Methods in the Applied Sciences**, v. 30, n. 4, p. 449–478, 2007.

Metcalf, M.; Reid, J.; Cohen, M. **Modern Fortran explained**. Oxford: Oxford University Press, 2011.

Nasr, G. M.; Badawy, M. M.; Gwaily, S. E.; Attia, G. Thermal and thermoelastic properties of fast extrusion furnace (FEF) carbon black loaded SBR vulcanizates. **Polymer International**, v. 38, n. 3, p. 249–255, 1995.

Nguyen, Q.-S.; Andrieux, S. The non-local generalized standard approach: a consistent gradient theory. **Comptes Rendus Mecanique**, v. 333, n. 2, p. 139–145, 2005.

Ortolano, J. M.; Hernández, J. A.; Oliver, J. **A Comparative Study On Homogenization Strategies For Multi-Scale Analysis Of Materials**. Barcelona: International Center for Numerical Methods in Engineering, 2013.

Ostoja-Starzewski, M. Towards Stochastic Continuum Thermodynamics. **Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics**, v. 27, n. 4, p. 335–348, 2002.

Özdemir, I.; Brekelmans, W. A. M.; Geers, M. G. D. Computational homogenization for heat conduction in heterogeneous solids. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 73, n. 2, p. 185–204, 2008.

Pham, K.; Kouznetsova, V. G.; Geers, M. G. D. Transient computational homogenization for heterogeneous materials under dynamic excitation. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 61, n. 11, p. 2125–2146, 2013.

Pinheiro, E. G. Dissertação, **Modelos numéricos aplicados à vulcanização de pneus**. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2001.

Ranganathan, S. I.; Ostoja-Starzewski, M. Towards scaling laws in random polycrystals. **International Journal of Engineering Science**, v. 47, n. 11-12, p. 1322–1330, 2009.

Reddy, J. N.; Gartling, D. K. **The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics**. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2000.

Sanchez-Palencia, E. **Non-homogeneous media and vibration theory**. Berlin: Springer-Verlag, 1980. (Lecture notes in physics).

Shyu, G. D.; Chan, T. W.; Isayev, A. I. Reduced Time Approach to Curing Kinetics, Part II: Master Curve from Nonisothermal Data. **Rubber Chemistry and Technology**, v. 67, n. 2, p. 314–328, 1994.

Sircar, A. K.; Wells, J. L. Thermal Conductivity of Elastomer Vulcanizates by Differential Scanning Calorimetry. **Rubber Chemistry and Technology**, v. 55, p. 191–207, 1982.

Smith, W. R.; Wilkes, G. B. Thermal Conductivity of Carbon Blacks. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 36, n. 12, p. 1111–1112, 1944.

Sofri, F. L. Dissertação, **Influência do negro de fumo na absorção da radiação na região do infravermelho para o reaquecimento do copolímero de poli(tereftalato de etileno) — PET**. São Carlos: Universidade Federal de São Carlos, 2005.

Temizer, I. On the asymptotic expansion treatment of two-scale finite thermoelasticity. **International Journal of Engineering Science**, v. 53, p. 74–84, 2012.

Temizer, I.; Wriggers, P. Homogenization in finite thermoelasticity. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 59, n. 2, p. 344–372, 2011.

Thomas, H. R.; Zhou, Z. Minimum time-step size for diffusion problem in FEM analysis. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 40, p. 3865–3880, 1997.

Toth, W. J.; Chang, J. P.; Zanichelli, C. Finite Element Evaluation of the State of Cure in a Tire. **Tire Science and Technology**, v. 19, n. 4, p. 178–212, 1991.

Valentín, J. L.; Mora-Barrantes, I.; Carretero-González, J.; López-Manchado, M. A.; Sotta, P.; Long, D. R.; Saalwächter, K. Novel Experimental Approach To Evaluate Filler-Elastomer Interactions. **Macromolecules**, v. 43, n. 1, p. 334–346, 2010.

APÊNDICE A – Notação

Neste trabalho, a seguinte convenção é utilizada:

- (a) escalares são denotados por letras dos alfabetos romano e grego, com peso normal;
- (b) tensores (incluindo vetores) são denotados por letras dos alfabetos romano e grego, em negrito.

Nesta tese é utilizado um sistema de coordenadas cartesiano, que consiste de um ponto de referência \mathbf{o} (a origem), e uma base ortonormal $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ orientada positivamente.

De acordo com a convenção anterior, o símbolo A denota um escalar, enquanto \mathbf{A} denota um tensor de primeira ou segunda ordem:

$$\begin{aligned} A & \text{ escalar,} \\ \mathbf{A} = A_i \mathbf{e}_i & \text{ tensor de primeira ordem (vetor),} \\ \mathbf{A} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j & \text{ tensor de segunda ordem,} \end{aligned}$$

onde \otimes representa o produto tensorial e está sendo empregada a notação de Einstein.

A operação de um tensor de segunda ordem \mathbf{A} sobre um vetor \mathbf{B} é representada por

$$\mathbf{A}\mathbf{B} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j B_k \mathbf{e}_k = A_{ij} B_j \mathbf{e}_i.$$

O produto interno de dois tensores de segunda ordem \mathbf{A} e \mathbf{B} é dado por

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j : B_{kl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l = A_{ij} B_{ij}.$$

As componentes S_{ij} de um tensor de segunda ordem $\mathbf{S} = S_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ com relação à base $\{\mathbf{e}_k\}$ são expressas pela matriz

$$[\mathbf{S}] = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix}.$$

A mesma notação é utilizada para expressar as componentes R_i de um vetor $\mathbf{R} = R_i \mathbf{e}_i$ em relação à base $\{\mathbf{e}_k\}$:

$$[\mathbf{R}] = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{bmatrix}.$$

Por outro lado, quando o arranjo de números não corresponde à representação de um tensor, o símbolo que denota a matriz (ou matriz-coluna) é sublinhado, da maneira

convencional. Assim, por exemplo, o vetor que contém as funções de forma associadas ao método dos elementos finitos é denotado por $\underline{\mathbf{N}}$, enquanto a matriz gradiente das funções de forma é denotada por $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$.

Uma revisão de álgebra tensorial e análise tensorial pode ser encontrada em Gurtin *et al.*, 2010.

APÊNDICE B – Consequências de um EVR infinitamente pequeno

Agora será demonstrado que os termos não-usuais na descrição macroscópica tendem a zero quando o tamanho do EVR tende a zero, isto é, que

$$\lim_{|\square(\bar{\mathbf{x}})| \rightarrow 0} \langle \varphi(\mathbf{x})(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\square} = \mathbf{0}, \quad (\text{B.1})$$

em que $\varphi(\mathbf{x})$ é uma função escalar. Para tal, primeiramente reescreve-se a integral (definida implicitamente em $\langle \bullet \rangle_{\square}$) como o limite de um somatório, na forma convencional. Primeiramente, no entanto, divide-se o EVR em N^3 subdomínios cúbicos, com N subdomínios ao longo de cada n -ésima dimensão cartesiana, $n = 1, 2, 3$. Cada subdomínio é representado por (i, j, k) , onde os índices i, j e k variam de 1 a N e correspondem, respectivamente, às dimensões $n = 1, n = 2$ e $n = 3$. O centro de um subdomínio pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{(i,j,k)} = & \left\{ \left(\bar{x}_1 - \frac{l}{2} \right) + \left[\frac{l}{2N} + (i-1) \frac{l}{N} \right] \right\} \mathbf{e}_1 + \left\{ \left(\bar{x}_2 - \frac{l}{2} \right) + \left[\frac{l}{2N} + (j-1) \frac{l}{N} \right] \right\} \mathbf{e}_2 \\ & + \left\{ \left(\bar{x}_3 - \frac{l}{2} \right) + \left[\frac{l}{2N} + (k-1) \frac{l}{N} \right] \right\} \mathbf{e}_3, \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

ou então,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{(i,j,k)} = & \left[\bar{x}_1 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{i-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) l \right] \mathbf{e}_1 + \left[\bar{x}_2 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{j-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) l \right] \mathbf{e}_2 \\ & + \left[\bar{x}_3 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{k-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) l \right] \mathbf{e}_3, \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

onde l é o comprimento de cada aresta do EVR (Fig. 4.1).

Então, a Eq. (B.3) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \lim_{l \rightarrow 0} \langle \varphi(\mathbf{x})(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \rangle_{\square} &= \lim_{l \rightarrow 0} \frac{1}{l^3} \int_{\square} \varphi(\mathbf{x})(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \, dv \\ &= \lim_{l \rightarrow 0} \frac{1}{l^3} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^N \varphi(\mathbf{x}_{(i,j,k)}) \left[\left(-\frac{1}{2} + \frac{i-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) l \mathbf{e}_1 \right. \\ & \quad \left. + \left(-\frac{1}{2} + \frac{j-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) l \mathbf{e}_2 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{k-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) l \mathbf{e}_3 \right] \left(\frac{l}{N} \right)^3 \\ &= \lim_{l \rightarrow 0} l \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^N \varphi(\mathbf{x}_{(i,j,k)}) \left[\left(-\frac{1}{2} + \frac{i-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) \mathbf{e}_1 \right. \\ & \quad \left. + \left(-\frac{1}{2} + \frac{j-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) \mathbf{e}_2 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{k-1}{N} + \frac{1}{2N} \right) \mathbf{e}_3 \right] \left(\frac{1}{N} \right)^3 \\ &= \mathbf{0}. \quad (\text{B.4}) \end{aligned}$$

De maneira similar, pode-se demonstrar que quando $l \rightarrow 0$,

$$\lim_{l \rightarrow 0} \langle \varphi(\mathbf{x}) \rangle_{\square} = \varphi(\bar{\mathbf{x}}), \quad (\text{B.5})$$

onde agora $\varphi(\mathbf{x})$ é uma função escalar ou uma função vetorial. A demonstração é feita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \lim_{l \rightarrow 0} \langle \varphi(\mathbf{x}) \rangle_{\square} &= \lim_{l \rightarrow 0} \frac{1}{l^3} \int_{\square} \varphi(\mathbf{x}) \, dv \\ &= \lim_{l \rightarrow 0} \frac{1}{l^3} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^N \varphi(\mathbf{x}_{(i,j,k)}) \left(\frac{l}{N} \right)^3 \\ &= \lim_{l \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^N \varphi(\mathbf{x}_{(i,j,k)}) \left(\frac{1}{N} \right)^3 \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^N \frac{1}{N^3} \lim_{l \rightarrow 0} \varphi(\mathbf{x}_{(i,j,k)}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^N \frac{1}{N^3} \varphi(\bar{\mathbf{x}}) \\ &= \varphi(\bar{\mathbf{x}}). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Portanto, utilizando as Eqs. (B.4) e (B.6) na Eq. (4.93), para um EVR infinitamente pequeno tem-se uma descrição macroscópica dada por

$$-\overline{\text{div}} \bar{\mathbf{q}} + \bar{r} - \dot{\bar{\phi}} = 0 \quad \text{em } \bar{\mathcal{B}}_t \times \mathcal{I}. \quad (\text{B.7})$$