

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

**UM ESTUDO SOBRE CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA EM MATERIAIS  
MICRO-POROSOS UTILIZANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO**

por

Cristian Zarichta

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Agosto de 2008

**UM ESTUDO SOBRE CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA EM MATERIAIS  
MICRO-POROSOS UTILIZANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO**

por

Cristian Zarichta  
Engenheiro Mecânico

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Mecânica dos Sólidos

Orientador: Prof. Dr. Rogério José Marczak

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr<sup>a</sup>. Rejane de César Oliveski

Prof. Dr. Francis H. R. França

Prof. Dr. Paulo Smith Schneider

Prof. Dr. Flávio José Lorini  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 28 de Agosto de 2008.

*Dedicado a minha  
amada esposa Mariana*

## AGRADECIMENTOS

Um agradecimento mais que especial ao meu orientador Prof. Rogério J. Marczak, por toda sua dedicação, confiança, incentivo na realização deste trabalho e por ser um grande exemplo de profissional e pessoa. Rato, tu és o mestre da Mecânica dos Sólidos!

A minha família que sempre me apoiou em todas minhas escolhas. Este caminho árduo só não foi mais difícil devido ao amor de vocês.

A minha esposa Mariana Bortolon, que neste tempo foi namorada, noiva e esposa, sempre me apoiando e incentivando nos momentos mais difíceis. Obrigado meu amor!

A UFRGS pela oportunidade do ensino de qualidade.

Ao PROMEC pela oportunidade e paciência.

Ao Grupo de Mecânica Aplicada (GMAp), onde tive o orgulho de aprender com grandes mestres e colegas, desde minha chegada em 2001 como bolsista de iniciação científica.

Aos professores Jun Fonseca e Ignacio Iturrioz que, juntamente com meu orientador, foram os principais responsáveis pela minha formação profissional.

A todos os colegas que tive a oportunidade de conviver no GMAp durante todos estes anos. Bolsistas de iniciação, mestrados, doutorandos, funcionários e voluntários. Bons churras, cafezinhos, futebol, chimarrão, muitas saudades. A todos vocês, meu muito obrigado!

A *Ciber Equipamentos Rodoviários* pela oportunidade e aos meus colegas de trabalho da Engenharia P&D.

E a todos que de uma forma e outra ajudaram para que este trabalho fosse realizado.

## RESUMO

O trabalho apresenta um estudo sobre a condutividade térmica efetiva de materiais micro-porosos em duas dimensões. O *Método dos Elementos de Contorno* (MEC) é empregado para resolver as equações diferenciais que regem os problemas potenciais em regime permanente. A metodologia desenvolvida é aplicada a micro-estruturas com furos dispersos em sua matriz. Na implementação numérica, os furos são gerados aleatoriamente no domínio de um *Elemento de Volume Representativo* (EVR). O método do EVR aplica a *Teoria de Campos Médios* para encontrar as propriedades efetivas (macroscópicas) deste material micro-poroso. O material é caracterizado por uma fração de volume pré-determinada, assim como os diâmetros dos furos. No presente estudo os vazios atuam como áreas isolantes, mas a metodologia proposta pode ser empregada para materiais contendo inclusões condutoras de calor. Cada conjunto de amostras é submetido à análise um número suficiente de vezes, a fim de garantir estabilidade estatística dos resultados. Materiais ortotrópicos são considerados através de uma transformação de coordenadas que mapeia o domínio original em um novo domínio isotrópico. Isso permite o uso do mesmo código numérico de materiais isotrópicos. São analisados EVR's para diversas frações de volume, com matrizes isotrópicas e ortotrópicas, cujas propriedades efetivas são obtidas e analisadas. A metodologia desenvolvida mostrou-se bastante eficiente, particularmente para casos contendo um grande número de vazios, sugerindo uma alternativa aos métodos tradicionais de solução numéricos, como elementos finitos e volumes de controle.

## ABSTRACT

### “A Study About Effective Thermal Conductivity in Micro-Porous Materials Using the Boundary Element Method”

This work presents a study on the effective thermal conductivity in micro-porous materials in two dimensions. The Boundary Elements Method is used to solve the steady state potential equations. The developed methodology solves heat transfer in micro-structures containing dispersed voids in the domain.

In the numerical implementation, the voids are randomly generated in a *Representative Volume Element* (RVE) domain. The *Average Field Theory* is used to predict the effective properties (macroscopic) of the micro-porous material. The material is characterized by a specified volume fraction and void size. In this study, the voids are considered insulated areas, but the proposed methodology can be extended to analyze materials containing conductive inclusions. Each set of samples is analyzed a number of times in order to guarantee statistical stability of the results.

Orthotropic materials are considered by means of a coordinated transformation which maps the original domain into a new isotropic one. This method allows the use of the same numerical code developed for isotropic materials.

RVE's for several cases of volume fraction in isotropic as well as orthotropic matrices are analyzed and discussed.

The developed methodology is very efficient, particularly for samples containing a large number of voids, suggesting an alternative solution to the traditional numerical methods, such as finite element and finite volume method.

## ÍNDICE

|   |    |
|---|----|
| 1. INTRODUÇÃO.....  | 1  |
| 1.1. Revisão bibliográfica.....                                     | 4  |
| 1.2. Objetivos do trabalho .....                                    | 6  |
| 1.3. Organização do texto.....                                      | 7  |
| 2. MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS POTENCIAIS ..... | 8  |
| 2.1. Formulação integral para problemas potenciais .....            | 9  |
| 2.2. O MEC discretizado para problemas potenciais .....             | 12 |
| 2.2.1. Elemento linear descontínuo .....                            | 13 |
| 2.2.2. Formulação matricial.....                                    | 16 |
| 2.3. Problemas potenciais não-isotrópicos .....                     | 19 |
| 2.3.1. Método da transformação de coordenadas .....                 | 20 |
| 3. MODELAGEM NUMÉRICA E IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL.....            | 22 |
| 3.1. Implementação Computacional.....                               | 23 |
| 3.2. Comparação de um modelo do MEC com o MEF .....                 | 28 |
| 3.3. Verificação com modelos analíticos.....                        | 32 |
| 3.4. Verificação da discretização dos elementos no furo .....       | 33 |
| 3.5. Validação do número ideal de amostras.....                     | 34 |
| 4. RESULTADOS .....   | 36 |
| 4.1. Verificação do EVR para o problema potencial.....              | 36 |
| 4.2. Verificação com Modelos Periódicos Isotrópicos .....           | 38 |
| 4.3. Resultados para Materiais Isotrópicos.....                     | 40 |
| 4.4. Resultados para Materiais Ortotrópicos .....                   | 42 |
| 5. CONCLUSÕES.....  | 45 |
| 5.1. Sugestões para continuidade do trabalho .....                  | 45 |
| APÊNDICE A .....  | 47 |
| APÊNDICE B.....   | 50 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....                                    | 56 |

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Caracteres romanos

|                               |   |                               |
|-------------------------------|---|-------------------------------|
| $a, b$                        | Deslocamento dos nós dos extremos no elemento descontínuo   | [m]                           |
| [A]                           | Vetor de condições de contorno conhecidas no MEC            | –                             |
| $A_f$                         | Área total de furos   | [m <sup>2</sup> ]             |
| $A_p$                         | Área da placa   | [m <sup>2</sup> ]             |
| $\overline{AB} \overline{CD}$ | Delimitação da fronteira                                    | [W]                           |
| $b$                           | Fonte térmica   | –                             |
| $c^i$                         | Matriz de coeficientes que depende da geometria do contorno | –                             |
| $D$                           | Cota interna limite   | [m]                           |
| $D_f$                         | Distância entre centro de furos                             | [m]                           |
| [F]                           | Vetor de condição de contorno                               | –                             |
| [G]                           | Matriz de potencias   | –                             |
| [H]                           | Matriz dos fluxos   | –                             |
| $k_{eff}$                     | Condutividade térmica efetiva                               | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| $k_m$                         | Condutividade térmica média                                 | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| $k_{xx}$                      | Condutividade térmica na direção $x$                        | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| $k_{yy}$                      | Condutividade térmica na direção $y$                        | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| $k_{xy}$                      | Condutividade térmica na direção $xy$                       | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| $k_1$                         | Condutividade do material base (modelos analíticos)         | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| $k_2$                         | Condutividade do furo (modelos analíticos)                  | $\left[ \frac{W}{mK} \right]$ |
| [K]                           | Tensor condutividade térmica                                | –                             |



|                |   |     |
|----------------|---|-----|
| $l$            | Comprimento do elemento descontínuo                             | [m] |
| $L$            | Aresta do EVR   | [m] |
| $n$            | Número de incógnitas  | –   |
| $N_f$          | Número de furos   | –   |
| $n_e$          | Número de elementos   | –   |
| $\bar{P}$      | Sentido do fluxo de calor que cruza a fronteira                 | –   |
| $q$            | Vetor coluna dos valores nodais da derivada normal do potencial | –   |
| $\mathbf{q}$   | Vetor dos fluxos nas direções $x$ e $y$                         | –   |
| $\bar{q}$      | Fluxo de calor prescrito  | –   |
| $\Delta q$     | Variação do fluxo   | –   |
| $ q_{esq} $    | Módulo do fluxo de calor que cruza a fronteira $\overline{AB}$  | –   |
| $ q_{dir} $    | Módulo do fluxo de calor que cruza a fronteira $\overline{CD}$  | –   |
| $[\mathbf{Q}]$ | Matriz de correção da posição dos nós físicos                   | –   |
| $r$            | Distância entre o ponto fonte e o ponto campo                   | [m] |
| $R$            | Raio do furo  | [m] |
| $R'$           | Tolerância entre o contorno e os furos                          | [m] |
| $(U_H - U_L)$  | Diferencial de temperatura                                      | [K] |
| $u$            | Vetor coluna dos potenciais nodais                              | –   |
| $\bar{u}$      | Potencial prescrito   | –   |
| $u^*$          | Solução fundamental do potencial                                | –   |
| $w$            | Função peso arbitrária  | –   |
| $x$            | Coordenada original no eixo da abscissa                         | –   |
| $\hat{x}$      | Coordenada mapeada no eixo da coordenada                        | –   |
| $\mathbf{X}$   | Vetor de variáveis desconhecidas (incógnitas)                   | –   |
| $x_c y_c$      | Coordenadas do centro dos furos                                 | –   |
| $y$            | Coordenada original no eixo da ordenada                         | –   |
| $\hat{y}$      | Coordenada mapeada no eixo da abscissa                          | –   |

## Caracteres gregos

|                   |  |
|-------------------|--|
| $\Gamma$          | Contorno   |
| $\Gamma_1$        | Parcela do contorno exterior da matriz           |
| $\Gamma_2$        | Parcela do contorno exterior da matriz           |
| $\varepsilon$     | Fração de volume                                 |
| $v_2$             | Fração de volume do furo para modelos analíticos |
| $\eta$            | Normal ao contorno                               |
| $\xi$             | Espaço normalizado                               |
| $\sigma$          | Desvio padrão das amostras                       |
| $\phi_1 \phi_2$   | Funções de interpolação                          |
| $\phi'_1 \phi'_2$ | Função de interpolação modificada                |
| $\Phi$            | Funções de interpolação originais                |
| $\bar{\Phi}$      | Funções de interpolação para nós deslocados      |
| $\Omega$          | Domínio do problema                              |

## Símbolos e operadores matemáticos

|          |                         |
|----------|-------------------------|
| $\nabla$ | Vetor gradiente         |
| $.^T$    | Matriz transposta       |
| $\cup$   | União de conjuntos      |
| $\cap$   | Interseção de conjuntos |

## Sub-índices e sobre-escritos

|        |                                   |
|--------|-----------------------------------|
| $i, j$ | Índices variam de 1 a $n_e$       |
| $i$    | Referente ao ponto $i$ do domínio |

## ÍNDICE DE FIGURAS

|  |    |
|--|----|
| Figura 1.1: (a) Malha de elementos finitos de uma micro-estrutura. (b) Malha de elementos de contorno de uma micro-estrutura. ....   | 3  |
| Figura 1.2: Metalografia de uma micro-estrutura com inclusões circulares e elípticas. ....   | 3  |
| Figura 2.1: Discretização do domínio com elementos de contorno. ....   | 13 |
| Figura 2.2: Elemento descontínuo linear.....   | 15 |
| Figura 2.3: Funções de interpolação modificadas para o elemento descontínuo. ....  | 15 |
| Figura 2.4: Elementos descontínuos utilizados neste estudo. ....   | 16 |
| Figura 2.5: Exemplo de um modelo simples do MEC com 4 elementos descontínuos e 8 nós....   | 17 |
| Figura 2.6: Esquema da montagem da matriz no MEC. ....   | 17 |
| Figura 2.7: Ilustração do mapeamento geométrico utilizado. ....  | 20 |
| Figura 3.1: Ilustração do sentido do fluxo de calor $\bar{P}$ cruzando as fronteiras $\overline{AB}$ e $\overline{CD}$ .....   | 23 |
| Figura 3.2: Malha externa do MEC discretizada para 96 elementos lineares. ....   | 24 |
| Figura 3.3: (a) Limite no domínio para criação dos furos randômicos. (b) Exemplo com célula de 50 furos.....   | 26 |
| Figura 3.4: Geometria do EVR discretizada com 96 elementos no contorno externo e 16 elementos no contorno dos furos.....   | 27 |
| Figura 3.5: Exemplo de saída gráfica dos fluxos em cada elemento nas arestas do EVR. ....  | 28 |
| Figura 3.6: Malha de Carson et al, 2003, com 5355 elementos e 10818 nós.....   | 29 |
| Figura 3.7: Modelos para comparação com um furo: (a) MEC e (b) MEF.....  | 30 |
| Figura 3.8: Elemento finito triangular de seis nós com interpolação linear.....  | 30 |
| Figura 3.9: (a)Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo um furo no código desenvolvido). (b) Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo um furo em software comercial de MEF).....         | 31 |
| Figura 3.10: Modelos para comparação com dois furos: (a) MEC e (b) MEF.....  | 31 |
| Figura 3.11: (a)Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo dois furos no código desenvolvido). (b) Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo dois furos em software comercial de MEF). .... | 32 |
| Figura 3.12: Discretização dos furos para 4, 8, 12, 16 e 20 elementos respectivamente. ....  | 34 |
| Figura 3.13: Variação do valor da condutividade térmica efetiva com relação ao número de elementos nos furos.....  | 34 |
| Figura 3.14: Verificação do desvio padrão para quantidades de simulações distintas em uma fração de 15% com 1º furos.....  | 35 |

|   |    |
|---|----|
| Figura 4.1: Resultados para 17 configurações de furos em uma fração de 10% de furos. ....   | 37 |
| Figura 4.2: Disposição periódica hexagonal com 11 tipos de células [Böhm H. J., 1998]. .... | 38 |
| Figura 4.3: Verificação com três modelos periódicos com 1, 4 e 9 furos. ....                | 38 |
| Figura 4.4: $k$ com 30% de furos. ....  | 40 |
| Figura 4.5: Curva do $k_{eff}$ $k$ efetivo para material isotrópico. ....                   | 41 |
| Figura 4.6: Gráfico comparativo da propriedade efetiva com dois modelos analíticos. ....    | 41 |
| Figura 4.7: $k_{yy}$ com 30% de furos. ....   | 43 |
| Figura 4.8: $k_{xx}$ com 30% de furos. ....   | 43 |
| Figura 4.9: Curvas do $k_{eff}$ nas direções $xx$ e $yy$ . ....                             | 44 |
| Figura A.1: $k$ com 1% de furos. ....   | 47 |
| Figura A.2: $k$ com 2.5% de furos. ....   | 47 |
| Figura A.3: $k$ com 5% de furos. ....   | 47 |
| Figura A.4: $k$ com 7.5% de furos. ....   | 47 |
| Figura A.5: $k$ com 10% de furos. ....  | 47 |
| Figura A.6: $k$ com 12.5% de furos. ....  | 47 |
| Figura A.7: $k$ com 15% de furos. ....  | 48 |
| Figura A.8: $k$ com 17.5% de furos. ....  | 48 |
| Figura A.9: $k$ com 20% de furos. ....  | 48 |
| Figura A.10: $k$ com 22.5% de furos. ....   | 48 |
| Figura A.11: $k$ com 25% de furos. ....   | 48 |
| Figura A.12: $k$ com 27.5% de furos. ....   | 48 |
| Figura B.1: $k_{yy}$ com 1% de furos. ....  | 50 |
| Figura B.2: $k_{xx}$ com 1% de furos. ....  | 50 |
| Figura B.3: $k_{yy}$ com 2.5% de furos. ....  | 50 |
| Figura B.4: $k_{xx}$ com 2.5% de furos. ....  | 50 |
| Figura B.5: $k_{yy}$ com 5% de furos. ....  | 50 |
| Figura B.6: $k_{xx}$ com 5% de furos. ....  | 50 |
| Figura B.7: $k_{yy}$ com 7.5% de furos. ....  | 51 |
| Figura B.8: $k_{xx}$ com 7.5% de furos. ....  | 51 |
| Figura B.9: $k_{yy}$ com 10% de furos. ....   | 51 |
| Figura B.10: $k_{xx}$ com 10% de furos. ....  | 51 |
| Figura B.11: $k_{yy}$ com 12.5% de furos. ....  | 51 |
| Figura B.12: $k_{xx}$ com 12.5% de furos. ....  | 51 |

|  |    |
|--|----|
| Figura B.13: $k_{yy}$ com 15% de furos. ....   | 52 |
| Figura B.14: $k_{xx}$ com 15% de furos. ....   | 52 |
| Figura B.15: $k_{yy}$ com 17.5% de furos. .... | 52 |
| Figura B.16: $k_{xx}$ com 17.5% de furos. .... | 52 |
| Figura B.17: $k_{yy}$ com 20% de furos. ....   | 52 |
| Figura B.18: $k_{xx}$ com 20% de furos. ....   | 52 |
| Figura B.19: $k_{yy}$ com 22.5% de furos. .... | 53 |
| Figura B.20: $k_{xx}$ com 22.5% de furos. .... | 53 |
| Figura B.21: $k_{yy}$ com 25% de furos. ....   | 53 |
| Figura B.22: $k_{xx}$ com 25% de furos. ....   | 53 |
| Figura B.23: $k_{yy}$ com 27.5% de furos. .... | 53 |
| Figura B.24: $k_{xx}$ com 27.5% de furos. .... | 53 |

## ÍNDICE DE TABELAS

|   |    |
|---|----|
| Tabela 4.1: Valores calculados para 20 simulações a 10% de fração de furos. ....  | 37 |
| Tabela 4.2: Resultados obtidos com modelos periódicos de 1, 4 e 9 furos.....  | 39 |
| Tabela 4.3: Valores da condutividade efetiva comparado com dois métodos analíticos: modelo de <i>Voigt</i> e modelo de <i>Maxwell</i> ..... | 42 |

## 1. INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de novos materiais que apresentem características desejadas e que desempenhem suas funções da melhor forma possível é um dos principais tópicos sobre a tendência da engenharia moderna. Este fato somente se torna uma realidade no nível de manipulação micro-estrutural, onde as propriedades podem ser selecionadas e ordenadas de forma desejada. Atualmente, é possível conceber materiais de alto desempenho como, por exemplo, materiais com alta resistência de vida à fadiga, alta tenacidade, resistência ao desgaste, materiais supercondutores e muitos outros, sendo esta tendência um dos maiores fatores para o progresso industrial.

Em termos de materiais de engenharia, quase tudo na natureza pode ser considerado heterogêneo, dependendo da sua escala de análise, e que todas as propriedades de um material heterogêneo são intimamente dependentes de sua micro-estrutura. Estas propriedades, como o módulo de elasticidade, condutividade elétrica / térmica / magnética, coeficiente dielétrico e coeficiente de expansão térmico, são tipicamente funções da micro-estrutura. Assim, é essencial que o projetista tenha o conhecimento das características macroscópicas destes materiais heterogêneos para que seja possível solucionar determinados problemas. O fato de se conhecer os fenômenos microscópicos e o comportamento macroscópico não só permite prever o comportamento destes materiais, mas permite fornecer uma ferramenta de projeto para micro-estruturas tal que o comportamento resultante se ajuste com as características desejadas na escala macroscópica.

Mesmo com as ferramentas computacionais disponíveis atualmente, as quais permitem que análises em problemas de engenharia possam ser realizadas em níveis cada vez mais minuciosos, a análise da micro-estrutura por completo ainda não é viável. Por isso, a viabilidade de estudos neste âmbito é possível somente quando são empregados modelos de materiais homogeneizados, onde o material é tratado como se fosse homogêneo na macro-escala com propriedades efetivas advindas do comportamento estudado nas escalas inferiores.

Muitas são as formas de se obter propriedades efetivas, como a conhecida *Teoria Matemática de Homogeneização*, a qual é aplicada principalmente a materiais com estrutura interna periódica [Sanchez-Palencia E., 1981] ou métodos analíticos e semi-analíticos, como o *Método de Mori-Tanaka* [Nemat-Nasser S. e Hori M., 1999].

O presente estudo utiliza um método de aproximação computacional juntamente com a *Teoria de Campos Médios*, também conhecida de *Teoria de Propriedades Efetivas* ou *Método de*

*Análise do Elemento Representativo* (EVR) [Hori M. e Nemat-Nasser S., 1999, Zohdi T. I., 2002]. O método de análise EVR se baseia no fato das propriedades efetivas (medidas em experimentos) terem relações entre médias do volume da amostra de material micro-estrutural dos campos internos das variáveis envolvidas [Hori M. e Nemat-Nasser S., 1999]. Esta relação deve ser calculada sobre uma amostra representativa de material que traga informações em quantidade suficiente das micro-heterogeneidades. Em outras palavras é o menor volume onde as propriedades do material em análise se mantêm representativas. Assim, a condutividade térmica efetiva ( $k_{eff}$ ) é determinada com base na análise estatística sobre uma série de EVR's submetidos a um potencial térmico.

Para viabilizar este estudo é imprescindível se fazer uso de algum tipo de método numérico para resolver as equações diferenciais que regem o problema. Os métodos numéricos mais conhecidos e utilizados na engenharia são: o *Método dos Elementos Finitos* (MEF), o *Método dos Elementos de Contorno* (MEC), o *Método dos Volumes Finitos* (MVF) e o *Método das Diferenças Finitas* (MDF). A combinação da micro-mecânica e tais métodos numéricos fornecem uma ferramenta poderosa para a modelagem do comportamento de materiais.

No presente estudo é utilizado o MEC para resolver o problema de transferência de calor de problemas potenciais em materiais porosos. O MEC consiste, basicamente, na transformação de parte da equação diferencial que governa o problema em uma equação integral. O contorno do problema é então discretizado em elementos de superfície. Com esta discretização, as integrais no contorno são aproximadas por integrações efetuadas em cada elemento. Estas integrais, as quais são obtidas numericamente, geram coeficientes de influência entre os diversos elementos formando um sistema de equações que relacionam potenciais e fluxos em todos os elementos que aproximam o contorno. As primeiras formulações matemáticas para o MEC foram conhecidas no final do século XIX, mas somente no final da década de 60 que o método passou a receber maior atenção na comunidade científica. A principal razão para este acontecido é devido a sua formulação puramente matemática e, em parte, pelo grande desenvolvimento do MEF, que atraiu atenção de pesquisadores de diferentes áreas por sua grande abrangência na solução de equações diferenciais. Incorporando algumas características do MEF, o MEC tomou impulso a partir dos anos 70 e tornou-se uma alternativa viável para solução de problemas de engenharia, principalmente em situações onde o MEF não se comporta adequadamente. A redução de uma dimensão do problema, em problemas lineares, é a principal característica desse método, o que diminui drasticamente a quantidade de dados necessários para a resolução computacional do mesmo. Assim a discretização de microestruturas contendo heterogeneidades resulta num simples modelo empregando um eficiente método numérico, onde as médias no volume das



variáveis envolvidas podem ser levadas ao contorno, precisando unicamente dos dados sobre o contorno da matriz do material e dispensando a discretização no domínio. A formulação do *Método de Campos Médios* faz do MEC um procedimento muito conveniente para este tipo de problemas. Uma desvantagem do MEC é a geração de matrizes cheias e não-simétricas, impedindo ou dificultando o uso de estratégias de solução já bem consumadas e utilizadas no MEF. A Figura 1.1 ilustra uma micro-estrutura discretizada com elementos finitos e uma com elementos de contorno, onde se visualiza claramente a diminuição de variáveis nodais que são processadas no MEC com respeito ao MEF. A Figura 1.2 ilustra um exemplo real de uma micro-estrutura vista por metalografia. Os modelos da micro-mecânica tentam representar este tipo de estrutura, onde regiões escuras podem ser compostas de vazios ou regiões de condutividade térmica menor.

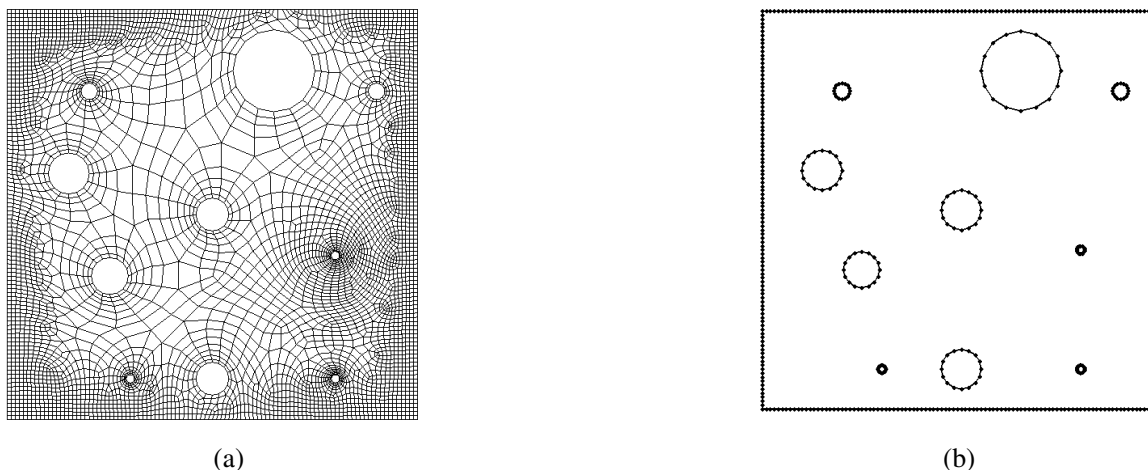


Figura 1.1: (a) Malha de elementos finitos de uma micro-estrutura. (b) Malha de elementos de contorno de uma micro-estrutura.

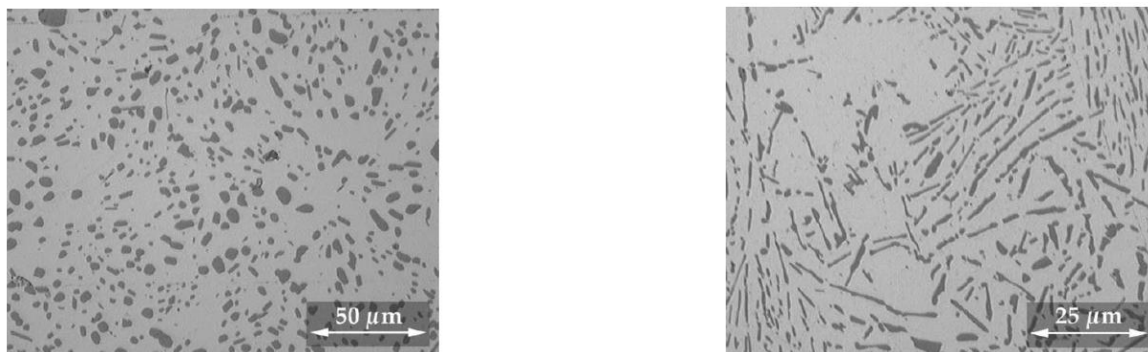


Figura 1.2: Metalografia de uma micro-estrutura com inclusões circulares e elípticas.

Neste trabalho é apresentado o estudo de problemas potenciais aplicado a materiais microporosos com comportamento linear e com distribuição aleatória em sua micro-estrutura, onde é possível prever as propriedades termo-físicas efetivas do material. O algoritmo desenvolvido pode ser estendido e aplicado ao projeto de materiais cerâmicos e compósitos multi-fase. A formulação é aplicada a materiais isotrópicos e ortotrópicos.

### **1.1. Revisão bibliográfica**

Buscar o conhecimento de parâmetros e fenômenos físicos microscópicos de materiais porosos e a sua relação direta com o comportamento macroscópico tem sido uma grande tendência na área da ciência dos materiais. Juntamente com a utilização de métodos numéricos, este novo campo de estudo é denominado *Computational Material Science*. Estudos de propriedades condutivas térmicas / elétricas, propriedades de difusividade e permeabilidade de materiais heterogêneos vêm atraindo a atenção da comunidade científica desde o século passado. Inúmeros estudos analíticos foram desenvolvidos, desde os trabalhos pioneiros de *Maxwell*, 1873 e *Voigt*, 1928, até os trabalhos mais recentes que continuamente estão apresentando novos modelos estatísticos e analíticos aplicados a um determinado tipo de material específico.

Existem muitos estudos sobre propriedades efetivas de materiais heterogêneos na área da elasticidade, onde o MEC é amplamente utilizado como ferramenta numérica. Buroni F. C., 2006, realiza um grande apanhado de referências importantes associadas a problemas aplicados na elasticidade e na micro-mecânica, onde é possível verificar que o MEC é uma ferramenta muito mais adequada que o MEF em simulações de duas dimensões para compostos com inclusões. Por isso e outros aspectos positivos, nos últimos anos o MEC tem sido utilizado cada vez mais em modelagens na micro-mecânica de materiais compostos.

Predizer a condutividade térmica de materiais heterogêneos compreende uma significativa porção da literatura de transferência de calor. Um grande número de modelos relacionados ao cômputo da propriedade térmica efetiva destes materiais tem sido proposto, dos quais muitos empíricos e ou muito específicos para um determinado tipo de material. Dos modelos analíticos mais comumente empregados para solucionar problemas de propriedades efetivas, todos apresentam o inconveniente quando utilizados com um percentual alto de inclusões ou furos em sua matriz. Para problemas potenciais, e principalmente para problemas não isotrópicos, as publicações nesta área são escassas.

Existe um grande número de estudos a respeito de condutividade térmica efetiva onde, em sua maior parte, o MEF é empregado juntamente com modelos analíticos, estatísticos e experimentais. Trabalhos como o de Carson et al, 2005 e Carson et al, 2003, onde uma aplicação em um modelo de duas dimensões é realizada exaustivamente para analisar a influência de poros na condutividade térmica efetiva utilizando o MEF. A análise é comparada com métodos analíticos e é importante verificar o extenso trabalho feito nas gerações de malhas. Öchsner et al, 2006, também realiza estudos de propriedades térmicas efetivas onde um modelo tridimensional é analisado pelo MEF com o intuito de encontrar o EVR ideal de suas amostras numéricas. Por fim, modelos analíticos são verificados para comparação e validação dos modelos numéricos. Os autores utilizam modelos periódicos e aleatórios com aplicação distinta em espumas metálicas do tipo *Lotus*. O modelo em elementos finitos é parametrizado compreendendo somente um quarto da geometria. No trabalho de Zhao et al, 2006, estudam-se as relações da propriedade transversal em um composto de duas fases utilizando o MEF. As propriedades efetivas são verificadas em materiais isotrópicos e transversalmente isotrópicos. Em Annapragada et al, 2007, um modelo micro-mecânico é desenvolvido para prever as propriedades termo-mecânicas de materiais compósitos explosivos. Estes materiais são confeccionados com aglomerados de partículas de tamanhos variados. Para prever o EVR é empregado um modelo em elementos finitos, enquanto que as demais propriedades térmicas são determinadas através de uma aproximação por volumes finitos. A formulação para obtenção do  $k_{eff}$  empregada nesta referência é a mesma adotada no presente estudo.

Muitos outros métodos de verificação das propriedades condutivas efetivas são encontrados na literatura. Alguns trabalhos merecem destaque, pois seus resultados servem para validação e comparação. Trabalhos como o de Girauld et al, 2007, onde a condutividade térmica efetiva de seções transversais isotrópicas com inclusões elípticas orientadas arbitrariamente em materiais rochosos e argilosos são verificadas utilizando a *função de Green* como método para verificar o tensor propriedades efetivas juntamente com o método da homogeneização. Wang & Pan, 2008, estuda um método analítico para prever a condutividade térmica efetiva de espumas porosas com células abertas e comparadas com métodos experimentais. Em Chatterjee et al, 2007, é implementada uma formulação com elementos de contorno três dimensões em regime permanente, na qual materiais compósitos com fibras de reforço são analisados. Os elementos de contorno são representados por um sistema curvilíneo, cilíndrico e com temperaturas e fluxos representados em termos de funções trigonométricas num cubo de fibras randômicas. Integrais semi-analíticas são apresentadas, o que acelera o processo de solução diminuindo o custo computacional. Buroni & Marczak 2008, utilizam estas funções trigonométricas para representar

os furos da matriz do material heterogêneo, diminuindo significativamente o custo computacional na solução de problemas para materiais porosos e com inclusões em elasticidade. Um estudo investigativo da propriedade térmica efetiva com uma aplicação bem específica é realizado em Sarwar & Majumdar, 1995. Neste trabalho a condutividade térmica de uma cama de dissecação com material poroso e inerte é investigada utilizando modelos analíticos e experimentais. Meric, 1997, é um dos poucos trabalhos onde é utilizado o MEC aplicado a materiais não isotrópicos. Este estudo é focado na investigação do problema conhecido como *Joule Heating*, onde o campo do potencial elétrico é satisfeito pela equação de *Poisson*. Linhas equipotenciais e isotermas são verificadas em uma placa contendo três furos. Em Baltz et al, 1997, uma modelagem tridimensional com implementação computacional em paralelo é verificada para prever propriedades efetivas. O modelo em formato cilíndrico contém esferas, as quais representam as inclusões do material.

Na área da micro-estruturas, existem muitas publicações importantes onde o método do EVR é apresentado. Trabalhos como o de Kanit et al., 2003, onde as aproximações numéricas e estatísticas na determinação do EVR de estruturas compósitas randômicas são estudadas. Böhm, 1998 e Zohdi, 2002, apresentam um grande apanhado sobre modelagem micro-estrutural e verificações de propriedades efetivas com modelos analíticos aplicados para propriedades térmicas e elásticas.

Em Gottfried, 2002, um estudo de propriedades efetivas é apresentado utilizando o MEF como ferramenta numérica. É apresentada uma metodologia para prever o resfriamento por transpiração de pás em turbinas a gás. Embora o trabalho empregue a formulação do fenômeno físico da convecção, o modelo é inicialmente validado para condutividade efetiva ortotrópica. Este é um bom caso de aplicação onde a importância do presente estudo é justificada.

## **1.2. Objetivos do trabalho**

O foco deste trabalho é apresentar um estudo onde as propriedades de condutividade térmica efetiva de materiais micro-porosos em duas dimensões são obtidas através do MEC. A formulação do código permite a geração de furos no domínio do EVR, onde são dispersos de forma aleatória. Os furos apresentam raio fixo e uma fração volumétrica pré-determinada. As análises são aplicadas a problemas potenciais em regime permanente, onde as equações diferenciais são resolvidas numericamente pelo método dos elementos de contorno. A metodologia assim proposta permite a análise tanto de materiais isotrópicos como ortotrópicos.

### **1.3. Organização do texto**

Este trabalho está estruturado em cinco capítulos, o primeiro dos quais é a presente introdução. O Capítulo 2 consiste na apresentação resumida do Método dos Elementos de Contorno, ferramenta numérica utilizada neste estudo para resolver as equações diferenciais do problema de condução de calor. A modelagem numérica da micro-estrutura do material é apresentada no Capítulo 3, onde uma formulação eficiente do MEC para a geração de furos em uma matriz homogênea, isotrópica ou ortotrópica é desenvolvida. Após apresentadas todas as formulações e validações do código desenvolvido, o Capítulo 4 apresenta os resultados das propriedades efetivas para frações de volume específicas. Finalmente, o Capítulo 5 expõe as principais conclusões e sugere alguns tópicos e recomendações para a continuação do presente trabalho.

## 2. MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS POTENCIAIS

O *Método dos Elementos de Contorno* (MEC) é uma ferramenta numérica aplicada na aproximação de soluções para problemas da mecânica do contínuo. É uma poderosa alternativa frente a outros métodos mais comumente utilizados e conhecidos, como o *Método de Elementos Finitos* (MEF), o *Método dos Volumes de Contorno* (MVC) e o *Método das Diferenças Finitas* (MDF). O MEC se destaca frente aos outros métodos em aplicações onde é necessária uma melhor precisão, como em problemas de concentração de tensões e domínios infinitos. Além disso, uma das principais e mais importante característica deste método é a necessidade de discretizar somente a superfície do contorno do problema, dispensando a discretização de todo o volume, fato que é comum em outros métodos numéricos. Esta característica, dentre outras, fazem do MEC uma alternativa muito atrativa quanto à geração de malhas, em problemas de otimização da geometria onde necessite re-malhamentos durante o cálculo (métodos adaptativos), contato entre corpos e outros problemas similares onde as variáveis sobre o contorno desempenhem um papel importante.

Esta técnica já está muito bem fundamentada para a solução de problemas potenciais, apesar de ser um método numérico relativamente novo e em menor número de publicações, quando comparado aos outros métodos numéricos.

Neste capítulo, o principal objetivo é apresentar uma revisão do MEC, onde todas as fundamentações vêm de um apanhado realizado dos textos de Brebbia et. al. (1984), Brebbia & Dominguez (1992) e Kane (1994).

Conforme já mencionado anteriormente, a aproximação da solução no MEC é realizada somente no contorno do domínio, resolvendo-se assim o problema de valores no contorno associado à equação governante. Para que o MEC apresente uma excelente precisão, tanto para variáveis primais como duais, é preciso empregar as soluções fundamentais da equação governante do problema como funções pesos em sua formulação matemática. Conseqüentemente, o método é viável somente quando é conhecida uma solução fundamental de sua equação diferencial. Tanto para a equação de *Laplace* como a equação de *Poisson*, a solução fundamental é normalmente requerida como a distribuição de temperatura em um domínio infinito ou semi-infinito de material com condutividade unitária, e submetido a uma fonte de calor concentrada.

## 2.1. Formulação integral para problemas potenciais

Existem dois tipos de abordagem para se deduzir as equações integrais de contorno: o *método direto* e o *método indireto*. Para esta dedução é adotado o método direto e a solução fundamental da equação de Poisson em duas dimensões, descrita por:

$$\nabla^2 u = b \quad \text{em } \Omega \quad (2.1)$$

onde  $u$  representa o potencial,  $b$  a fonte térmica e  $\Omega$  o domínio do problema.

Recíproco ao *Teorema de Betti*, *Terceira Identidade de Green* ou *Princípio dos Trabalhos Virtuais*, a ponderação do resíduo da Equação (2.1) pode ser escrita como:

$$\int_{\Omega} (\nabla^2 u - b) w d\Omega \quad (2.2)$$

onde  $w$  é a função peso arbitrária. Realizando a integração por partes dos termos em  $x$  e  $y$ , resulta em:

$$\int_{\Omega} \left\{ -\frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} - b w \right\} d\Omega + \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} w d\Gamma = 0 \quad (2.3)$$

Desta integração por partes, tem-se um termo que é a derivada de  $u$  em relação à normal, denotado por  $\frac{\partial u}{\partial \eta}$ . Este termo é o fluxo denominado por  $q$ . Integrando novamente a Equação

(2.3) por partes, obtém-se:

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} u + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} u - b w \right) d\Omega + \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} w d\Gamma - \int_{\Gamma} u \frac{\partial w}{\partial n} d\Gamma = 0 \quad (2.4)$$

Escrevendo a igualdade entre as Equação (2.2) e Equação (2.4) resulta em:

$$\int_{\Omega} (\nabla^2 u) w d\Omega = \int_{\Omega} (\nabla^2 w) u d\Omega - \int_{\Gamma} u \frac{\partial w}{\partial n} d\Gamma + \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} w d\Gamma = 0 \quad (2.5)$$

A Equação (2.5) também pode ser expressa como a forma conhecida do *Teorema de Green*, da seguinte maneira:

$$\int_{\Omega} (\nabla^2 u) w - (\nabla^2 w) u \, d\Omega = + \int_{\Gamma} w \frac{\partial u}{\partial n} - \int_{\Gamma} u \frac{\partial w}{\partial n} \, d\Gamma = 0 \quad (2.6)$$

Considerando que o contorno do domínio  $\Omega$  esteja dividido em duas partes  $\Gamma_1$  e  $\Gamma_2$  onde  $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$  e  $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = 0$  e nas seguintes condições de contorno naturais e essenciais (*Dirichlet* e *Neuman* respectivamente):

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} & \text{em } \Gamma_1 \\ q &= \frac{\partial u}{\partial \eta} = \bar{q} & \text{em } \Gamma_2 \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde  $\bar{u}$  e  $\bar{q}$  são o potencial e fluxo prescritos respectivamente.

Substituindo-se as condições de contorno descritas em (2.7) na Equação (2.6) é possível reescrever a expressão da seguinte forma:

$$\int_{\Omega} \{(\nabla^2 w) u - b w\} \, d\Omega + \int_{\Gamma_1} q w \, d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \bar{q} w \, d\Gamma - \int_{\Gamma_1} \bar{u} \frac{\partial w}{\partial \eta} \, d\Gamma - \int_{\Gamma_2} u \frac{\partial w}{\partial \eta} \, d\Gamma = 0 \quad (2.8)$$

Para obter a equação original de Laplace é necessário integrar novamente por partes a Equação (2.8), o que resulta em:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left\{ -\frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} - b w \right\} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \frac{\partial w}{\partial \eta} u \, d\Gamma + \dots \\ & \dots + \int_{\Gamma_2} \frac{\partial w}{\partial \eta} u \, d\Gamma - \int_{\Gamma_1} q w \, d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \bar{q} w \, d\Gamma - \int_{\Gamma_1} \bar{u} \frac{\partial w}{\partial \eta} \, d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

Logo após, a primeira integral é dividida sob  $\Gamma$  em dois termos  $\Gamma_1$  e  $\Gamma_2$ . O segundo termo resultante pode ser cancelado com a última integral da Equação (2.8), obtendo:

$$\int_{\Omega} \left\{ -\frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} - b w \right\} \, d\Omega + \int_{\Gamma_1} \frac{\partial w}{\partial \eta} u \, d\Gamma - \int_{\Gamma_2} w q \, d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \bar{q} w \, d\Gamma - \int_{\Gamma_1} \bar{u} \frac{\partial w}{\partial \eta} \, d\Gamma = 0 \quad (2.10)$$



e integrando novamente,

$$\int_{\Omega} \{(\nabla^2 u - b)w\} d\Omega - \int_{\Gamma_2} wq d\Gamma + \int_{\Gamma_1} \frac{\partial w}{\partial \eta} u d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \bar{q}w d\Gamma - \int_{\Gamma_1} \bar{u} \frac{\partial w}{\partial \eta} d\Gamma = 0 \quad (2.11)$$

Rearranjando os termos da Equação (2.11) em relação à parte do contorno referente às integrais, tem-se:

$$\int_{\Omega} \{(\nabla^2 u - b)w\} d\Omega - \int_{\Gamma_2} (q - \bar{q})w d\Gamma + \int_{\Gamma_1} (u - \bar{u}) \frac{\partial w}{\partial \eta} d\Gamma = 0 \quad (2.12)$$

Esta metodologia tenta satisfazer a equação diferencial no domínio juntamente com as integrais no contorno. A Equação (2.12) relaciona o potencial  $u$  e o fluxo  $q$  no contorno. Para o caso onde não exista a presença de fontes térmicas dentro do domínio, a variável  $b$  pode ser considerada zero ( $b = 0$ ). Assim, tem-se:

$$u^i(x^i) + \int_{\Gamma} u(x^i) q^*(x^i, \zeta) d\Gamma = \int_{\Gamma} q(x^i) u^*(x^i, \zeta) d\Gamma \quad (2.13)$$

As funções  $u^*$  e  $q^*$  apresentadas na Equação (2.13) são as soluções fundamentais em  $x$  devido a uma carga unitária aplicada em  $\zeta$  (para problemas em duas dimensões) onde são [Brebbia et. al. 1984]:

$$\begin{aligned} u^* &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \ln \frac{1}{r} d\Gamma \\ q^* &= \frac{\partial u^*}{\partial \eta} \\ r &= \|x - \zeta\| \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde  $\eta$  é a direção do fluxo  $q$ .

Na presença de fontes, a Equação (2.13) pode ser escrita como:

$$u^i(x^i) + \int_{\Gamma} u(x^i) q^*(x^i, \zeta) d\Gamma = \int_{\Gamma} q(x^i) u^*(x^i, \zeta) d\Gamma + \int_{\Omega} u^*(x^i, \zeta) b(x^i) d\Omega \quad (2.15)$$

As formulações da Equação (2.13) e a Equação (2.15) permitem calcular o potencial em qualquer ponto interior  $i$  de  $\Omega$ , desde que os valores de potencial  $u$  e fluxo  $q$  sejam conhecidos sobre o contorno  $\Gamma$ . É importante salientar que estas equações apresentam solução exata, sem erros. Esta é uma das vantagens que o método apresenta em relação ao MEF. Para se obter uma expressão similar à Equação (2.15) para o cálculo dos fluxos, basta simplesmente efetuar uma diferenciação, o que resulta em:

$$\begin{aligned} q_x^i(x^i) + \int_{\Gamma} u(x^i) \frac{\partial q^*(x^i, \zeta)}{\partial x} d\Gamma &= \int_{\Gamma} q(x^i) \frac{\partial u^*(x^i, \zeta)}{\partial x} d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial u^*(x^i, \zeta)}{\partial x} b(x^i) d\Omega \\ q_y^i(x^i) + \int_{\Gamma} u(x^i) \frac{\partial q^*(x^i, \zeta)}{\partial y} d\Gamma &= \int_{\Gamma} q(x^i) \frac{\partial u^*(x^i, \zeta)}{\partial y} d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial u^*(x^i, \zeta)}{\partial y} b(x^i) d\Omega \end{aligned} \quad (2.16)$$

Aplicando o limite na integral da Equação (2.15) é obtida uma identidade válida para o contorno, levando a equação integral [Brebbia et. al., 1984]:

$$c^i u^i(x^i) + \int_{\Gamma} u(x^i) q^*(x^i, \zeta) d\Gamma = \int_{\Gamma} q(x^i) u^*(x^i, \zeta) d\Gamma + \int_{\Omega} u^*(x^i, \zeta) b(x^i) d\Omega \quad (2.17)$$

onde  $c^i$  é um fator geométrico dependente da geometria local do contorno.

## 2.2. O MEC discretizado para problemas potenciais

Para resolver a equação integral (2.17) numericamente, o contorno  $\Omega$  é discretizado em  $n$  elementos de contorno. Cada elemento de contorno tem seus valores de potencial e fluxo escritos em função dos seus valores nodais (Figura 2.1). Desta forma é possível obter um sistema de equações lineares onde os valores desconhecidos sobre o contorno podem ser encontrados. Assim, é necessário escrever a Equação (2.17) para todos os pontos nodais do problema e aplicar as condições de contorno prescritas.

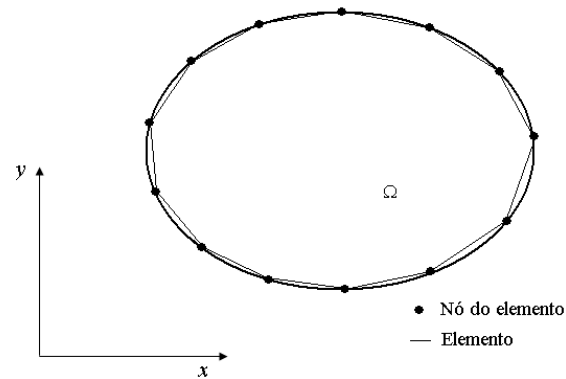


Figura 2.1: Discretização do domínio com elementos de contorno.

Como o problema agora se trata de um domínio discretizado é conveniente trabalhar com notação matricial. As aproximações para as variáveis  $u$  e  $q$  e as geometrias  $x$  e  $y$  em cada elemento de contorno  $j$  são apresentadas como:

$$\begin{aligned} u(\xi) &= [\Phi]\{u^j\} \\ q(\xi) &= [\Phi]\{q^j\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} x(\xi) &= [\bar{\Phi}]\{x^j\} \\ y(\xi) &= [\bar{\Phi}]\{y^j\} \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde  $[\Phi]$  e  $[\bar{\Phi}]$  são funções de interpolação para as variáveis e a geometria respectivamente.

### 2.2.1. Elemento linear descontínuo

Existem dois tipos de elementos de contorno: contínuos e descontínuos. A utilização de elementos de contorno descontínuos tem, por diversos fatores, se tornado uma prática muito comum nos últimos tempos. Um fato é a fácil resolução do problema de cantos, onde se tem duas normais em um mesmo ponto. Isso implica que, se os fluxos e temperaturas nodais são desconhecidos, o número de equações neste nó é menor que o número de variáveis. A modelagem de cantos vivos no MEC tem ainda outras possíveis soluções como: utilizar um elemento bem pequeno no canto para fazer a transição entre as normais e ou utilizar um nó duplo

nos elementos dos cantos. Ambas as metodologias apresentam algum tipo de desvantagem para este estudo em termos de precisão.

A opção escolhida é a utilização de elementos descontínuos lineares. Essa descontinuidade implica que os nós físicos e os nós geométricos dos extremos do elemento não estão necessariamente no mesmo lugar. Ou seja, o elemento descontínuo é formado por nós físicos e nós geométricos diferentes. Assim as funções de interpolação utilizadas para os nós geométricos necessitam de uma correção para que sejam válidas para os nós físicos.

Nos elementos lineares, as temperaturas  $u_i$  e os fluxos  $q_i$  são representados por funções lineares em função dos seus valores nodais. Os valores de  $u_i$  e  $q_i$  em qualquer ponto no elemento podem ser definidos de acordo com as equações (2.18) e (2.19) em:

$$u = \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 & \phi_2 \\ \phi_1 & \phi_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \Phi u^j \quad (2.20)$$

$$q = \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 & \phi_2 \\ \phi_1 & \phi_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{Bmatrix} = \Phi q^j \quad (2.21)$$

As funções de interpolação  $\phi_1$  e  $\phi_2$  são:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{1}{2}(1-\xi) \\ \phi_2 &= \frac{1}{2}(1+\xi) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Os dois nós do elemento são deslocados de suas posições iniciais pelas distâncias  $a$  e  $b$ , respectivamente, conforme apresentado na Figura 2.2. A Equação (2.20) então pode ser particularizada para os nós deslocados na forma:

$$\begin{Bmatrix} u_a \\ u_b \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1(\xi_a) & \phi_2(\xi_a) \\ \phi_1(\xi_b) & \phi_2(\xi_b) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} \quad (2.23)$$

Onde as coordenadas locais para os pontos nodais são:

$$\xi_a = \left(\frac{2a}{l}\right) - 1 \quad \therefore \quad \xi_b = 1 - \left(\frac{2b}{l}\right) \quad (2.24)$$

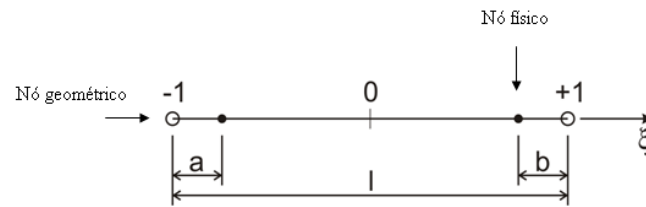


Figura 2.2: Elemento descontínuo linear.

Substituindo-se (2.23) em (2.20) pode-se obter o valor de  $u$  em qualquer ponto sobre o elemento em termos dos valores nodais.

$$u(\xi) = [\phi_1 \ \phi_2] Q \begin{Bmatrix} u^a \\ u^b \end{Bmatrix} = [\phi_1' \ \phi_2'] \begin{Bmatrix} u^a \\ u^b \end{Bmatrix} \quad (2.25)$$

Torna-se necessário realizar uma correção aos nós deslocados através de uma matriz  $Q$ .

$$Q = \frac{1}{l-a-b} \begin{bmatrix} l-b & -a \\ -b & l-a \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Todas as relações realizadas para o potencial  $u$ , descritas a partir da Equação (2.23), devem ser reescritas também para o fluxo  $q$ . As funções de interpolação modificadas estão ilustradas na Figura 2.3.

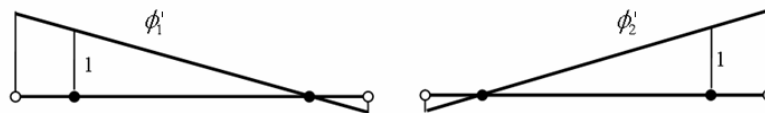


Figura 2.3: Funções de interpolação modificadas para o elemento descontínuo.

Estas técnicas de tratamento de cantos são de suma importância para problemas onde as variáveis apresentam um gradiente elevado. Em problemas da mecânica da fratura isto é muito comum, o que torna o MEC uma ótima ferramenta de solução para este tipo de problema,

confirmando as vantagens abordadas no capítulo introdutório desta seção. A Figura 2.4 ilustra a idéia do tipo de elemento contínuo linear utilizado neste trabalho.

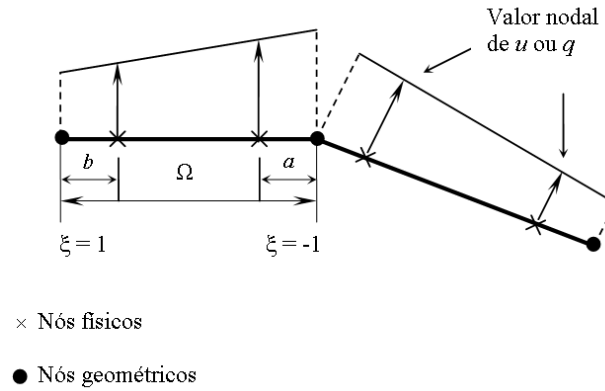


Figura 2.4: Elementos descontínuos utilizados neste estudo.

### 2.2.2. Formulação matricial

Com as funções de interpolação definidas em um domínio normalizado  $\xi = [-1, +1]$ , é possível apresentar uma solução aproximada da seguinte forma:

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} \{\phi\}^T q^* d\Gamma \{u^j\} = \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} u^* \{\phi\}^T d\Gamma \{q^j\} \quad (2.27)$$

A Equação (2.27) é a mesma Equação (2.13) apresentada anteriormente, mas escrita em sua forma discretizada, onde o sobre-índice  $j$  indica as variáveis nodais do  $j$ -ésimo elemento de contorno. Seguindo o simples exemplo apresentado na Figura 2.5 é possível demonstrar o esquema de montagem da matriz no MEC.

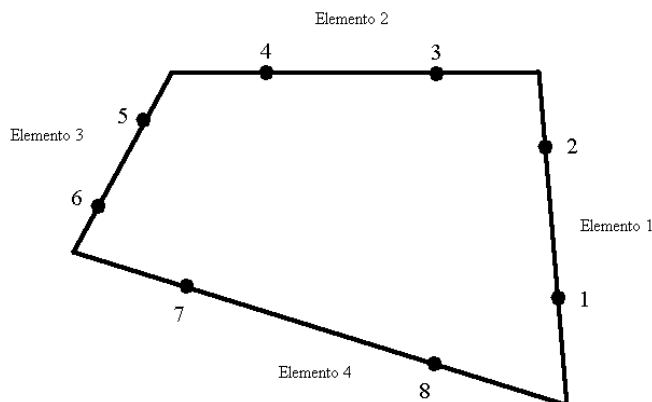


Figura 2.5: Exemplo de um modelo simples do MEC com 4 elementos descontínuos e 8 nós.

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{18} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{28} \\ c_{31} & c_{32} & \dots & c_{38} \\ c_{41} & c_{42} & \dots & c_{48} \\ c_{51} & c_{52} & \dots & c_{58} \\ c_{61} & c_{62} & \dots & c_{68} \\ c_{71} & c_{72} & \dots & c_{78} \\ c_{81} & c_{82} & \dots & c_{88} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \dots & d_{18} \\ d_{21} & d_{22} & \dots & d_{28} \\ d_{31} & d_{32} & \dots & d_{38} \\ d_{41} & d_{42} & \dots & d_{48} \\ d_{51} & d_{52} & \dots & d_{58} \\ d_{61} & d_{62} & \dots & d_{68} \\ d_{71} & d_{72} & \dots & d_{78} \\ d_{81} & d_{82} & \dots & d_{88} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \\ q_5 \\ q_6 \\ q_7 \\ q_8 \end{Bmatrix} \quad (2.28)$$

O nó um, referido momentaneamente como ponto fonte, varre todos os elementos criando as primeiras linhas da matriz. Logo após, o nó dois passa a ser o ponto fonte varrendo novamente todas as variáveis nodais, montando a matriz apresentada na Equação (2.28). Este esquema final está ilustrado na Figura 2.6.

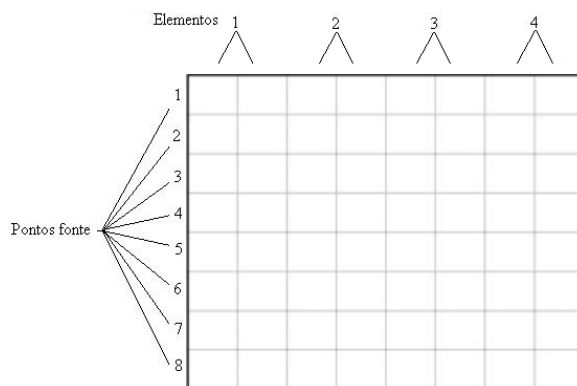


Figura 2.6: Esquema da montagem da matriz no MEC.

As equações integrais presentes na Equação (2.27) devem ser avaliadas por um esquema numérico. A quadratura tradicional de Gauss é empregada para o cálculo das integrais no MEC. Em alguns casos, quando o ponto a ser calculado está muito próximo ao ponto fonte, as singularidades presentes nas soluções fundamentais da Equação (2.14), que estão contidas nas integrais, devem ser analisadas à parte. Desse modo, quando o elemento a ser integrado contém o ponto fonte, em geral, uma técnica de integração diferente deve ser utilizada, pois a quadratura de Gauss não se aplica para integrais singulares.

O nível de singularidade varia conforme a solução fundamental utilizada. Nos problemas analisados durante este estudo, a solução fundamental de potencial ( $u^*$ ) é regular, a qual é integrada com quadratura de *Gauss-Legendre* padrão. Já a solução fundamental de fluxo ( $q^*$ ) apresenta singularidade fraca, e é integrada utilizando a técnica proposta por Telles [1987].

Definindo agora as seguintes sub-matrizes:

$$\{h\}^T = \int_{\Gamma_j} \{\phi\}^T q^* d\Gamma \quad (2.29)$$

$$\{g\}^T = \int_{\Gamma_j} u^* \{\phi\}^T d\Gamma \quad (2.30)$$

a Equação (2.27) é reescrita da seguinte forma:

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^n \{h\}^T \{u\}_j = \sum_{j=1}^n \{g\}^T \{q\}_j \quad (2.31)$$

a Equação (2.31) contém  $n$  incógnitas. Depois de efetuar o processo de colocação sobre todos os nós do contorno, resulta no seguinte sistema de equações:

$$[H] \{u\} = [G] \{q\} \quad (2.32)$$

para cada ponto nodal  $i$ , ou  $u$  ou  $q$  deve ser prescrito para que haja solução única. Todas as variáveis incógnitas são agrupadas do lado esquerdo do sistema de equações, com os valores



numéricos das condições de contorno prescritas sendo agrupados no lado direito. Este procedimento resulta o seguinte sistema:

$$[A]\{X\}=\{F\} \quad (2.33)$$

onde o vetor  $\{X\}$  contém as variáveis incógnitas sobre os nós do contorno.

Uma vez resolvida a Equação (2.33), as variáveis em pontos internos podem ser obtidas através das versões discretizadas da Equação (2.13), se desejado:

$$u_i = \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} u^* \{\phi\}^T d\Gamma \{q^j\} - \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} \{\phi\}^T q^* d\Gamma \{u^j\} \quad (2.34)$$

para o potencial e de (2.16) para os fluxos:

$$\begin{aligned} q_x^i &= \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} \frac{\partial u^*}{\partial x} \{\phi\}^\Gamma d\Gamma \{q^j\} - \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} \frac{\partial q^*}{\partial x} \{\phi\}^\Gamma d\Gamma \{u^j\} \\ q_y^i &= \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} \frac{\partial u^*}{\partial y} \{\phi\}^\Gamma d\Gamma \{q^j\} - \sum_{j=1}^n \int_{\Gamma_j} \frac{\partial q^*}{\partial y} \{\phi\}^\Gamma d\Gamma \{u^j\} \end{aligned} \quad (2.35)$$

### 2.3. Problemas potenciais não-isotrópicos

As formulações apresentadas até o momento são aplicadas somente em materiais isotrópicos, onde as propriedades termo-físicas não são dependentes das direções coordenadas. Quando a condutividade térmica é dependente das direções coordenadas, estes materiais são classificados como ortotrópicos e ou anisotrópicos.

Devido a crescentes aplicações deste tipo de materiais na engenharia, como exemplo de materiais cerâmicos e materiais compostos específicos, o estudo do comportamento da condução do calor em meios anisotrópicos cresceu consideravelmente nestes últimos anos. Porém, ainda são muito poucos os resultados relativos à transferência de calor em meios porosos ortotrópicos e anisotrópicos na literatura.

Assim, uma parte deste estudo é dedicada a problemas de potencial em materiais de comportamento não isotrópico. Neste estudo é utilizado o conhecido método de mapeamento de domínio, ou transformação linear de coordenadas apresentado a seguir.

### 2.3.1. Método da transformação de coordenadas

O método da transformação de coordenadas lineares consiste em mapear inicialmente um domínio anisotrópico ou ortotrópico para um novo domínio de comportamento isotrópico, sendo este matematicamente equivalente ao domínio original. Esta formulação utilizada é apresentada em Shiah & Tan, 1997; Ma & Chang, 2003 e Shiah & Tan, 2004. Este procedimento apresenta a vantagem de poder calcular o problema no domínio isotrópico e somente depois levar estas variáveis para o domínio original.

É importante salientar que, além do mapeamento geométrico, também se faz necessário o mapeamento das condições de contorno de Neumann. Para obter a solução final no domínio original e dos fluxos, basta aplicar a inversa do mapeamento geométrico e do mapeamento do fluxo. Como o interesse especial deste trabalho consiste no estudo de materiais de comportamento ortotrópico, o termo da derivada cruzada da equação diferencial governante é considerado zero ( $k_{xy} = 0$ ).

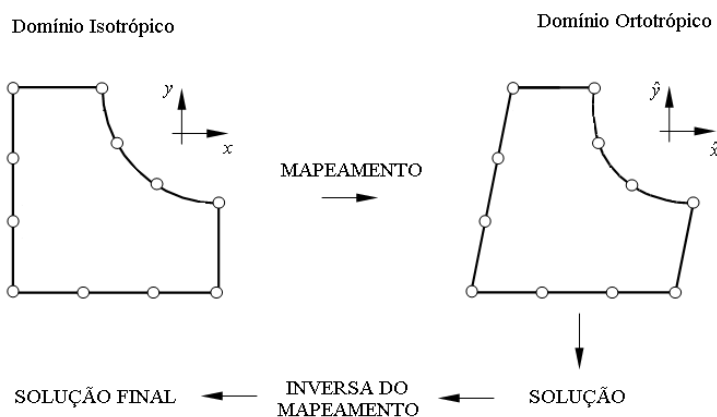


Figura 2.7: Ilustração do mapeamento geométrico utilizado.

Com o intuito de transformar o domínio ortotrópico no equivalente isotrópico, são utilizadas as coordenadas efetivas, as quais estão apresentadas em sua forma matricial da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

onde as variáveis  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $k$  são respectivamente:

$$\alpha = \frac{-k_{xy}}{k_{yy}} \quad \therefore \quad \beta = \frac{k}{k_{yy}} \quad \therefore \quad k = \sqrt{k_{xx}k_{yy} - k_{xy}^2} \quad (2.37)$$

A Figura 2.7 ilustra a transformação de domínios realizada pelo mapeamento de acordo com a Equação (2.36). O domínio do problema originalmente ortotrópico com as variáveis  $x$  e  $y$  são convertidas para o domínio isotrópico, definido como  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$ . A equação governante no domínio transformado resulta em:

$$k \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (2.38)$$

onde  $k$  é a condutividade térmica equivalente fornecida pela equação (2.37).

É importante destacar dois pontos: o primeiro consta na eliminação do termo cruzado na derivada da Equação (2.38). O segundo ponto é que a matriz de transformação da Equação (2.36) admite inversa. Esta transformação assemelha-se à rotação da equação constitutiva aos seus eixos principais. As condições de contorno de *Neumann* também devem ser transformadas de acordo com:

$$\begin{aligned} \hat{q}_y &= q_y \\ \hat{q}_x &= \frac{q_x + \alpha q_y}{\beta} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Com a inversão da Equação (2.39), as condições de contorno de *Neumann* originais são representadas na forma:

$$\begin{aligned} q_y &= -k \frac{\partial u}{\partial y} = \hat{q}_y \\ q_x &= \beta q_{\hat{x}} - \alpha \hat{q}_y \end{aligned} \quad (2.40)$$

Finalizando, o mapeamento da geometria do domínio é efetivado através da Equação (2.36).

### 3. MODELAGEM NUMÉRICA E IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Neste capítulo é apresentado passo a passo um estudo para problemas potenciais em regime permanente, onde o principal objetivo é a verificação de propriedades termo-físicas efetivas. Esta metodologia de cálculo é aplicada em materiais micro-porosos, isotrópica ou ortotrópica, utilizando o método do EVR já discutido no Capítulo 1. Para o cálculo das temperaturas e dos fluxos de calor no contorno do EVR é necessário resolver um problema de valores de contorno para a micro-estrutura.

Em problemas de condução de calor, a condutividade térmica é um tensor de segunda ordem. Localmente é dada pela razão entre a média volumétrica do fluxo de calor e a média volumétrica do gradiente de temperatura em um EVR.

As propriedades efetivas macroscópicas de um material podem ser encontradas através dos fluxos térmicos conhecidos pelo EVR idealizado. Seguindo Kakaç S. & Yener Y., 1993, a equação governante da lei de condução, conhecida também como equação de calor de *Fourier*, é apresentada da seguinte forma:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla u \quad \therefore \quad \{q\} = -[\mathbf{K}]\{\nabla u\} \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{q} = [q_x \ q_y]^T$ . Em um sistema de coordenada retangular, as duas componentes do fluxo  $\mathbf{q}$  são:

$$\begin{aligned} q_x &= -k_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} - k_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \\ q_y &= -k_{yx} \frac{\partial u}{\partial x} - k_{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde  $k_{ij}$  são os coeficientes do tensor condutividade térmica  $[\mathbf{K}]$ :

$$[\mathbf{K}] = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} \\ k_{yx} & k_{yy} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

A Figura 3.1 ilustra o fluxo de calor que cruza as fronteiras  $\overline{AB}$  e  $\overline{CD}$  delimitados pelas arestas superiores isoladas.

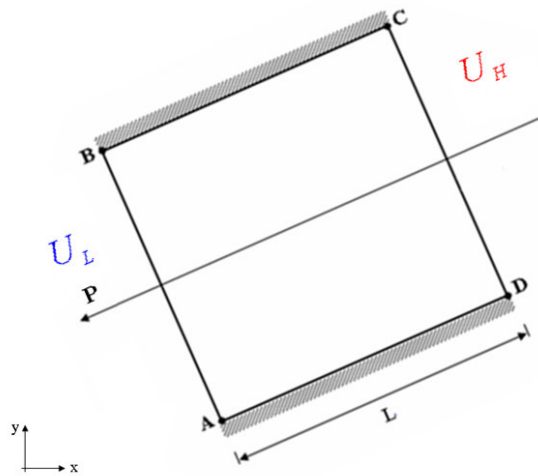


Figura 3.1: Ilustração do sentido do fluxo de calor  $\vec{P}$  cruzando as fronteiras  $\overline{AB}$  e  $\overline{CD}$ .

Uma forma simples de se estimar a condutividade térmica efetiva na direção  $\vec{P}$ , ilustrada na Figura 3.1, pode ser encontrada em Annapragada S.R., et al, 2007 e Wang M. & Pan N., 2008, onde a seguinte equação de condutividade térmica efetiva é apresentada:

$$k_{eff} \Big|_{na\ dire\c{c}\tilde{a}\tilde{o}\ S} = \frac{qL}{(U_H - U_L)} \quad (3.4)$$

sendo  $q$  o fluxo de calor entre as fronteiras  $\overline{AB}$  e  $\overline{CD}$ ,  $(U_H - U_L)$  o diferencial de potencial e  $L$  a dimensão que representa a aresta quadrada do EVR.

Esta forma de cálculo evidencia a utilização do MEC, já que os únicos dados necessários para o cômputo de  $k_{eff}$  estão sobre o contorno

As variáveis  $u$  e  $q$  provêm da solução numérica da Equação (2.17).

### 3.1. Implementação Computacional

Para tornar possível a análise sobre vários EVR's numéricos com frações de volumes específicos e disposições de vazios randômicos na matriz de forma aleatória, é necessário criar um algoritmo que facilite este trabalho. Desenvolvido em linguagem MATLAB, este código gera um arquivo que fornece todas as informações necessárias para a análise no MEC. Estes dados de entrada são do tipo: número de nós, número de elementos, propriedades do material,

coordenadas da geometria, conectividades entre elementos e condições de contorno do problema.

Para todos os modelos aqui estudados, a discretização da matriz externa seguirá um padrão idêntico em todas as simulações, compreendendo 96 elementos de contorno lineares, sendo que cada aresta do EVR é discretizado por 24 elementos. A malha exterior gerada para o problema potencial está apresentada na Figura 3.2.

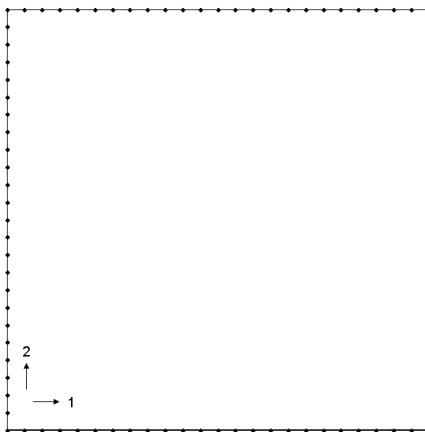


Figura 3.2: Malha externa do MEC discretizada para 96 elementos lineares.

Depois de obtidos os dados geométricos da matriz externa, é preciso criar um algoritmo que discretize furos dentro deste domínio, representando a micro-porosidade do material. Na literatura, o termo *poroso* é muito genérico. Muitos autores referenciam este termo como grão ou inclusão, onde o volume dos poros é ocupado por algum outro tipo de material, líquido ou componente gasoso de propriedades diferentes da matriz. Alternativamente, outros autores referenciam poroso como um material que apresenta uma matriz sólida, contínua e que contém bolhas isoladas ou interconectadas entre si. Neste trabalho, estes micro-poros são definidos como formas circulares, isoladas entre si e com raio constante dentro de um domínio limitado. Os vazios da matriz são considerados isolados devido à condutividade térmica média do ar ser muito baixa (aproximadamente 0.025 W/m.K) quando comparada a de outro material usual, como o alumínio por exemplo, que apresenta uma condutividade térmica em torno de 221 W/mK. Assim, cada poro da matriz pode ser considerado um isolante [Öchsner, et al 2006].

As constantes do tensor de condutividade da matriz considerados neste estudo são as seguintes:

$$\text{Modelo isotrópico } k_{xx} = k_{yy} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

$$\text{Modelo ortotrópico } k_{xx} < k_{yy} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$\text{Modelo ortotrópico } k_{xx} > k_{yy} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

Os valores dos tensores condutividade apresentados nas Equações (3.5), (3.6) e (3.7) são adimensionais, variando de uma a três unidades. Estes valores são adotados para os modelos ortotrópicos justamente para enfatizar o sentido preferencial do fluxo de calor no material (valor três representa sentido preferencial). Já para material isotrópico, o tensor condutividade apresenta somente o valor de uma unidade nos sentidos x e y. É importante ressaltar que estes valores representam a condutividade térmica do material da matriz, sendo que os furos apresentam condutividade zero (isolados).

O tamanho do EVR, compreendido por quatro arestas de lado  $L$ , é calculado em função das seguintes variáveis prescritas: número de furos ( $N_f$ ), raio dos furos ( $R$ ) e fração de volume ( $\varepsilon$ ). A fração de volume é a razão entre a área total dos furos ( $A_f$ ) e pela área total da placa ( $A_p$ ).

$$\begin{aligned} A_p &= L^2 \\ A_f &= N_f \pi R^2 \\ \varepsilon &= \frac{A_f}{A_p} = \frac{N_f \pi R^2}{L^2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

O tamanho do EVR pode ser estimado por:

$$L = \left( \frac{N_f \pi R^2}{\varepsilon} \right) = R \sqrt{\frac{N_f \pi}{\varepsilon}} \quad (3.9)$$

As coordenadas centrais dos furos geradas aleatoriamente respeitam uma regra para que não ocorra a intersecção dos furos com a fronteira do EVR. Esta regra é apresentada da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 R' &= R + \frac{1}{4}R \\
 D &= L - 2R' \\
 x_{ci} &= \text{rand}(D) + R' \\
 y_{ci} &= \text{rand}(D) + R'
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

onde  $D$  representa a dimensão interna limite dos furos e  $\text{rand}$  é uma função que gera números aleatoriamente num intervalo  $[0, D]$ .  $x_{ci}$  e  $y_{ci}$  são as coordenadas do centro dos furos. Detalhes são apresentados na Figura 3.3.

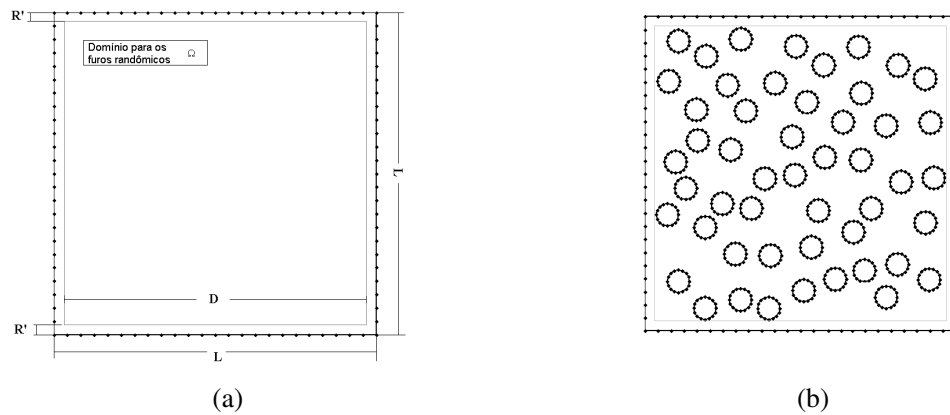


Figura 3.3: (a) Limite no domínio para criação dos furos randômicos. (b) Exemplo com célula de 50 furos.

Este algoritmo assegura a geração de furos aleatoriamente dispersos no EVR, sem interceptar a malha do contorno externo. A tolerância adotada nas coordenadas centrais é de 0,25.

Adicionalmente, para que os furos gerados não se interceptem entre si, uma segunda regra é imposta ao algoritmo. A seguinte distância  $D_f$  entre centro de furos deve ser respeitada:

$$\begin{aligned}
 D_f &= \sqrt{(x_{c_{i+1}} - x_{c_i})^2 + (y_{c_{i+1}} - y_{c_i})^2} \\
 D_f &\leq 2R + \frac{1}{4}
 \end{aligned}
 \tag{3.11}$$

Onde uma tolerância de 0,25 é adotada para separação dos elementos de contorno dos furos.

As condições de contorno do problema seguem um padrão para todas as análises. Caso contrário, a condição de contorno do problema é apresentada. Um diferencial de potencial é aplicado nas arestas esquerda e direita do EVR quadrado e a aresta superior e inferior estão isolados. A Figura 3.4 ilustra um exemplo com uma célula de fração de volume 10% e com 10 furos gerados aleatoriamente.



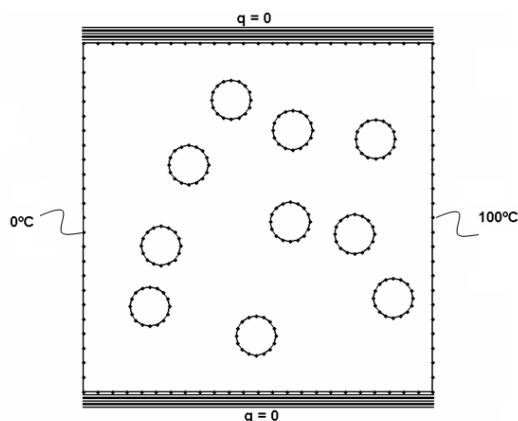


Figura 3.4: Geometria do EVR discretizada com 96 elementos no contorno externo e 16 elementos no contorno dos furos.

O valor do diferencial de potencial é de 100 unidades.

Após todos os dados de entrada necessários serem armazenados em um arquivo de entrada, os valores das variáveis  $u$  e  $q$  são calculados pelo MEC e de acordo com a metodologia apresentada no Capítulo 2. Para que a Equação (3.4) seja aplicada, o algoritmo deve calcular a integral do fluxo na aresta esquerda ou direita do EVR. Isto é realizado somando-se as contribuições de todos os elementos sobre a aresta  $L$ . No caso de elementos lineares, este procedimento resulta em:

$$k_{eff} = \frac{\sum_{i=1}^{24} \left[ \left( \frac{q_{i+1} + q_i}{2} \right) \cdot \frac{L}{n_e} \right]}{(T_H - T_L)} \quad (3.12)$$

onde  $n_e$  é o número de elementos sobre a aresta.

A Figura 3.5 ilustra um exemplo de saída gráfica do código desenvolvido onde alguns saltos nos valores do fluxo entre elementos podem ser observados. Para o MEC, o somatório destes valores apresenta o valor exato total do fluxo. Se a ferramenta utilizada neste estudo fosse o MEF, estes saltos representariam um problema, pois neste método os fluxos são as derivadas do potencial térmico. Isto resultaria em um resultado numérico do fluxo aproximado, possivelmente necessitando a utilização de elementos de uma ordem mais elevada ou malhas mais refinadas. Estas aproximações no MEF estão melhor discutidas em Beer G. & Watson J. O., 1992.

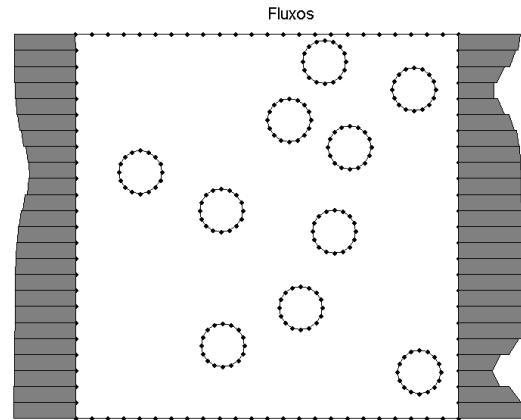


Figura 3.5: Exemplo de saída gráfica dos fluxos em cada elemento nas arestas do EVR.

A Equação (3.12) é aplicada para diversas frações de volume, fixando-se o número de vazios. Isto permite obter a influencia do número de furos sobre os parâmetros estatísticos do  $k_{eff}$ . Isto é, com a fração de volume  $\varepsilon$  e o número de furos  $N_f$ , a análise é realizada  $n$  vezes a fim de garantir a ergodicidade do  $k_{eff}$  obtido. Estes resultados são tratados posteriormente de forma estatística de acordo com a Equação (3.13), calculando-se a média ( $k_m$ ) das condutividades efetivas e o desvio padrão ( $\sigma$ ) destas amostras. A quantidade de amostras do potencial e do fluxo para cada configuração de furos e fração de volume é validada nos capítulos finais.

$$k_m = \sum_{i=1}^n \left( \frac{k_i}{n} \right) \quad \therefore \quad \sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(k_i - k_m)^2}{(n-1)}} \quad (3.13)$$

### 3.2. Comparação de um modelo do MEC com o MEF

Com o avanço constante das ferramentas computacionais, os métodos numéricos cada vez mais oferecem soluções para problemas mais complexos e em tempo satisfatório. Dentre os métodos numéricos mais conhecidos, pode-se citar, além do método dos elementos de contorno (MEC) empregado neste trabalho, o método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF).

O MDF é um método pouco utilizado comparado ao MEC e ao MEF. Sua idéia se baseia na aproximação de derivadas por diferenças finitas utilizando expansões locais para as variáveis, geralmente séries de Taylor truncadas das derivadas.

O MEF é o método numérico mais comumente utilizado, com uma grande quantidade de softwares comerciais disponíveis. Uma de suas principais características é a divisão do domínio em uma série de elementos de geometria simples com aspecto físico bem associado a uma determinada parte da estrutura real. Entre outras características desse método, pode-se citar a robustez, simplicidade de formulação e o fato de gerar matrizes de rigidez em banda, as quais, aliadas a técnicas de resolução especiais, reduzem muito o tempo de processamento.

No MEC, uma das características mais importantes é o fato de requerer apenas a discretização do contorno (superfície) e não do domínio (volume). Neste estudo, as duas principais vantagens quanto ao emprego deste método são:

- Quantidade inferior de nós e variáveis associadas ao problema e,
- Maior precisão destas variáveis, principalmente da variável do fluxo  $q$ , que é o foco deste estudo.

Uma comparação é ilustrada na Figura 1.1, apresentada no capítulo introdutório.

No trabalho de Carson et al, 2003, é possível verificar a dependência da malha em um problema de furos aleatórios no domínio (Figura 3.6) onde há um maior refino nos furos aumentando o número de graus de liberdade do problema. Utilizando o MEF em duas dimensões, este trabalho examina a influência da porosidade de materiais na condução térmica efetiva de materiais utilizando a equação de *Laplace*. Além da fração de volume, os furos apresentam raios variáveis.

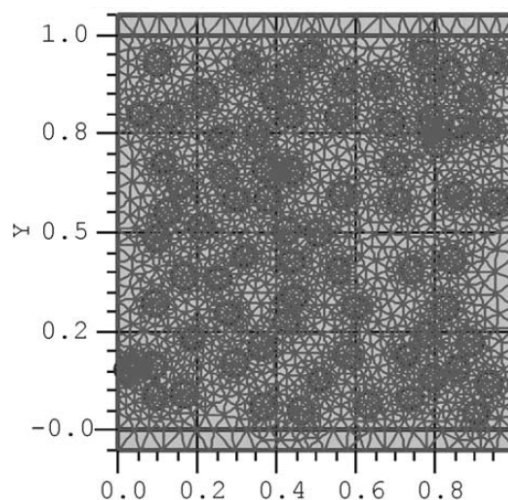


Figura 3.6: Malha de Carson et al, 2003, com 5355 elementos e 10818 nós.

Para validar o código desenvolvido neste estudo, algumas comparações são realizadas entre os resultados obtidos com o código desenvolvido e um programa comercial de elementos finitos.

Para tal, é considerado um modelo de placa quadrada com propriedades isotrópicas de aresta 20 mm e furo concêntrico de raio 4 mm. Esta placa é discretizada com elementos finitos totalizando uma divisão de 20 em cada aresta. O perímetro do furo é dividido em 16 unidades. O modelo de elementos de contorno para comparação e validação é discretizado com 20 elementos de contorno lineares por lado, totalizando 80 elementos no contorno da placa e 16 elementos no contorno do furo. As condições de contorno estão apresentadas de acordo com Figura 3.7.

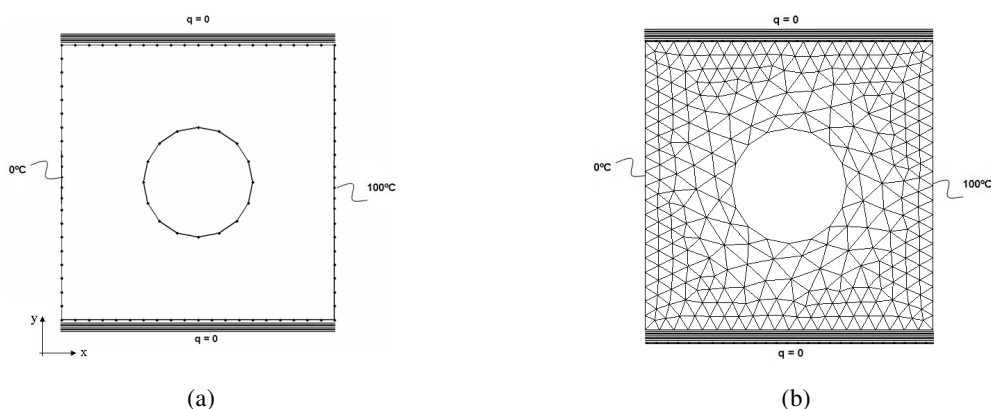


Figura 3.7: Modelos para comparação com um furo: (a) MEC e (b) MEF..

Como o código emprega elementos de contorno descontínuos, totalizando dois nós por elemento, a aresta é compreendida por 40 nós. Para efetuar uma comparação coerente do cálculo do fluxo na face esquerda e direita da placa, o modelo de elementos finitos também totaliza 40 nós nestas arestas. Assim é utilizado um elemento finito de placa com oito do software comercial *ANSYS* onde, em sua configuração triangular, este elemento tem seis nós e interpolação linear. O elemento está apresentado na Figura 3.8.

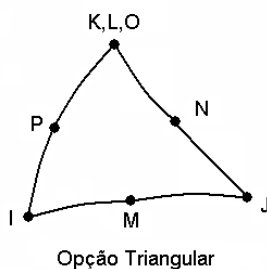


Figura 3.8: Elemento finito triangular de seis nós com interpolação linear.

O valor do fluxo em cada nó, para o MEC e MEF, é apresentado na Figura 3.9, onde se observa a concordância entre os resultados obtidos com o código desenvolvido.

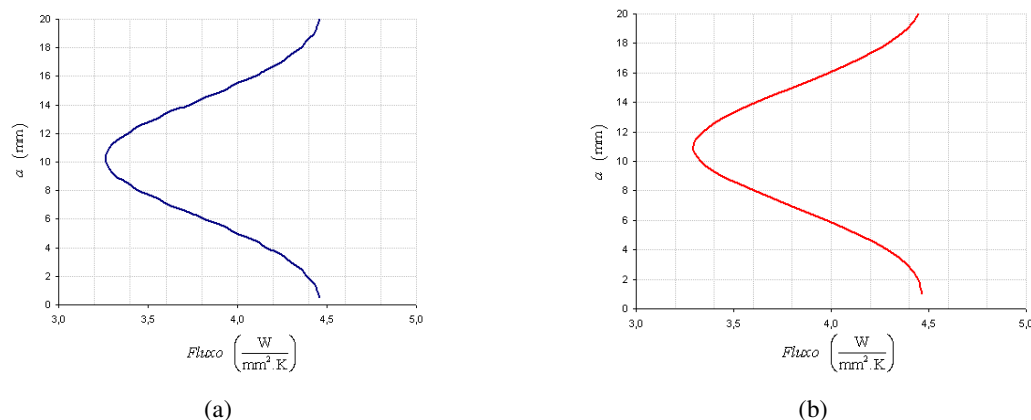


Figura 3.9: (a)Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo um furo no código desenvolvido). (b) Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo um furo em software comercial de MEF).

A mesma metodologia é aplicada para uma placa com dois furos periódicos. Esta validação é composta de uma placa quadrada de aresta 20 m e dois furos de raio 2 mm, centrados nas coordenadas (10, 6) e (10, 14). A discretização no contorno da placa é a mesma realizada na comparação anterior. As condições de contorno estão apresentadas na Figura 3.10.

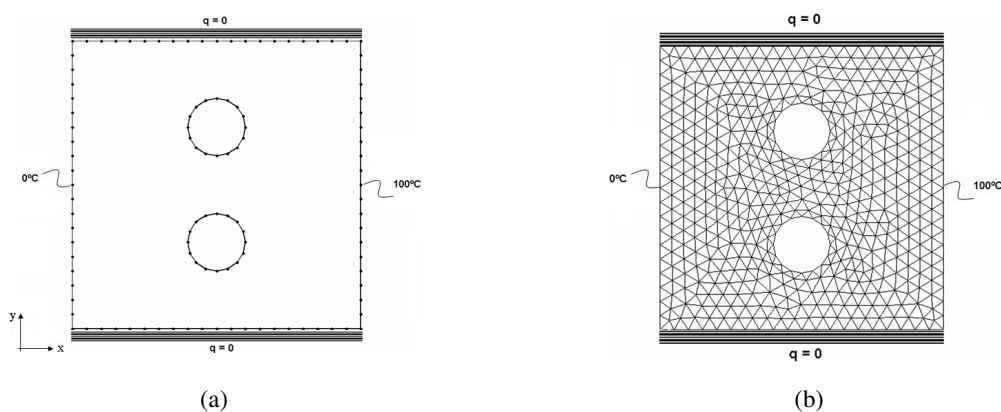


Figura 3.10: Modelos para comparação com dois furos: (a) MEC e (b) MEF.

O valor do fluxo em cada nó, para o MEC e MEF, é apresentado na Figura 3.11.

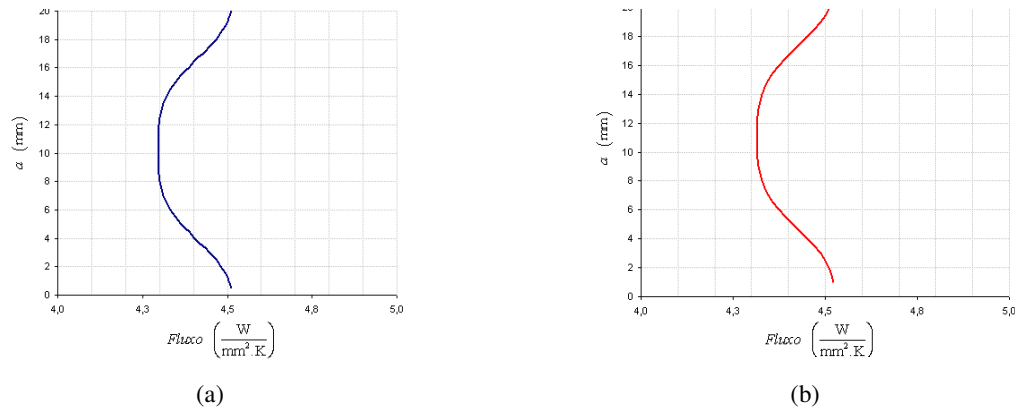


Figura 3.11: (a) Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo dois furos no código desenvolvido). (b) Valores dos fluxos em cada elemento da aresta (modelo dois furos em software comercial de MEF).

O fato do MEF utilizar derivadas das funções de interpolação para o cálculo do fluxo, diminui sensivelmente a qualidade dos resultados em relação a temperatura. Uma consequência disto é que não se garante, a priori, o balanço energético entre as arestas  $\overline{AB}$  e  $\overline{CD}$ . Então, algumas condições devem ser respeitadas para garantir que a malha de elementos finitos empregada seja suficientemente refinada. Uma proposta é encontrada em Annapragada et al 2007, onde a seguinte expressão é apresentada:

$$\Delta q = |q_{esq}| - |q_{dir}| < 0.0001 \frac{|q_{esq}| + |q_{dir}|}{2} \quad (3.14)$$

A precisão superior do MEC para as variáveis sobre o contorno satisfaz as condições da Equação (3.14), mesmo para malhas muito grosseiras. Com efeito, a Equação (3.14) não necessita ser verificada, já que o balanço energético dos fluxos é altamente satisfeito pelo MEC.

### 3.3. Verificação com modelos analíticos

Há uma grande quantidade de trabalhos científicos publicados na área de microestruturas e propriedades efetivas de materiais porosos em geral. Trabalhos como o de Carson J. K., et al, 2005, onde são aplicados modelos analíticos das médias efetivas. Neste trabalho os autores ressaltam que, embora existam diversos modelos analíticos para descrever as propriedades de materiais porosos, muitos deles são de aplicação específica e baseado em parâmetros empíricos. Sarwar M. K. & Majumdar P., 1995, realizam estudos para avaliar a condutividade térmica efetiva de material poroso de duas fases aplicado a camas de dissecação com material inerte,

onde vários modelos analíticos são avaliados. Zohdi T. I., 2003, apresenta uma literatura extensa sobre modelamento e design de materiais micro-heterogêneos aleatórios, onde afirma que modelos analíticos apresentam bons resultados somente para estruturas com fração de volume pequenas.

Para validar os resultados encontrados das propriedades efetivas, com frações de volume de 0% até 30%, são utilizados dois modelos analíticos para comparação [Zohdi T. I., 2002]:

$$k_{eff} = \nu_2 k_2 + (1 - \nu_2) k_1 \quad (3.15)$$

$$k_{eff} = k_1 \frac{2k_1 + k_2 - 2(k_1 - k_2)\nu_2}{2k_1 + k_2 + (k_1 - k_2)\nu_2} \quad (3.16)$$

A Equação (3.15) representa o modelo de *Voigt* e a Equação (3.16) o modelo de *Maxwell*.

### 3.4. Verificação da discretização dos elementos no furo

Para a modelagem de um furo, a discretização dos mesmos deve levar em conta alguns aspectos importantes. A primeira e mais importante está relacionada com a identificação do furo. As coordenadas das conectividades da malha exterior são formuladas no sentido horário. Já a conectividade da malha interior, representada neste problema pelos furos inseridos no domínio, deve ser criada no sentido anti-horário. Isto automaticamente representa furos e não outro domínio sobreposto [Brebbia C. A. & Dominguez J., 1992, pp. 61].

Outro aspecto importante diz respeito que os furos devem ser discretizados com uma quantidade de elementos que seja geometricamente fiel. Esta discretização não deve ser muito refinada, pois quanto maior o número de elementos no furo, maior é o tempo gasto em simulação computacional. Este é um aspecto particularmente importante em simulações contendo centenas ou mesmo milhares de vazios. A Figura 3.12 ilustra células de EVR onde furos são discretizados com 4, 8, 12, 16 e 20 elementos.

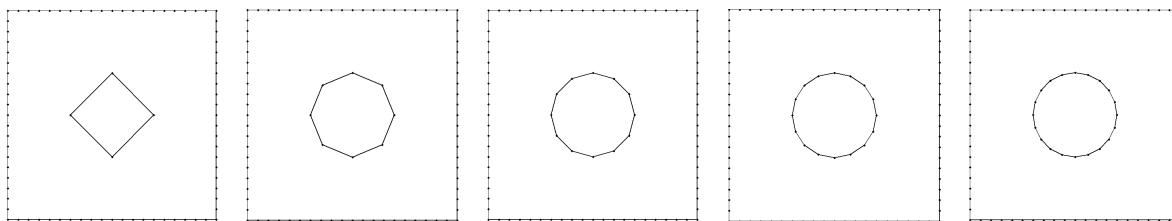


Figura 3.12: Discretização dos furos para 4, 8, 12, 16 e 20 elementos respectivamente.

Com o intuito de verificar a quantidade ideal de elementos para discretizar os furos, um teste com o seguinte modelo é realizado: modelo com 15% de fração de vazios, 10 furos gerados aleatoriamente na matriz e condições de contorno padrão deste estudo. Os resultados estão apresentados na Figura 3.13.

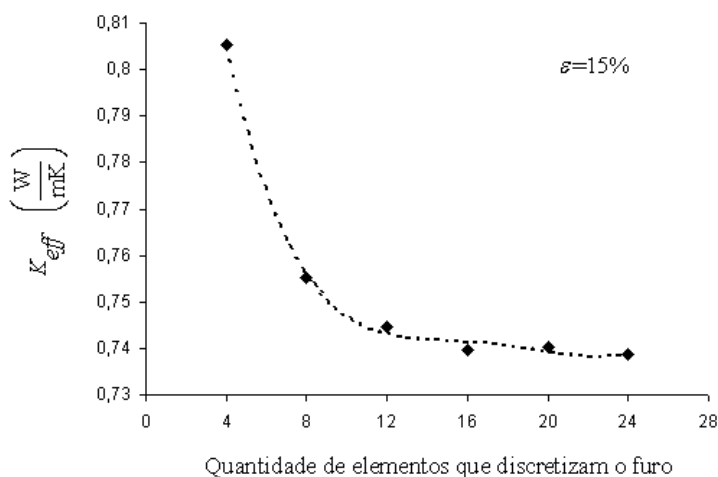


Figura 3.13: Variação do valor da condutividade térmica efetiva com relação ao número de elementos nos furos.

Analisando o resultado, a quantidade de elementos ideal e escolhida para discretizar os furos é de 16 elementos. Uma discretização mais refinada não implica em diferenças significativas nos resultados, além de se tornar o custo computacional mais alto.

### 3.5. Validação do número ideal de amostras

A metodologia de cálculo da condutividade efetiva empregada deve efetuar  $n$  cálculos com geração aleatória de furos na matriz e com uma quantidade distinta de furos. Isto é feito para frações de volume de 0% até 30%. No trabalho de Carson J. K., et al, 2003, o cálculo do  $k_{eff}$  é realizado apenas seis vezes e garante que a discrepância mínima entre o sexto e quinto valor deve



ser menor que 1%. Neste trabalho, a quantidade de amostras adotada em frações de volume distintas para cada número de furo é de 20 simulações.

Uma rápida verificação é feita com o código desenvolvido. Com uma fração de 15% de vazios e 10 furos no EVR são verificados o desvio padrão da média do  $k_{eff}$  para cada  $n$ . A Figura 3.14 apresenta os resultados obtidos, onde é possível verificar que a partir de 20 simulações, os valores do desvio tendem a não se alterar. A diferença do  $k_{eff}$  médio entre os dois últimos resultados (24 e 28 simulações) é menor que 0,1%. É importante verificar que com poucas amostras o código já apresenta resultados muito bons.

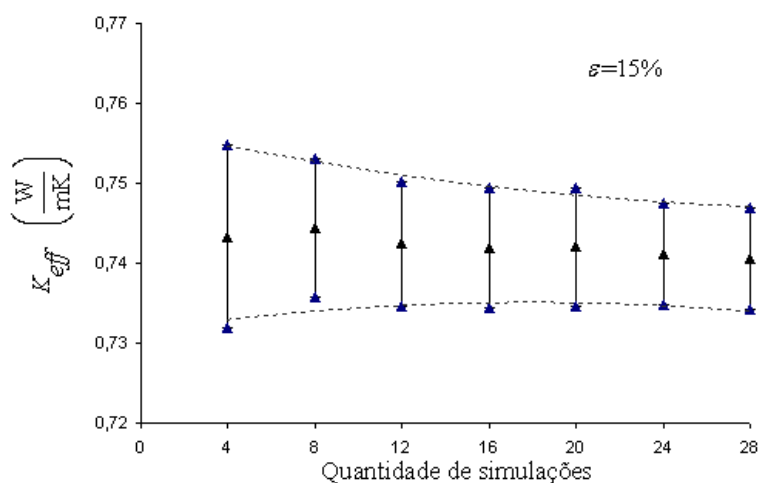


Figura 3.14: Verificação do desvio padrão para quantidades de simulações distintas em uma fração de 15% com 1º furos.

## 4. RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos no estudo de materiais micro-porosos com distribuição aleatória, tanto para materiais isotrópicos como para materiais ortotrópicos. Algumas aplicações interessantes em materiais ortotrópicos que contenham furos podem ser encontradas na literatura, como o trabalho de Meric, 1997. Este trabalho prevê os efeitos termoelétricos e eletromagnéticos acoplados de uma placa com furos, onde a metodologia do MEC é empregada satisfazendo a equação de Poisson. Em Gottfried L., 2002, um trabalho bem interessante é realizado, onde a refrigeração das lâminas da câmara de combustão de modernas turbinas a gás é investigada. Estas lâminas são revestidas com um filme de refrigeração por transpiração constituída de estruturas periódicas que são discretizadas como inclusões de um material com condutividade térmica inferior à da matriz. Embora seja uma análise envolvendo convecção, é importante destacar o trabalho extensivo realizado para a análise da propriedade térmica efetiva via MEF em apenas uma célula periódica. Outro campo de aplicação interessante de se avaliar é a área de cerâmicos, onde a propriedade de condução térmica pode ser manipulada de forma que o material apresente propriedades específicas para um determinado tipo de aplicação. Isto leva ao conceito de “projetar material” com propriedades físicas pré-estabelecidas.

A menos que indicado em contrário, todos os casos aqui ilustrados apresentam 24 elementos discretizados na aresta do EVR e 16 elementos formando os furos.

### 4.1. Verificação do EVR para o problema potencial

Esta seção apresenta a verificação da quantidade de furos na matriz onde a propriedade efetiva da célula não sofra alterações significativas. Entre outras palavras, a validação do tamanho do EVR para o problema de condução de calor.

Um primeiro teste para uma fração de volume de 10% é verificado, com o número de furos variando de 2 até 130. Os resultados estão apresentados na Figura 4.1 e na Tabela 4.1.

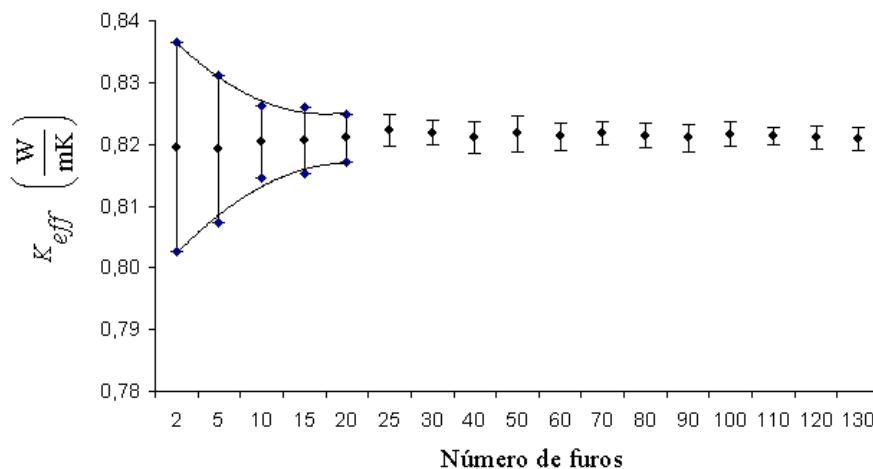


Figura 4.1: Resultados para 17 configurações de furos em uma fração de 10% de furos.

Tabela 4.1: Valores calculados para 20 simulações a 10% de fração de furos.

| Quantidade de furos | $k_{eff} \left( \frac{W}{m.K} \right)$ | Desvio padrão $\sigma$ |
|---------------------|--|------------------------|
| 2                   | 0,8186                                 | 0,01520                |
| 5                   | 0,8184                                 | 0,01071                |
| 10                  | 0,8193                                 | 0,00521                |
| 15                  | 0,8195                                 | 0,00479                |
| 20                  | 0,8199                                 | 0,00353                |
| 25                  | 0,8211                                 | 0,00229                |
| 30                  | 0,8207                                 | 0,00187                |
| 40                  | 0,8200                                 | 0,00224                |
| 50                  | 0,8205                                 | 0,00258                |
| 60                  | 0,8201                                 | 0,00203                |
| 70                  | 0,8206                                 | 0,00163                |
| 80                  | 0,8203                                 | 0,00181                |
| 90                  | 0,8199                                 | 0,00191                |
| 100                 | 0,8205                                 | 0,00188                |
| 110                 | 0,8201                                 | 0,00125                |
| 120                 | 0,8200                                 | 0,00171                |
| 130                 | 0,8198                                 | 0,00164                |

Analisando estes resultados é possível concluir que a faixa do EVR ideal está situada entre 25 e 30 furos. Uma linha de tendência é traçada nas cinco primeiras configurações de furos. A partir da configuração com 30 furos, as oscilações representam somente variações numéricas no terceiro dígito significativo do desvio padrão.

Para os modelos a seguir, o padrão de 25 furos é adotado para todos os EVR's.

## 4.2. Verificação com Modelos Periódicos Isotrópicos

Uma grande quantidade de estudos da literatura estuda micro-estruturas periódicas. Esta configuração representa a micro-geometria de padrão repetitivo com uma célula única do EVR. Alguns destes modelos são verificados para isotropia no presente estudo. Este tipo de aplicação é importante, pois existem muitos métodos matemáticos teóricos desenvolvidos na literatura que avaliam o comportamento de micro-estruturas periódicas. Uma boa revisão deste assunto é apresentada por Böhm H. J., 1998.

A Figura 4.2 ilustra 11 modelos que podem ser utilizados para testes em periodicidade.

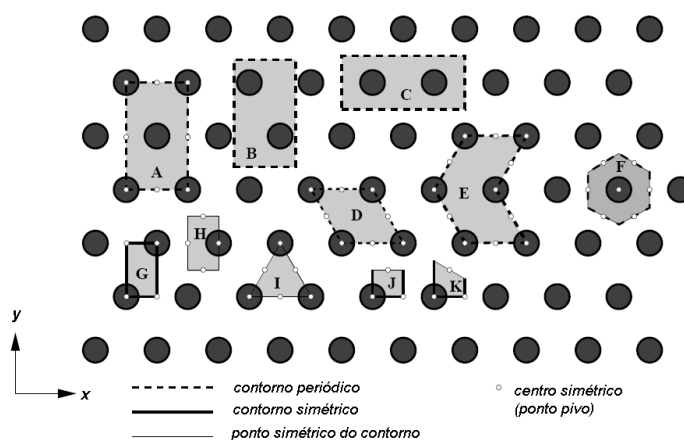


Figura 4.2: Disposição periódica hexagonal com 11 tipos de células [Böhm H. J., 1998].

Seguindo a metodologia apresentada em Böhm H. J., 1998, o tipo de disposição de células periódicas escolhidas para a avaliação do código deste estudo estão apresentadas na Figura 4.3.

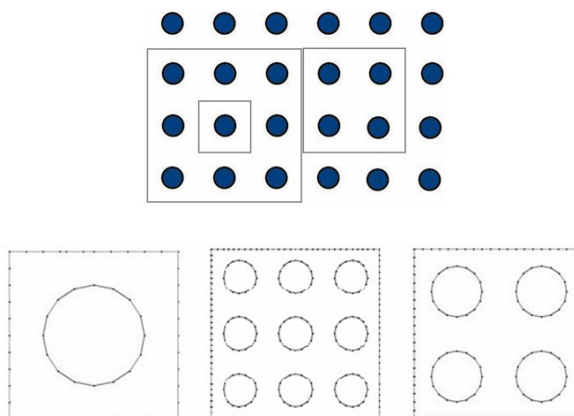
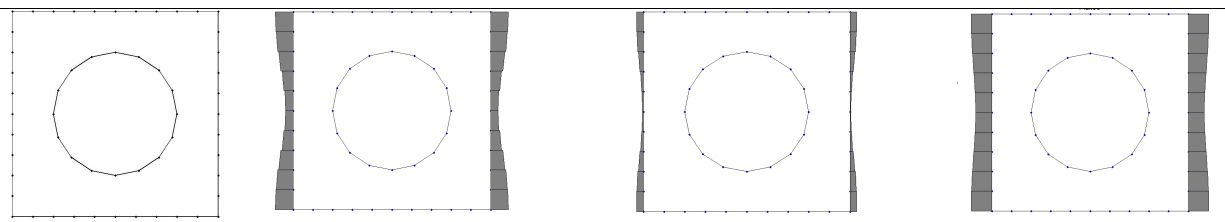
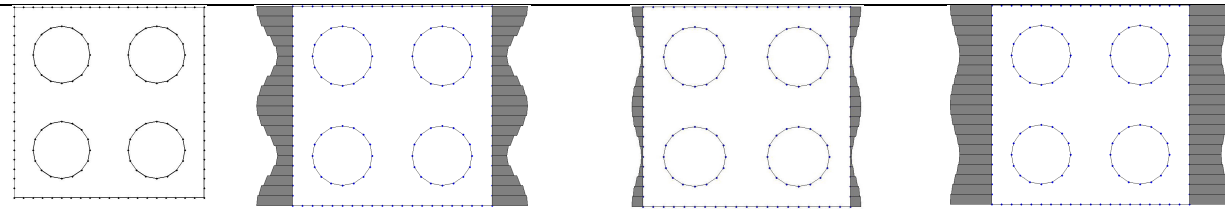
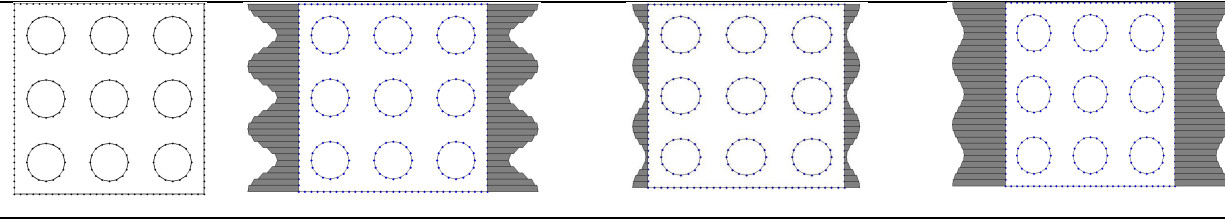


Figura 4.3: Verificação com três modelos periódicos com 1, 4 e 9 furos.

Cada célula quadrada apresenta uma aresta de unidade 10, discretizada por 10 elementos de contorno cada. O somatório dos fluxos em cada face e o  $k_{eff}$  estão apresentados abaixo na Tabela 4.2. O tensor condutividade está adimensionalizado conforme discutido no item 3.1. Por consequência, o valor final do  $k_{eff}$  e do fluxo também.

Tabela 4.2: Resultados obtidos com modelos periódicos de 1, 4 e 9 furos.

|  | ISOTRÓPICO  | ORTOTRÓPICO $k_{yy}$  | ORTOTRÓPICO $k_{xx}$  |
|--|---|---|---|
|  | $\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ | $\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ | $\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$ |
| $k_{eff}$  | 0.57  | 0.60  | 1.58  |
|    |   |   |   |
| $\int qdL$   | $q = 56.770$  | $q = 60.151$  | $q = 157.838$   |
|  |   |   |   |
| $\int qdL$   | $q = 56.739$  | $q = 60.128$  | $q = 157.702$   |
|  |   |   |   |
| $\int qdL$   | $q = 56.729$  | $q = 60.120$  | $q = 157.658$   |

A integral  $\int qdL$  representa o fluxo  $q$  ao longo da aresta  $L$ .

Observando os resultados da Tabela 4.2 é possível concluir que o valor final do  $k_{eff}$  é independente da quantidade de furos, tanto em aplicação isotrópica como ortotrópica. Isto

comprova que uma única célula de EVR, em disposição periódica, já produz estimativas bem precisas para o  $k_{eff}$ .

### 4.3. Resultados para Materiais Isotrópicos

Nesta seção é apresentado o resultado final para material isotrópico. A **Erro! Fonte de referência não encontrada.** ilustra a condutividade térmica efetiva para uma fração de volume de 30%. Conforme validado em itens anteriores, o valor do  $k_{eff}$  para um EVR válido é em 20 furos.

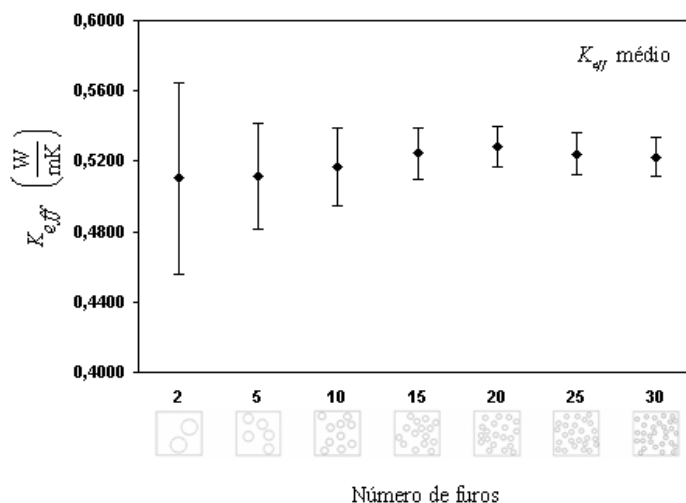


Figura 4.4: k com 30% de furos.

Os demais resultados para as frações de volume de 1% a 27,5% estão apresentados no Apêndice A.

A Figura 4.5 apresenta uma curva com todos os valores de  $k_{eff}$  obtidos, onde é possível verificar a tendência da propriedade efetiva frente ao nível de porosidade da matriz. Os resultados numéricos das simulações também estão apresentados no Apêndice A. A simulação total levou aproximadamente 12 horas para ser efetivada.

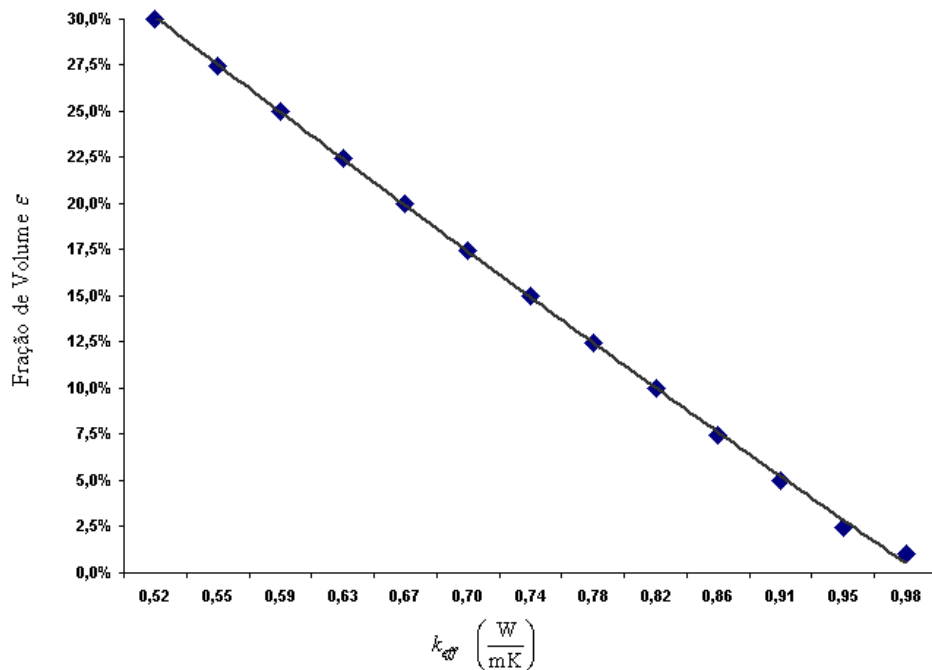


Figura 4.5: Curva do  $k_{eff}$  k efetivo para material isotrópico.

A curva da Figura 4.5 pode agora ser comparada com os modelos analíticos apresentados nas Equações (3.15) e (3.16). Esta comparação está ilustrada no gráfico da Figura 4.6.

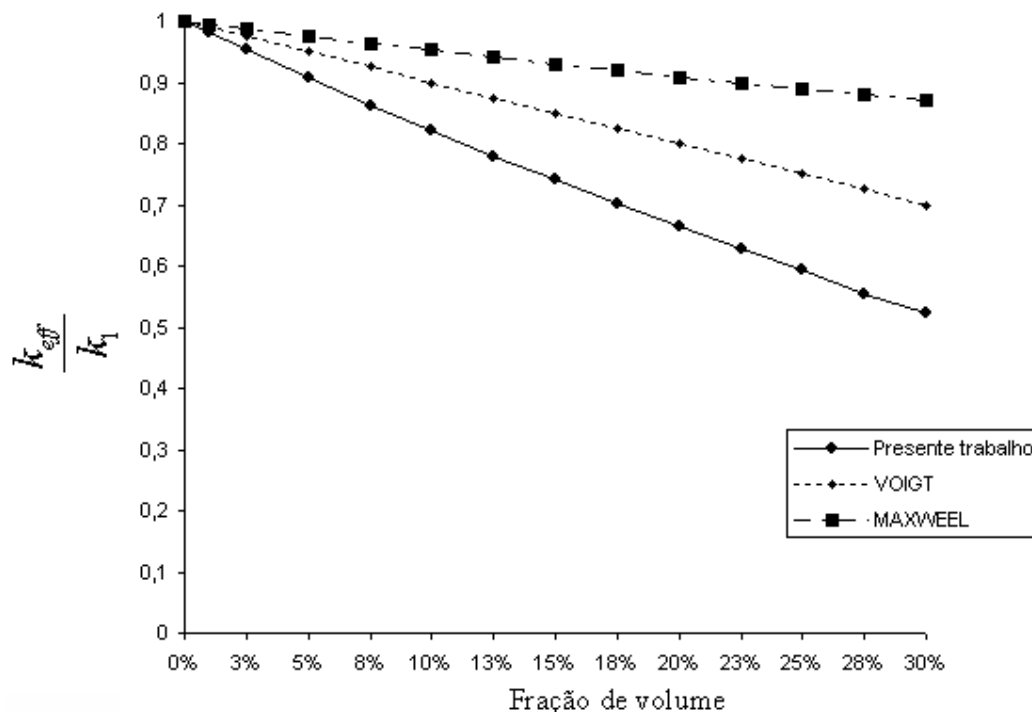


Figura 4.6: Gráfico comparativo da propriedade efetiva com dois modelos analíticos.

A Figura 4.6 sugere que os modelos analíticos realmente apresentam boas estimativas de  $k_{eff}$  somente para baixas frações de volume, conforme Zohdi, 2002, pp 49. Quanto maior a porosidade do material, maior é a discrepância da propriedade efetiva. Os valores numéricos das condutividades efetivas da Figura 4.6 estão listados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Valores da condutividade efetiva comparado com dois métodos analíticos: modelo de *Voigt* e modelo de *Maxwell*.

| % vazios | Presente estudo | Modelo de <i>Voigt</i> | Modelo de <i>Maxwell</i> |
|----------|-----------------|------------------------|--------------------------|
| 0%       | 1               | 1,00                   | 1,00                     |
| 1,0%     | 0,9812          | 0,9900                 | 0,9950                   |
| 2,5%     | 0,9525          | 0,9750                 | 0,9877                   |
| 5,0%     | 0,9068          | 0,9500                 | 0,9756                   |
| 7,5%     | 0,8627          | 0,9250                 | 0,9639                   |
| 10,0%    | 0,8211          | 0,9000                 | 0,9524                   |
| 12,5%    | 0,7793          | 0,8750                 | 0,9412                   |
| 15,0%    | 0,7419          | 0,8500                 | 0,9302                   |
| 17,5%    | 0,7027          | 0,8250                 | 0,9195                   |
| 20,0%    | 0,6652          | 0,8000                 | 0,9091                   |
| 22,5%    | 0,6263          | 0,7750                 | 0,8989                   |
| 25,0%    | 0,5934          | 0,7500                 | 0,8889                   |
| 27,5%    | 0,5548          | 0,7250                 | 0,8791                   |
| 30,0%    | 0,5242          | 0,7000                 | 0,8696                   |

#### 4.4. Resultados para Materiais Ortotrópicos

Seguindo a mesma metodologia de cálculo utilizada nos modelos isotrópicos, esta seção apresenta o resultado para material ortotrópico em uma fração de volume de 30% na Figura 4.7 e Figura 4.8. Os demais resultados estão apresentados no Apêndice B.



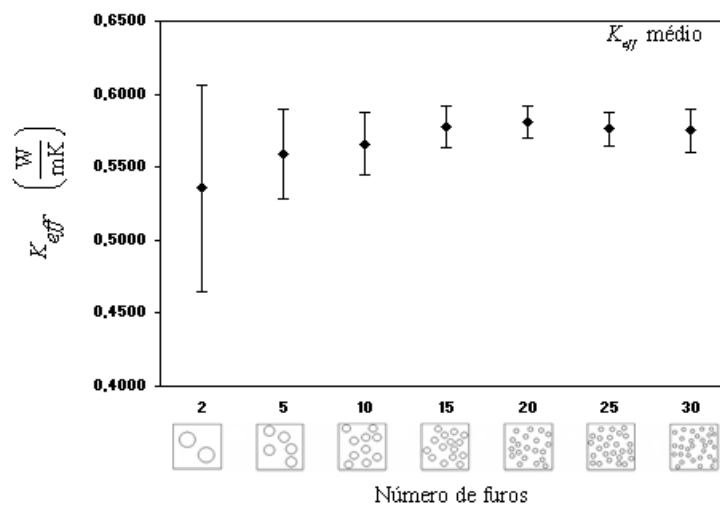


Figura 4.7:  $k_{yy}$  com 30% de furos.

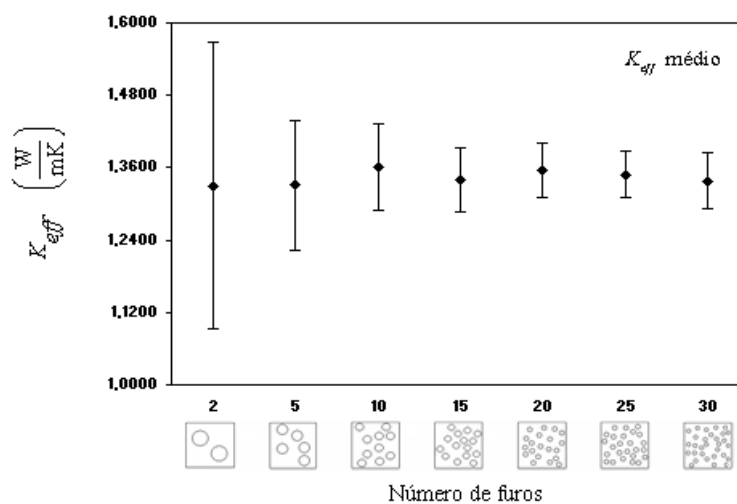


Figura 4.8:  $k_{xx}$  com 30% de furos.

A Figura 4.9 apresenta uma curva com todos os valores de  $k_{eff}$  obtidos para o modelo ortotrópicos.

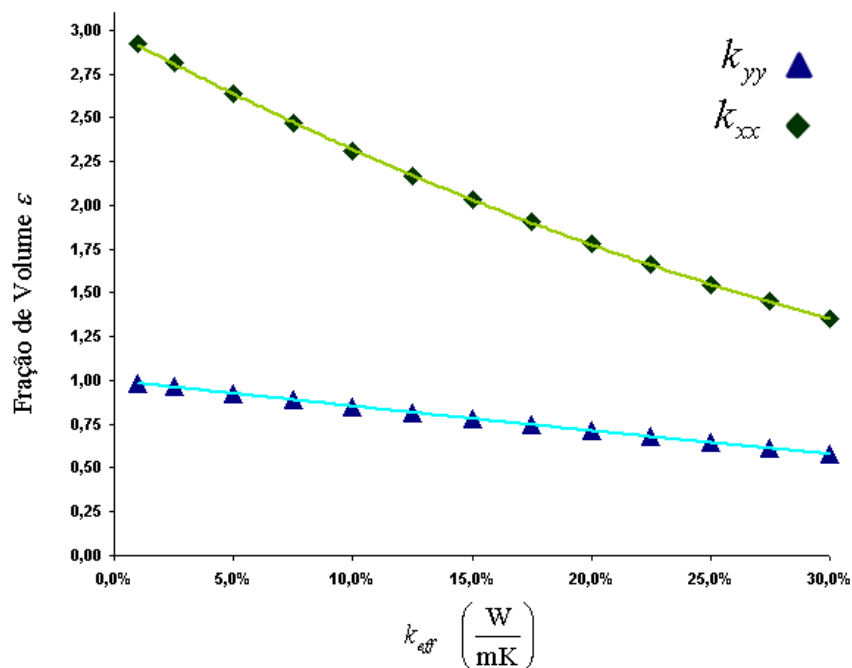


Figura 4.9: Curvas do  $k_{eff}$  nas direções  $xx$  e  $yy$ .

Um resumo dos valores encontrados é apresentado no Apêndice B.

As curvas da Figura 4.9 representam dois aspectos importantes. Quanto maior a porosidade do material, maior é a queda de  $k_{eff}$ . Isto é mais sensível no sentido onde a condutividade é mais elevada neste material. Também é possível analisar que quanto maior a fração de volume  $\varepsilon$ , maior é a homogeneização do material com propriedades ortotrópicas. Isto anula o efeito desta ortotropia, transformando-o em um material de características mais próximas do isotrópico.

## 5. CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou essencialmente uma metodologia numérica para estimação de condutividade térmica efetiva em materiais micro-porosos isotrópicos ou ortotrópicos. O MEC foi escolhido como ferramenta numérica para a solução das equações diferenciais do problema de condução de calor, mostrando-se eficiente em vários aspectos: na precisão dos resultados obtidos e na simplicidade da modelagem dos problemas, onde a discretização do domínio não foi necessária. Isto diminuiu significativamente a quantidade das variáveis envolvidas, resultando num baixo custo computacional das muitas análises realizadas e em resultados precisos para os fluxos de calor.

No que diz respeito aos problemas ortotrópicos, a transformação das coordenadas não implicaram em distorção da malha, fato que aconteceria se fosse empregado o MEF na solução das equações diferenciais.

A metodologia empregada neste estudo funcionou satisfatoriamente. Furos isolados podem facilmente serem estendidos para problemas com duas ou mais fases (multi-fásicos) em problemas aplicados a inclusões condutoras de calor.

Quanto aos resultados numéricos obtidos, o problema de transferência de calor mostrou-se muito menos sensível à quantidade de vazios na matriz quando comparado ao problema correlato ao de elasticidade [Buroni F. C. & Marczak R. J., 2008], mas isto deveria ser verificado em materiais multi-fase também. No tratamento estatístico dos resultados, o desvio padrão mostrou-se baixo já com poucas amostras, concluindo o bom comportamento de problemas de condução de calor em sólidos contendo micro-poros.

Os resultados encontrados sugerem que não há muita vantagem em utilizar materiais ortotrópicos com frações de volume apreciáveis, pois os vazios anulam o seu efeito, homogenizando as propriedades efetivas em ambas as direções.

### 5.1. Sugestões para continuidade do trabalho

As seguintes sugestões são indicadas para a continuidade deste trabalho:

- Estender o código para inclusões onde, ao invés de vazios dispersos na matriz, poderiam ser modelados materiais com condutividade térmica de menor ou maior valor;
- Utilizar furos ou inclusões com raios e formas variáveis, onde o código poderia ser aproximado a micro-estruturas com inclusões elípticas, por exemplo;
- Implementar o elemento de furo conforme sugerido por Buroni F. C. & Marczak R. J., 2008. Isso diminuiria ainda mais o custo computacional das análises, tornando a metodologia viável para EVR's com milhares de vazios ou inclusões. Esse desenvolvimento requer integração analítica de núcleos de elevada complexidade;
- Estender a metodologia para manipular imagens provindas de micrografia ou metalografia, com o intuito de gerar automaticamente os arquivos de dados destas micro-estruturas para posterior análise;
- Resolver o problema inverso ao estudado, de forma a obter os parâmetros de um material que forneça um desempenho pré-estabelecido. Este problema equivale a projetar o material desejado;
- Implementar elementos de contorno em três dimensões a fim de eliminar as limitações da análise bi-dimensional aqui realizada.

## APÊNDICE A

As ilustrações apresentam os resultados obtidos nas simulações de material isotrópico para frações de volume de 1% a 27,5%.

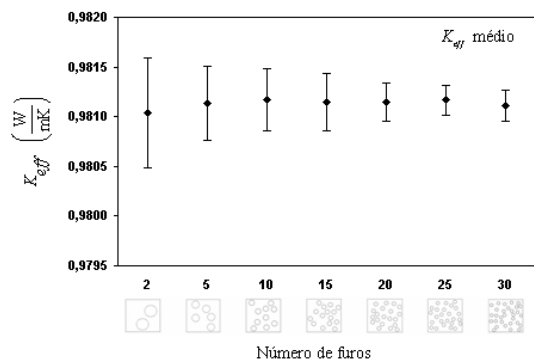


Figura A.1:  $k$  com 1% de furos.

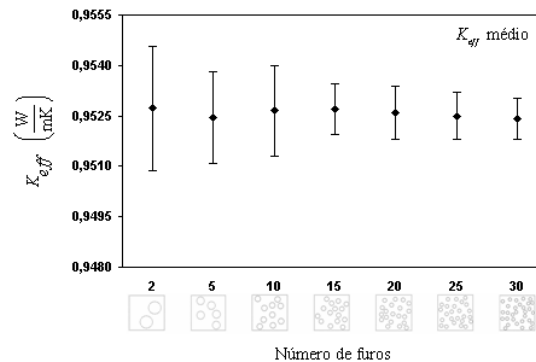


Figura A.2:  $k$  com 2.5% de furos.

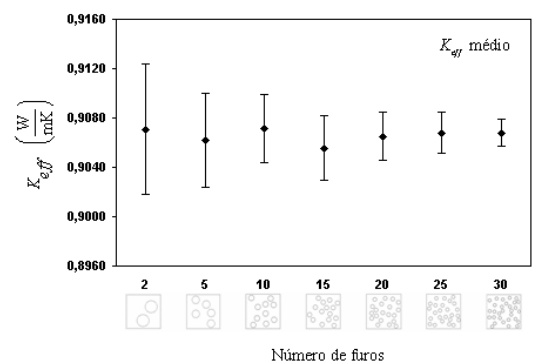


Figura A.3:  $k$  com 5% de furos.

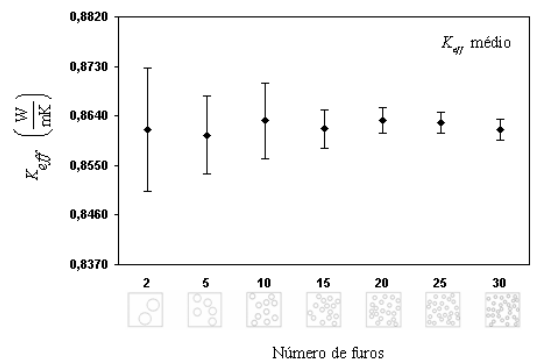


Figura A.4:  $k$  com 7.5% de furos.

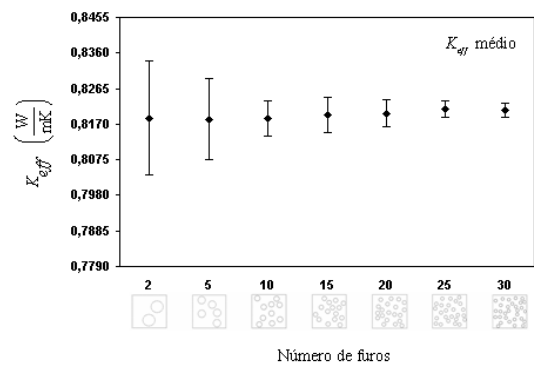


Figura A.5:  $k$  com 10% de furos.

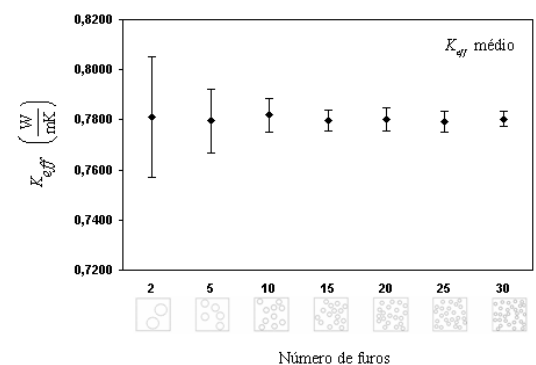


Figura A.6:  $k$  com 12.5% de furos.

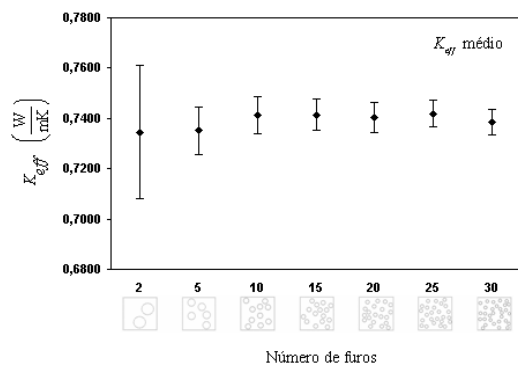
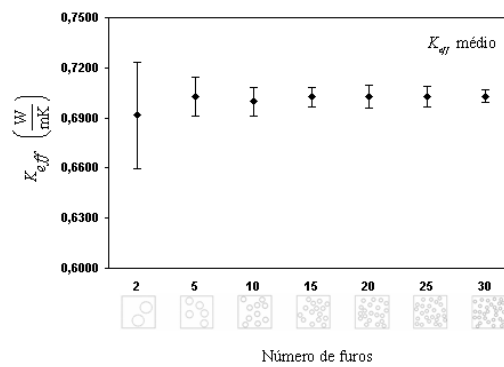
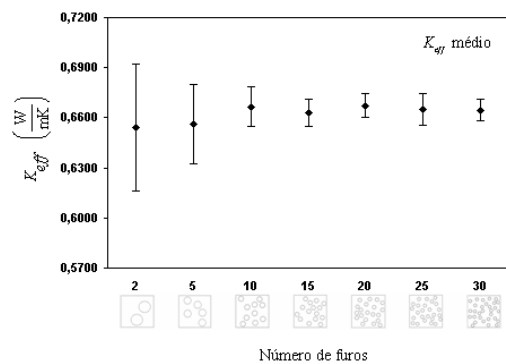
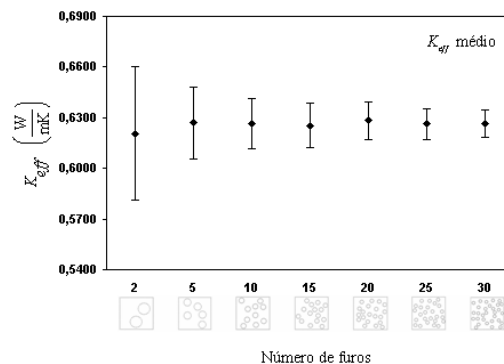
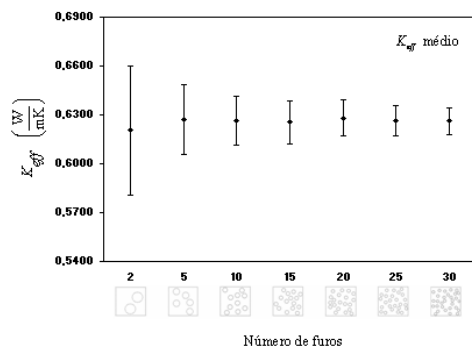
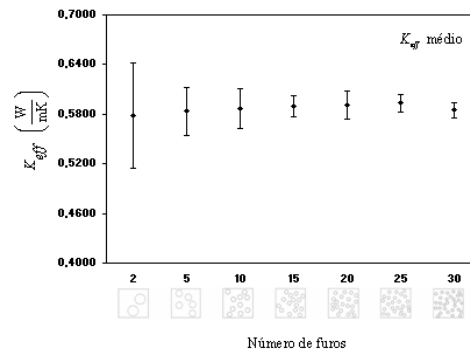
Figura A.7:  $k$  com 15% de furos.Figura A.8:  $k$  com 17.5% de furos.Figura A.9:  $k$  com 20% de furos.Figura A.10:  $k$  com 22.5% de furos.Figura A.11:  $k$  com 25% de furos.Figura A.12:  $k$  com 27.5% de furos.

Tabela A.1: Resultados das simulações para materiais isotrópicos.

| $N_f$ | Fração de furos 1% |          | Fração de furos 2.5% |          | Fração de furos 5% |          | Fração de furos 7.5% |          | Fração de furos 10% |          |
|-------|--------------------|----------|----------------------|----------|--------------------|----------|----------------------|----------|---------------------|----------|
|       | $k_m$              | $\sigma$ | $k_m$                | $\sigma$ | $k_m$              | $\sigma$ | $k_m$                | $\sigma$ | $k_m$               | $\sigma$ |
| 2     | 0,98104            | 0,00055  | 0,9527               | 0,0018   | 0,9071             | 0,0053   | 0,8616               | 0,0112   | 0,8186              | 0,0152   |
| 5     | 0,98114            | 0,00038  | 0,9524               | 0,0014   | 0,9062             | 0,0038   | 0,8605               | 0,0071   | 0,8184              | 0,0107   |
| 10    | 0,98117            | 0,00032  | 0,9527               | 0,0013   | 0,9072             | 0,0028   | 0,8631               | 0,0069   | 0,8186              | 0,0046   |
| 15    | 0,98115            | 0,00029  | 0,9527               | 0,0007   | 0,9056             | 0,0026   | 0,8616               | 0,0035   | 0,8195              | 0,0048   |
| 20    | 0,98115            | 0,00019  | 0,9526               | 0,0008   | 0,9065             | 0,0020   | 0,8632               | 0,0024   | 0,8199              | 0,0035   |
| 25    | 0,98117            | 0,00015  | 0,9525               | 0,0007   | 0,9068             | 0,0017   | 0,8627               | 0,0020   | 0,8211              | 0,0023   |
| 30    | 0,98111            | 0,00015  | 0,9524               | 0,0006   | 0,9068             | 0,0011   | 0,8615               | 0,0019   | 0,8207              | 0,0019   |

| $N_f$ | Fração de furos 12.5% |          | Fração de furos 15% |          | Fração de furos 17.5% |          | Fração de furos 20% |          | Fração de furos 22.5% |          |
|-------|-----------------------|----------|---------------------|----------|-----------------------|----------|---------------------|----------|-----------------------|----------|
|       | $k_m$                 | $\sigma$ | $k_m$               | $\sigma$ | $k_m$                 | $\sigma$ | $k_m$               | $\sigma$ | $k_m$                 | $\sigma$ |
| 2     | 0,7812                | 0,02413  | 0,7345              | 0,0264   | 0,6915                | 0,0317   | 0,6542              | 0,0380   | 0,6204                | 0,0395   |
| 5     | 0,7796                | 0,01284  | 0,7351              | 0,0094   | 0,7028                | 0,0119   | 0,6560              | 0,0239   | 0,6269                | 0,0215   |
| 10    | 0,7820                | 0,00676  | 0,7412              | 0,0073   | 0,6998                | 0,0086   | 0,6666              | 0,0120   | 0,6264                | 0,0150   |
| 15    | 0,7796                | 0,00405  | 0,7414              | 0,0062   | 0,7026                | 0,0059   | 0,6630              | 0,0082   | 0,6254                | 0,0134   |
| 20    | 0,7802                | 0,00467  | 0,7403              | 0,0060   | 0,7027                | 0,0067   | 0,6672              | 0,0071   | 0,6282                | 0,0111   |
| 25    | 0,7793                | 0,00409  | 0,7419              | 0,0055   | 0,7027                | 0,0061   | 0,6652              | 0,0094   | 0,6263                | 0,0093   |
| 30    | 0,7804                | 0,00307  | 0,7386              | 0,0050   | 0,7028                | 0,0038   | 0,6647              | 0,0062   | 0,6262                | 0,0081   |

| $N_f$ | Fração de furos 25% |          | Fração de furos 27.5% |          | Fração de furos 30% |          |
|-------|---------------------|----------|-----------------------|----------|---------------------|----------|
|       | $k_m$               | $\sigma$ | $k_m$                 | $\sigma$ | $k_m$               | $\sigma$ |
| 2     | 0,5783              | 0,06374  | 0,5508                | 0,05505  | 0,5102              | 0,05405  |
| 5     | 0,5833              | 0,02953  | 0,5583                | 0,03239  | 0,5117              | 0,03012  |
| 10    | 0,5874              | 0,02402  | 0,5623                | 0,01782  | 0,5165              | 0,02216  |
| 15    | 0,5896              | 0,01264  | 0,5579                | 0,01009  | 0,5245              | 0,01475  |
| 20    | 0,5912              | 0,01738  | 0,5585                | 0,01234  | 0,5282              | 0,01149  |
| 25    | 0,5934              | 0,01066  | 0,5548                | 0,00980  | 0,5242              | 0,01176  |
| 30    | 0,5850              | 0,00899  | 0,5568                | 0,00880  | 0,5223              | 0,01098  |

## APÊNDICE B

As ilustrações apresentam os resultados obtidos nas simulações de material ortotrópico para frações de volume de 1% a 27,5%.

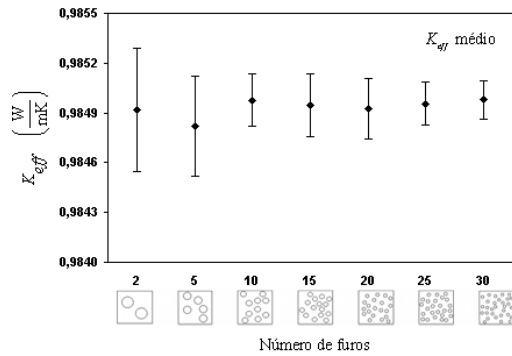


Figura B.1:  $k_{yy}$  com 1% de furos.

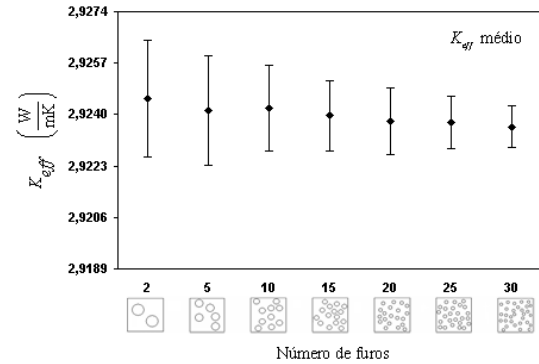


Figura B.2:  $k_{xx}$  com 1% de furos.

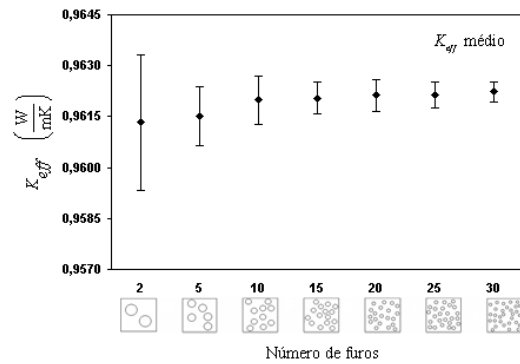


Figura B.3:  $k_{yy}$  com 2,5% de furos.

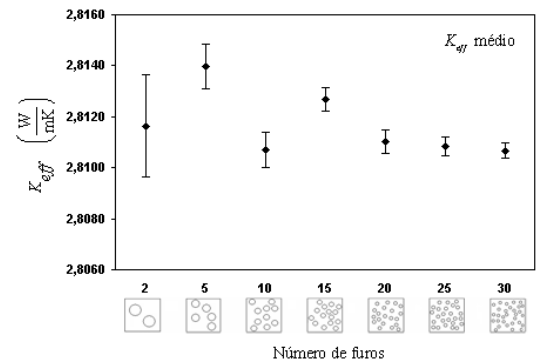


Figura B.4:  $k_{xx}$  com 2,5% de furos.

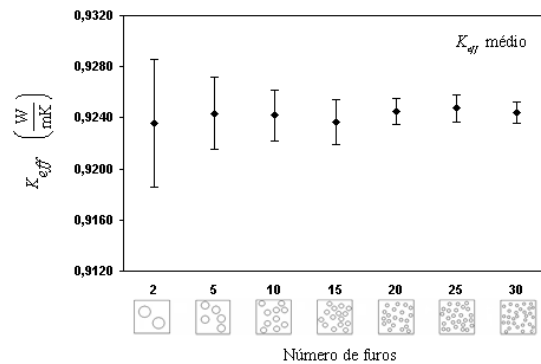


Figura B.5:  $k_{yy}$  com 5% de furos.

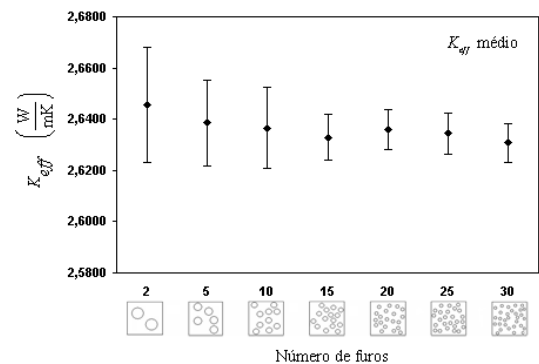
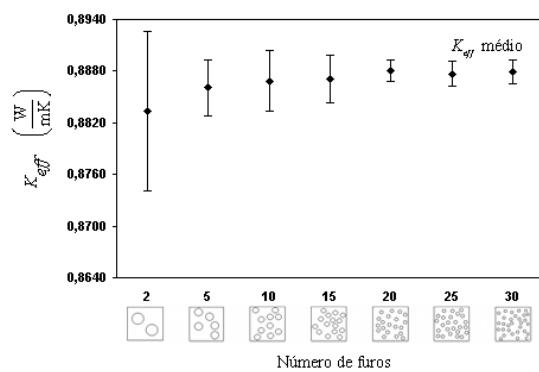
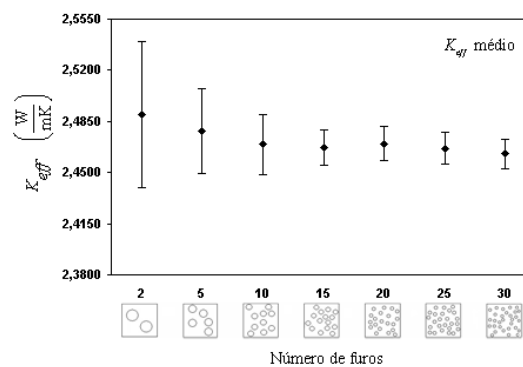
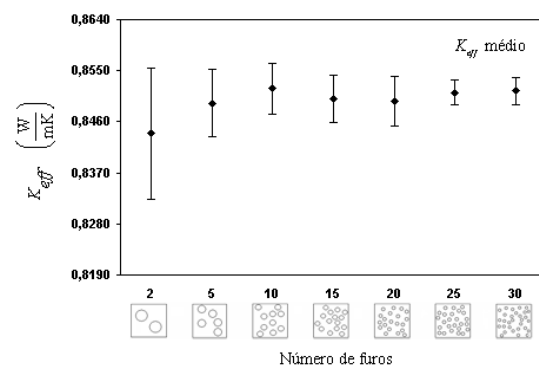
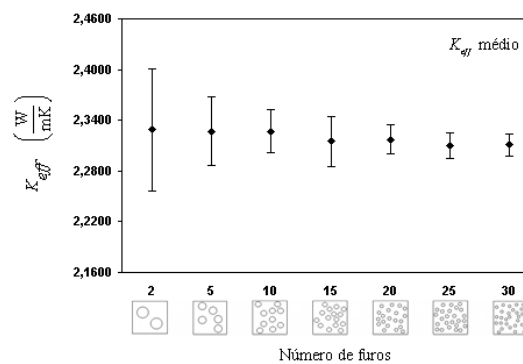
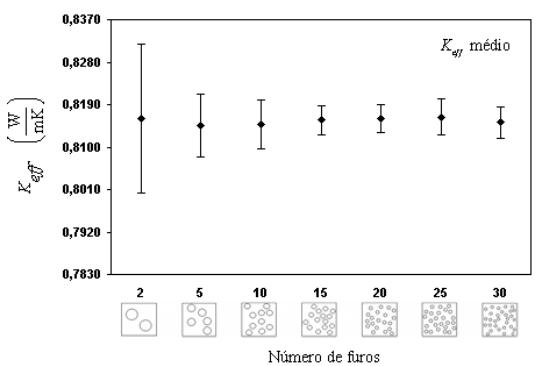
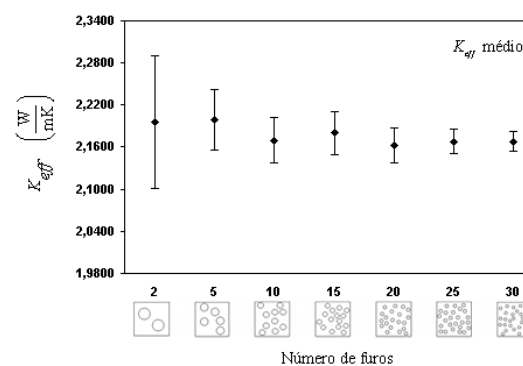
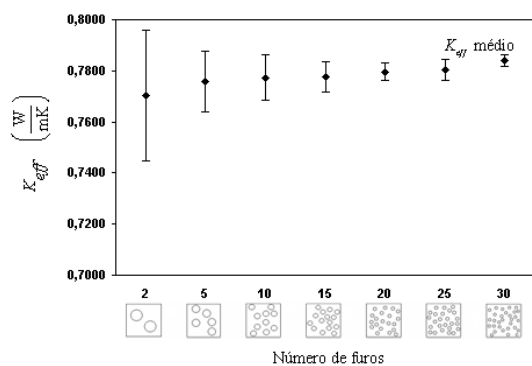
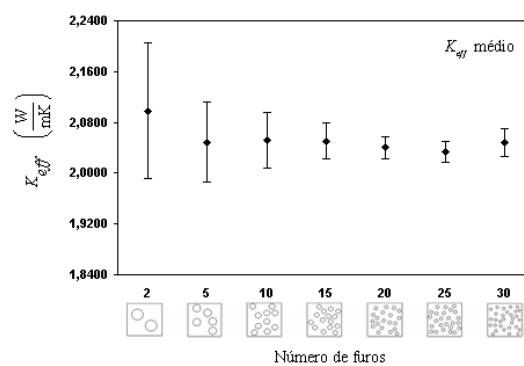
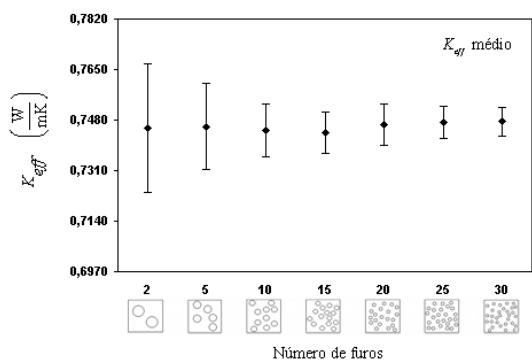
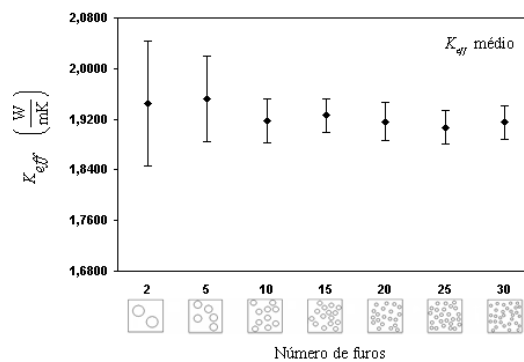
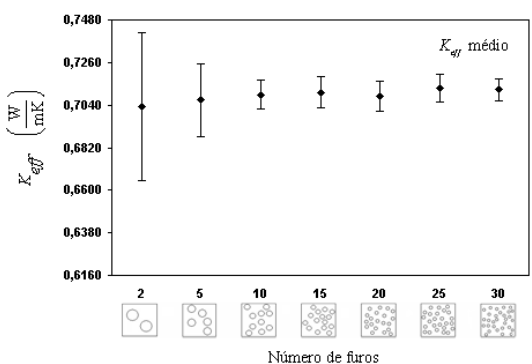
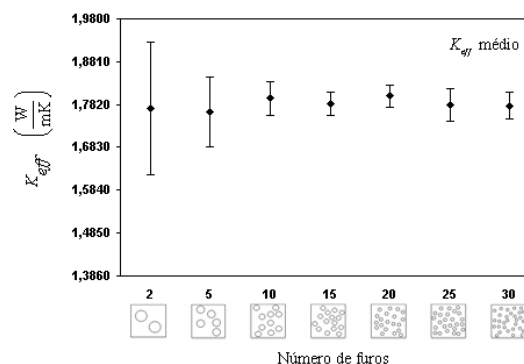


Figura B.6:  $k_{xx}$  com 5% de furos.



Figura B.7:  $k_{yy}$  com 7.5% de furos.Figura B.8:  $k_{xx}$  com 7.5% de furos.Figura B.9:  $k_{yy}$  com 10% de furos.Figura B.10:  $k_{xx}$  com 10% de furos.Figura B.11:  $k_{yy}$  com 12.5% de furos.Figura B.12:  $k_{xx}$  com 12.5% de furos.

Figura B.13:  $k_{yy}$  com 15% de furos.Figura B.14:  $k_{xx}$  com 15% de furos.Figura B.15:  $k_{yy}$  com 17.5% de furos.Figura B.16:  $k_{xx}$  com 17.5% de furos.Figura B.17:  $k_{yy}$  com 20% de furos.Figura B.18:  $k_{xx}$  com 20% de furos.

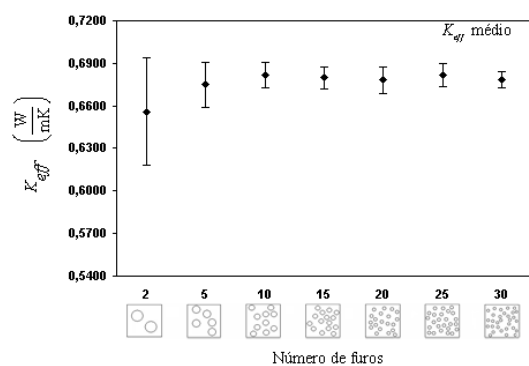
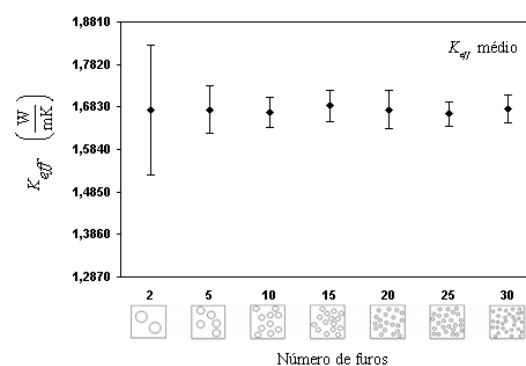
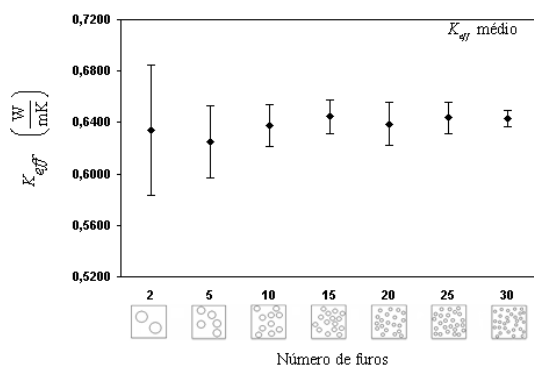
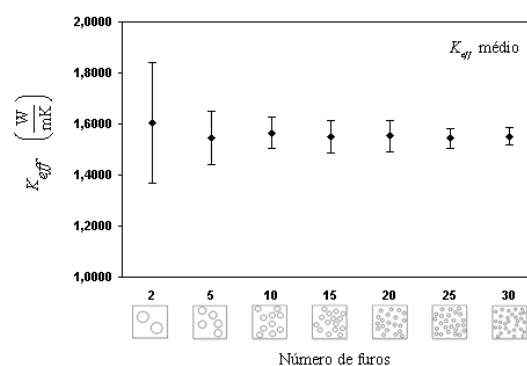
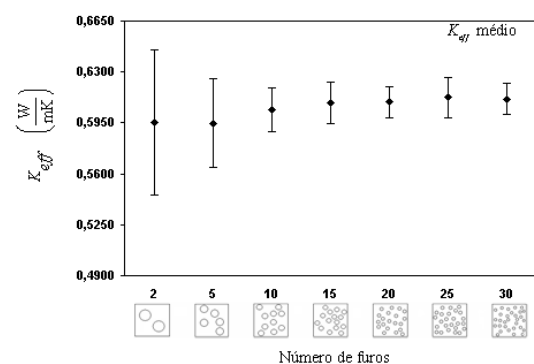
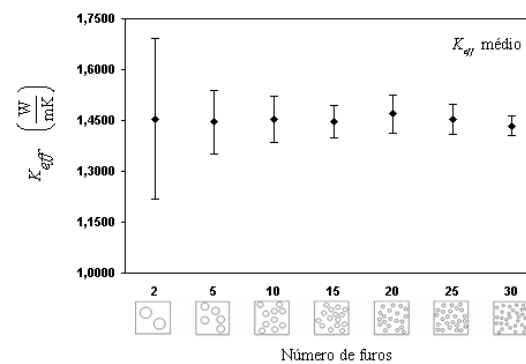
Figura B.19:  $k_{yy}$  com 22.5% de furos.Figura B.20:  $k_{xx}$  com 22.5% de furos.Figura B.21:  $k_{yy}$  com 25% de furos.Figura B.22:  $k_{xx}$  com 25% de furos.Figura B.23:  $k_{yy}$  com 27.5% de furos.Figura B.24:  $k_{xx}$  com 27.5% de furos.

Tabela B.1: Dados obtidos para o  $k_{eff}$  nas direções  $xx$  e  $yy$  do modelo ortotrópico

|       | Fração de furos 1%    |          | Fração de furos 2.5% |          | Fração de furos 5%    |        | Fração de furos 7.5% |          | Fração de furos 10%   |          |
|-------|-----------------------|----------|----------------------|----------|-----------------------|--------|----------------------|----------|-----------------------|----------|
|       | $k_{yy}$              |          | $k_{yy}$             |          | $k_{yy}$              |        | $k_{yy}$             |          | $k_{yy}$              |          |
| $N_f$ | $k_m$                 | $\sigma$ | $k_m$                | $\sigma$ | $k_m$                 | $k_m$  | $\sigma$             | $k_m$    | $\sigma$              | $k_m$    |
| 2     | 0,9849                | 0,00037  | 0,9613               | 0,0020   | 0,9235                | 0,0050 | 0,8833               | 0,0093   | 0,8439                | 0,0116   |
| 5     | 0,9848                | 0,00030  | 0,9615               | 0,0009   | 0,9244                | 0,0029 | 0,8861               | 0,0032   | 0,8493                | 0,0059   |
| 10    | 0,9850                | 0,00016  | 0,9620               | 0,0007   | 0,9242                | 0,0020 | 0,8869               | 0,0035   | 0,8519                | 0,0044   |
| 15    | 0,9849                | 0,00019  | 0,9620               | 0,0005   | 0,9237                | 0,0018 | 0,8871               | 0,0027   | 0,8501                | 0,0041   |
| 20    | 0,9849                | 0,00018  | 0,9621               | 0,0005   | 0,9245                | 0,0010 | 0,8881               | 0,0012   | 0,8496                | 0,0044   |
| 25    | 0,9850                | 0,00013  | 0,9621               | 0,0004   | 0,9248                | 0,0011 | 0,8877               | 0,0014   | 0,8512                | 0,0022   |
| 30    | 0,9850                | 0,00012  | 0,9622               | 0,0003   | 0,9244                | 0,0008 | 0,8879               | 0,0014   | 0,8514                | 0,0024   |
|       | $k_{xx}$              |          | $k_{xx}$             |          | $k_{xx}$              |        | $k_{xx}$             |          | $k_{xx}$              |          |
|       | $N_f$                 | $k_m$    | $\sigma$             | $k_m$    | $\sigma$              | $k_m$  | $k_m$                | $\sigma$ | $k_m$                 | $\sigma$ |
| 2     | 2,9245                | 0,0019   | 2,8116               | 0,0101   | 2,6456                | 0,0226 | 2,4898               | 0,0501   | 2,3290                | 0,0721   |
| 5     | 2,9241                | 0,0018   | 2,8140               | 0,0091   | 2,6385                | 0,0169 | 2,4781               | 0,0291   | 2,3271                | 0,0401   |
| 10    | 2,9242                | 0,0014   | 2,8107               | 0,0052   | 2,6366                | 0,0158 | 2,4692               | 0,0205   | 2,3269                | 0,0254   |
| 15    | 2,9240                | 0,0012   | 2,8127               | 0,0045   | 2,6329                | 0,0090 | 2,4673               | 0,0123   | 2,3150                | 0,0297   |
| 20    | 2,9238                | 0,0011   | 2,8110               | 0,0030   | 2,6361                | 0,0077 | 2,4699               | 0,0117   | 2,3171                | 0,0171   |
| 25    | 2,9238                | 0,0009   | 2,8108               | 0,0037   | 2,6345                | 0,0080 | 2,4664               | 0,0110   | 2,3104                | 0,0152   |
| 30    | 2,9236                | 0,0007   | 2,8107               | 0,0026   | 2,6307                | 0,0077 | 2,4630               | 0,0101   | 2,3110                | 0,0133   |
|       | Fração de furos 12.5% |          | Fração de furos 15%  |          | Fração de furos 17.5% |        | Fração de furos 20%  |          | Fração de furos 22.5% |          |
|       | $k_{yy}$              |          | $k_{yy}$             |          | $k_{yy}$              |        | $k_{yy}$             |          | $k_{yy}$              |          |
| $N_f$ | $k_m$                 | $\sigma$ | $k_m$                | $\sigma$ | $k_m$                 | $k_m$  | $\sigma$             | $k_m$    | $\sigma$              | $k_m$    |
| 2     | 0,81595               | 0,01581  | 0,7704               | 0,0255   | 0,7451                | 0,0216 | 0,7034               | 0,0382   | 0,6560                | 0,0380   |
| 5     | 0,81451               | 0,00661  | 0,7758               | 0,0117   | 0,7459                | 0,0146 | 0,7067               | 0,0188   | 0,6748                | 0,0160   |
| 10    | 0,81488               | 0,00518  | 0,7773               | 0,0088   | 0,7445                | 0,0088 | 0,7092               | 0,0075   | 0,6813                | 0,0090   |
| 15    | 0,81570               | 0,00307  | 0,7775               | 0,0059   | 0,7438                | 0,0070 | 0,7106               | 0,0079   | 0,6798                | 0,0077   |
| 20    | 0,81610               | 0,00300  | 0,7796               | 0,0036   | 0,7464                | 0,0071 | 0,7086               | 0,0077   | 0,6782                | 0,0095   |
| 25    | 0,81631               | 0,00384  | 0,7802               | 0,0041   | 0,7472                | 0,0055 | 0,7129               | 0,0071   | 0,6815                | 0,0082   |
| 30    | 0,81519               | 0,00322  | 0,7840               | 0,0023   | 0,7475                | 0,0048 | 0,7119               | 0,0056   | 0,6787                | 0,0057   |
|       | $k_{xx}$              |          | $k_{xx}$             |          | $k_{xx}$              |        | $k_{xx}$             |          | $k_{xx}$              |          |
|       | $N_f$                 | $k_m$    | $\sigma$             | $k_m$    | $\sigma$              | $k_m$  | $k_m$                | $\sigma$ | $k_m$                 | $\sigma$ |
| 2     | 2,1953                | 0,0943   | 2,0984               | 0,1065   | 1,9449                | 0,0978 | 1,7729               | 0,1543   | 1,6746                | 0,1512   |
| 5     | 2,1988                | 0,0435   | 2,0491               | 0,0623   | 1,9522                | 0,0670 | 1,7644               | 0,0800   | 1,6762                | 0,0552   |
| 10    | 2,1696                | 0,0325   | 2,0519               | 0,0447   | 1,9173                | 0,0350 | 1,7963               | 0,0384   | 1,6717                | 0,0350   |
| 15    | 2,1804                | 0,0310   | 2,0504               | 0,0284   | 1,9260                | 0,0270 | 1,7848               | 0,0266   | 1,6862                | 0,0366   |
| 20    | 2,1621                | 0,0252   | 2,0402               | 0,0180   | 1,9159                | 0,0304 | 1,8013               | 0,0264   | 1,6767                | 0,0443   |
| 25    | 2,1682                | 0,0178   | 2,0337               | 0,0158   | 1,9072                | 0,0270 | 1,7816               | 0,0379   | 1,6667                | 0,0281   |
| 30    | 2,1683                | 0,0146   | 2,0485               | 0,0217   | 1,9150                | 0,0264 | 1,7797               | 0,0301   | 1,6785                | 0,0311   |

Tabela B.1: Continuação da Tabela B.1- Dados obtidos para o  $k_{eff}$  nas direções  $xx$  e  $yy$  do modelo ortotrópico.

|       | Fração de furos 25% |          | Fração de furos 27.5% |        | Fração de furos 30% |        |
|-------|---------------------|----------|-----------------------|--------|---------------------|--------|
|       | $k_{yy}$            |          | $k_{yy}$              |        | $k_{yy}$            |        |
| $N_f$ | $k_m$               | $\sigma$ | $k_m$                 | $k_m$  | $\sigma$            | $k_m$  |
| 2     | 0,6343              | 0,0508   | 0,5952                | 0,0498 | 0,5356              | 0,0710 |
| 5     | 0,6248              | 0,0278   | 0,5949                | 0,0302 | 0,5587              | 0,0308 |
| 10    | 0,6377              | 0,0165   | 0,6043                | 0,0151 | 0,5660              | 0,0214 |
| 15    | 0,6448              | 0,0131   | 0,6089                | 0,0144 | 0,5779              | 0,0142 |
| 20    | 0,6388              | 0,0165   | 0,6093                | 0,0106 | 0,5807              | 0,0109 |
| 25    | 0,6436              | 0,0122   | 0,6126                | 0,0139 | 0,5762              | 0,0114 |
| 30    | 0,6433              | 0,0063   | 0,6115                | 0,0108 | 0,5753              | 0,0149 |
|       | $k_{xx}$            |          | $k_{xx}$              |        | $k_{xx}$            |        |
| $N_f$ | $k_m$               | $\sigma$ | $k_m$                 | $k_m$  | $\sigma$            | $k_m$  |
| 2     | 1,604               | 0,2364   | 1,455                 | 0,2382 | 1,330               | 0,2382 |
| 5     | 1,5455              | 0,1056   | 1,4450                | 0,0928 | 1,3309              | 0,1077 |
| 10    | 1,5647              | 0,0609   | 1,4537                | 0,0676 | 1,3614              | 0,0715 |
| 15    | 1,5497              | 0,0620   | 1,4470                | 0,0487 | 1,3395              | 0,0525 |
| 20    | 1,5527              | 0,0611   | 1,4690                | 0,0568 | 1,3554              | 0,0457 |
| 25    | 1,5436              | 0,0400   | 1,4541                | 0,0444 | 1,3485              | 0,0385 |
| 30    | 1,5522              | 0,0357   | 1,4341                | 0,0301 | 1,3385              | 0,0467 |

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Annapragada, S. R., Sun D. e Garimella S. V., 2007. *Prediction of Effective Thermo-Mechanical Properties of Particulate Composites*. **Computational Materials Science**, vol. 40, pp. 255-266.

Baltz B. A. & Ingber M. S., 1997. *A Parallel Implementation of the Boundary Element Method for Heat Conduction Analysis in Heterogeneous Media*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 19, pp. 3-11.

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

Böhm H. J., 1998. **A Short Introduction to Basic Aspects of Continuum Micromechanics**. Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics – Vienna University of Technology.

Brebbia C. A., Telles J. C. F., Wrobel L. C., 1984. **Boundary Elements Techniques: Theory and Applications in Engineering**. Berlin: Springer – Verlag.

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

Buroni F. C., 2006. *“Defesa de Mestrado”*. **Universidade Federal do Rio Grande do Sul**. Porto Alegre. Brasil.

Buroni F. C. & Marczak R. J., 2008. *A Family of Hole Boundary Elements for Modeling Materials with Cylindrical Voids*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 32, pp. 578-590.

Carson J. K., Lovatt S. J., Tanner D. J. & Cleland A. C., 2005. *Thermal Conductivity Bounds for Isotropic, Porous Materials*. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 48, pp. 2150-2158.

Carson J. K., Lovatt S. J., Tanner D. J. & Cleland A. C., 2003. *An Analysis of the Influence of Material Structure on the Effective Thermal Conductivity of Theoretical Porous Materials Using Finite Element Simulations*. **International Journal of Refrigeration**, vol. 26, pp. 873-880.

Chatterjee J., Henry D. P., Ma F. e Banerjee P. K., 2007. *An Efficient BEM Formulation for Three-dimensional Steady-State Heat Conduction Analysis of Composites*. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol 51, 1439-1452.

Girault A., Gruescu C., Do D. P., Homand F. e Kondo D., 2007. *Effective Thermal Conductivity of Transversely Isotropic Media with Arbitrary Oriented Ellipsoidal Inhomogeneities*. **International Journal of Solid and Structures**, vol. 44, pp. 2627-2647.

Gottfried L., 2002. *Homogenization of the Thermal Properties of Transpiration Cooled Multi-layer Plates*. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 191, pp 4535-4554.

Kanit T., Forest S., Galliet I., Mounoury V. & Jeulin D., 2003. *Determination of the Size of the Representative Volume Element for Random Composites: Statistical and Numerical Approach*. **International Journal of Solids and Structures**, vol. 40, 3647-3679.

Kane, J. H., 1994. **Boundary Element Analysis in Engineering Continuum Mechanics**. Prentice Hall, New Jersey.

Kakaç S. & Yener Y., 1993. **Heat Conduction**. Third Edition. Taylor&Francis Publishers.

Ma C-C. & Chang S-W., 2004. *Analytical Exact Solutions of Heat Conduction Problems for Anisotropic Multi-layered Media*, 2004. **International Journal of Heat Transfer**, vol. 47, pp. 1643-1655.

MATLAB, 2004. "User's Guide version 7.0". The MathWorks, Inc.

Meric R. A., 1997. *Boundary Elements for Joule Heating of Solids with Orthotropic Conductivities*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 20, pp. 253-260.

Nemat-Nasser S. and Hori M., 1999. **Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Solids**. 2<sup>nd</sup> Edition, Elsevier.

Öchsner A., Tane M. & Nakajima H., 2006. *Prediction of the Thermal Properties of Lotus-type and Quasi-isotropic Porous Metals: Numerical and Analytical Methods*. **Materials Letters**, vol. 60, pp. 2690-2694.

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

Sarwar M. K. & Majumdar P., 1995. *Thermal Conductivity of Wet Composite Porous Media*. **Heat Recovery Systems & CHP**, vol. 15, N° 4, pp. 369-381.

Shiah Y.C., and Tan C.L., 1997. *BEM Treatment of Two-dimensional Anisotropic Field Problems by Direct Domain Mapping*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 20, pp. 347-351.

Shiah Y.C., Tan C.L., 2004. *BEM Treatment of Three-dimensional Anisotropic Field Problems by Direct Domain Mapping*. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, vol. 28, pp. 43-52.

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

Wang M. & Pan N., 2008. *Modeling and Prediction of the Effective Thermal Conductivity of Random Open-cell Porous Foams*. **International Journal of Heat and Transfer**, vol. 51, pp. 1325-1331.



Zhao H. F., Hu G. K. & Lu T. J., 2006. *Cross-property Relations for Two-phase Planar Composites*. **Computational Materials Science**, vol. 35, pp. 408-415.

Zohdi, T. I., 2002. **Computational Modeling and Design of New Random Microheterogeneous Materials**. CISM Course notes, Udine Italia.