

Arnaldo dos Santos Júnior

***Um Estudo sobre Estimativas de Erro de Modelagem
em Estruturas de Materiais Heterogêneos***

Maceió – AL

Outubro / 2008

Catlogação na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

S237u Santos Júnior, Arnaldo dos.

Um estudo sobre estimativas de erro de modelagem em estruturas de materiais heterogêneos / Arnaldo dos Santos Júnior. – Maceió, 2008.

xvi, 63f. : il. grafs., tabs.

Orientador: Severino Pereira Cavalcanti Marques.

Co-Orientador: Francisco Patrick Araujo Almeida.

Dissertação (mestrado em Engenharia Civil : Estruturas) – Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2008.

Bibliografia: f. 56-58.

Apêndices: f. 59-63.

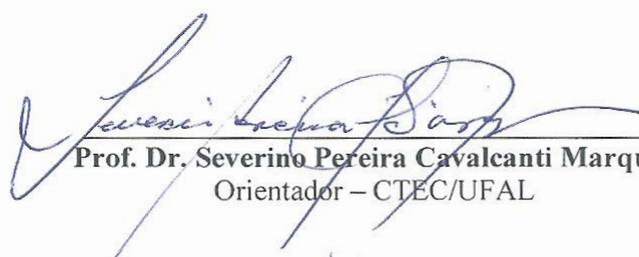
1. Engenharia civil – Materiais avançados. 2. Materiais heterogêneos – Propriedades efetivas. 3. Método dos elementos finitos. 4. Erro de modelagem.

I. Título.

CDU: 624.016

Membros da Banca de Exame da Dissertação de Mestrado do Engenheiro Civil **ARNALDO DOS SANTOS JÚNIOR**, intitulada “UM ESTUDO SOBRE ESTIMATIVAS DE ERRO DE MODELAGEM EM ESTRUTURAS DE MATERIAIS HETEROGÊNEOS”, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, da Universidade Federal de Alagoas, no dia 06 do mês de outubro do ano de 2008, às 15 horas, na Sala de Aula do PPGEC/CTEC/UFAL.

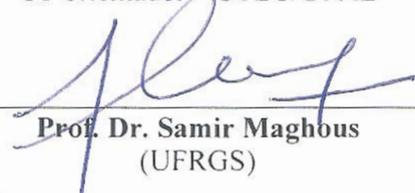
MEMBROS DA BANCA:



Prof. Dr. Severino Pereira Cavalcanti Marques
Orientador – CTEC/UFAL



Prof. Dr. Francisco Patrick Araujo Almeida
Co-orientador – CTEC/UFAL



Prof. Dr. Samir Maghous
(UFRGS)



Prof. Dr. Guillermo Juan Creus
UFRGS



Prof. Dr. Eduardo Nobre Lages
CTEC/UFAL

Este trabalho é dedicado exclusivamente às quatro pessoas mais importantes da minha vida:

Clarinha e Núbia (filha e esposa)

Arnaldo e Edileide (pais).

Agradecimentos

A Deus, por me conceder forças para a realização de mais uma conquista.

Um agradecimento especial ao professor Severino Marques, pelas incansáveis orientações, incentivos e por me apresentar um tema bastante recente e desafiador.

Ao professor Márcio André, pelo apoio no desenvolvimento do código computacional e sugestões que foram cruciais para o trabalho.

Aos professores Francisco Patrick, Eduardo Nobre, Eduardo Setton, William Wágner e Viviane, pelas dúvidas esclarecidas e favores prestados durante minha permanência na UFAL.

Aos meus irmãos Edinaelli, Macksuel e Roberto que estiveram sempre presentes em todos os momentos.

Á CAPES pelo apoio financeiro a esta pesquisa e ao LCCV/UFAL pela infra-estrutura disponibilizada para realização da mesma.

Aos professores Adeildo Ramos, Eduardo Nobre, Eduardo Setton, João Carlos Barbirato, William Wagner, Francisco Patrick e Luciano Barbosa, pelas disciplinas ministrados durante o Mestrado, as quais foram importantes para a minha formação acadêmica.

A todos os colegas do Mestrado e do LCCV/UFAL, pela amizade e bons momentos de descontração.

Resumo

Este trabalho apresenta um estudo sobre estimativas de erro de modelagem em estruturas elásticas lineares de materiais heterogêneos. A formulação empregada é baseada em uma teoria de avaliação de erro de modelagem à *posteriori* e utiliza o Método dos Elementos Finitos como ferramenta numérica. Os erros de modelagem avaliados consistem em erros globais, baseados em norma energia, e erros locais, em quantidades de interesse, induzidos pela substituição das propriedades micromecânicas do material em escala refinada por propriedades efetivas homogeneizadas. Estas propriedades efetivas são determinadas a partir de diferentes modelos da micromecânica e consideradas nos modelos físicos substitutos dos materiais heterogêneos. As quantidades de interesse podem ser, por exemplo, tensões médias ou deformações sobre a região escolhida, tais como superfície de inclusões e deslocamentos nas interfaces. Diversos exemplos numéricos envolvendo estruturas de materiais heterogêneos são analisados e os resultados são apresentados para demonstrar o desempenho da formulação na avaliação de erros de modelagem global e local.

Palavras-Chave: Materiais Heterogêneos, Propriedades Efetivas, Erro de Modelagem, Método dos Elementos Finitos.

Abstract

This work presents a study on modeling error estimates in linear elastic structures of heterogeneous materials. The employed formulation is based on a theory of a *posteriori* estimation of modeling errors and uses the Finite Element Method as numerical tool. The evaluated modeling errors consist of global errors based on energy norm and local errors in quantities of interest induced by replacing the fine-scale micromechanical properties of the material by homogenized or effective properties. These effective properties are determined from different micromechanical models and considered in the surrogate physical models of the heterogeneous materials. The quantities of interest may be, for example, averaged stress or strain on chosen regions, such as surfaces of inclusions, and interfacial displacements. Several numerical examples involving structures of heterogeneous materials are analyzed and the results are presented to demonstrate the performance of the formulation in the evaluation of global and local modeling errors.

Keywords: Heterogeneous Materials, Effective Properties, Modeling Error, Finite Element Method.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xi
Lista de símbolos	xii
Lista de abreviaturas e siglas	xv
1 Introdução	1
1.1 Relevância do Tema e Estado da Arte	1
1.2 Objetivos	3
1.3 Estrutura do Trabalho	4
2 Determinação de Propriedades Efetivas	5
2.1 Análise do Problema Micromecânico	5
2.2 Modelos Baseados na Teoria Micromecânica de Campos Médios	7
2.2.1 Auto-Consistente (AC)	8
2.2.2 Mori-Tanaka (MT)	9
2.2.3 Esquema Diferencial (ED)	10
2.3 Valores Limites das Propriedades Efetivas	12
2.3.1 Limite de Voigt (LV) e Limite de Reuss (LR)	13
2.3.2 Limites de Hashin-Shtrikman (HS)	14
2.4 Exemplos de Aplicação	15
2.4.1 Compósito Particulado	15

2.4.2	Mistura Asfáltica	16
2.4.3	Sólido Fissurado	17
3	Estimativas de Erro de Modelagem	19
3.1	Descrição do Problema	19
3.1.1	Notações e Definições	19
3.1.2	O Problema em Escala Refinada	21
3.1.3	O Problema Homogeneizado	21
3.2	Análise do Erro de Modelagem	22
3.3	Erro de Modelagem Global	24
3.4	Erro de Modelagem Local	25
3.4.1	O Problema Adjunto	26
3.5	Limites do Erro de Modelagem Local	27
4	Sistema Computacional	30
5	Aplicações Numéricas: Erros de Modelagem	34
5.1	Barra de Material Heterogêneo	34
5.2	Tubo de Material com Gradação Funcional	38
5.3	O Problema de Eshelby	46
5.4	Estrutura de Material Compósito Dotada de Inclusões Cilíndricas	50
6	Considerações Finais	54
	Referências Bibliográficas	56
	Apêndice A – Erro de Modelagem	59
A.1	Funcional Residual	59
A.2	Prova do Teorema 3.1	60

A.3 Prova do Teorema 3.2	61
A.4 Fator de Escala	62

Lista de Figuras

1.1	Materiais heterogêneos avançados.	1
1.2	Processo de homogeneização do material heterogêneo.	2
2.1	Ilustração de porções macroscopicamente representativas do material heterogêneo.	6
2.2	Formalismo utilizado no método da inclusão de Eshelby.	8
2.3	Estratégia do modelo Auto-Consistente.	8
2.4	Esquema ilustrativo do lema de Mori-Tanaka.	10
2.5	Sólido poroso.	12
2.6	Ilustração do modelo de Voigt.	13
2.7	Ilustração do modelo de Reuss.	14
2.8	Elemento de volume representativo do compósito particulado.	15
2.9	Módulo de elasticidade efetivo do compósito particulado.	16
2.10	Formulação do problema micromecânico (Adaptado de Evangelista Junior <i>et al.</i> (2003)).	17
2.11	Variação das propriedades elásticas efetivas da rocha fissurada com a porosidade.	18
3.1	Representação dos sistemas estruturais real heterogêneo e homogeneizado.	20
4.1	Diagrama de classes do MODERE.	31
4.2	Representação da interação entre os módulos do MODERE.	33
5.1	Barra de material heterogêneo.	34
5.2	Estimativas do erro de modelagem global em função da rigidez relativa (ϕ).	36
5.3	Estimativas do erro de modelagem local em função da rigidez relativa (ϕ).	37
5.4	Tubo de FGM.	38

5.5	Tubo laminado.	40
5.6	Estimativas do erro de modelagem global em função do número de lâminas para o caso de pressão interna.	41
5.7	Estimativas do erro de modelagem global em função do número de lâminas para o caso de pressão externa.	42
5.8	Estimativas do erro de modelagem global em função do grau de heterogeneidade para o caso de pressão interna.	43
5.9	Estimativas do erro de modelagem global em função do grau de heterogeneidade para o caso de pressão externa.	44
5.10	Contribuição de cada lâmina no erro de modelagem global para o caso de pressão interna.	45
5.11	Contribuição de cada lâmina no erro de modelagem global para o caso de pressão externa.	45
5.12	Fibra circular envolvida por uma larga matriz submetida a um carregamento uniformemente aplicado.	47
5.13	Estimativas de erro de modelagem global - rigidez relativa fibra/matriz.	48
5.14	Estimativas de erro de modelagem global - rigidez relativa matriz/fibra.	49
5.15	Estimativas de erro de modelagem local no problema de Eshelby.	50
5.16	Representação esquemática da estrutura de material compósito com inclusões cilíndricas.	51
5.17	Malha de elementos finitos T6 utilizada nas análises.	52

Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros elásticos dos constituintes do compósito particulado.	15
2.2	Parâmetros elásticos dos constituintes da mistura asfáltica.	17
2.3	Módulo elástico efetivo da mistura asfáltica em MPa.	17
2.4	Parâmetros elásticos da rocha e das inclusões.	18
5.1	Parâmetros e propriedades do tubo utilizados nas análises.	40
5.2	Índices de efetividade das estimativas de erro de modelagem global.	52
5.3	Índices de efetividade das estimativas de erro de modelagem local.	53

Lista de símbolos

\mathbf{A}	Tensor de segunda ordem
A	Área da seção transversal da barra
\mathbf{A}_I	Tensor de concentração de deformação da fase inclusão
α_l, α_u	Constantes reais positivas
\mathbf{A}_M	Tensor de concentração de deformação da fase matriz
\mathcal{B}	Forma bilinear homogeneizada
$\underline{\underline{\text{def}}}$	Definição
E_0	Valor de referência do módulo de elasticidade
\mathbf{e}^h	Erro de modelagem na função de influência
ν_F	Coefficiente de Poisson da fibra
ν_M	Coefficiente de Poisson da matriz
E_F	Módulo de elasticidade da fibra
E_M	Módulo de elasticidade da matriz
\mathbf{e}^h	Erro de modelagem
E^h	Módulo de elasticidade efetivo ou homogeneizado
\mathbf{E}^h	Tensor de elasticidade efetivo ou homogeneizado
\mathbf{E}_I	Tensor de elasticidade do material da inclusão
E_{ijkl}	Componentes cartesianas do tensor de elasticidade do material
\mathbf{E}_M	Tensor de elasticidade do material da matriz
$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$	Média volumétrica do tensor deformação
η_{inf}, η_{sup}	Limites inferior e superior do erro de modelagem na quantidade de interesse
$\eta_{inf,est}, \eta_{sup,est}$	Limites inferior e superior estimados do erro de modelagem na quantidade de interesse
\mathbf{f}	Forças de massa
f_I	Fração volumétrica da fase inclusão
Γ	Contorno do sólido

$\gamma_{inf}, \gamma_{sup}$	Índices de efetividade local inferior e superior
$\gamma_{inf,est}, \gamma_{sup,est}$	Índices de efetividade local inferior e superior estimados
Γ_t	Parte do contorno com carregamentos prescritos
Γ_u	Parte do contorno com deslocamentos prescritos
G_I	Módulo de cisalhamento da inclusão
G_M	Módulo de cisalhamento da matriz
\mathcal{H}	Função passo unitário
I	Tensor identidade
G^h	Módulo de cisalhamento efetivo ou homogeneizado
K^h	Módulo volumétrico efetivo ou homogeneizado
K_I	Módulo volumétrico da inclusão
K_M	Módulo volumétrico da matriz
\mathcal{L}	Funcional representativo da quantidade de interesse
$\lambda_{inf}, \lambda_{sup}$	Índices de efetividade global inferior e superior
$\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)$	Erro de modelagem local na quantidade de interesse
$\langle \cdot \rangle$	Média volumétrica
∇	Operador gradiente
$\ \cdot \ _{E(\Omega)}$	Norma energia
ν^h	Coefficiente de Poisson efetivo ou homogeneizado
ν_0	Valor de referência do coeficiente de Poisson
Ω	Domínio do sólido
p	Carregamento no problema de Eshelby
P_E	Pressão externa
ϕ	Rigidez relativa
P_I	Pressão interna
P^*, Q^*	Fatores de polarização
Ψ_{inf}, Ψ_{sup}	Limites inferior e superior do erro de modelagem global
$\bar{\Psi}_{inf}, \bar{\Psi}_{sup}$	Limites inferior e superior do erro de modelagem na função de influência
\mathcal{R}	Funcional residual
s	Fator de escala
S	Tensor de Eshelby

ε	Tensor deformação
$\langle \sigma \rangle$	Média volumétrica do tensor tensão
σ	Tensor tensão
\mathcal{T}	Energia potencial total do corpo
\mathbf{t}	Forças de superfície
\mathbf{u}	Campo de deslocamentos
\mathbf{u}^h	Campo de deslocamentos homogêneo equivalente
u_i	Componentes do deslocamento
$\mathbf{V}(\Omega)$	Espaço de funções admissíveis
V	Volume de material
φ	Porosidade
\mathbf{w}	Função de influência
\mathbf{w}^h	Função de influência do problema homogeneizado
ω	Região escolhida para o cálculo do erro local
ξ, ζ	Funções potenciais complexas

Lista de abreviaturas e siglas

AC	Auto-Consistente
CUR	Célula Unitária Repetida
ED	Esquema Diferencial
EVR	Elemento de Volume Representativo
FGM	Functionally Graded Material
HS	Hashin-Shtrikman
LR	Limite de Reuss
LV	Limite de Voigt
MEF	Método dos Elementos Finitos
MODERE	Software for Modeling Error Estimation
MT	Mori-Tanaka

1 *Introdução*

1.1 Relevância do Tema e Estado da Arte

O uso de materiais heterogêneos em aplicações estruturais tem crescido de forma significativa nos últimos anos para atender às necessidades dos modernos setores industriais. Este uso crescente deve-se ao fato de que tais materiais, em geral, exibem comportamentos bastante diferentes em relação aos materiais homogêneos tradicionais, podendo oferecer características estruturais ótimas para determinadas aplicações que seus constituintes não poderiam oferecer individualmente. Como exemplos de materiais heterogêneos avançados empregados em diversas aplicações estruturais podem ser citados os compósitos reforçados por fibras, os laminados e, recentemente, os materiais com gradação funcional (Figura 1.1). Estes materiais têm ganhado bastante destaque nas indústrias automotiva, esportiva, aeroespacial, de exploração de petróleo e de construção civil por apresentarem, principalmente, baixo peso e elevado desempenho estrutural.

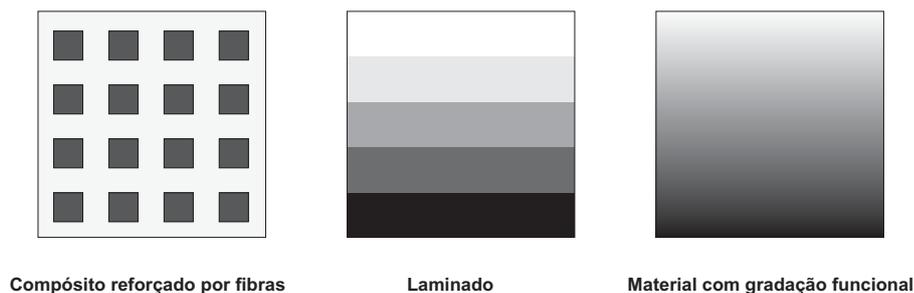


Figura 1.1: Materiais heterogêneos avançados.

Devido à importância dos materiais heterogêneos avançados, muitos estudos têm sido desenvolvidos para entender o comportamento dos mesmos na presença das mais variadas ações e, com isto, aperfeiçoar os procedimentos de projetos e suas aplicações nos diversos setores industriais. Dentre estes estudos, destacam-se aqueles voltados para a descrição do comportamento mecânico dos citados materiais através do uso de modelos computacionais.

No entanto, a natureza heterogênea da microestrutura é responsável por comportamentos mais complexos que aqueles apresentados pelos materiais homogêneos tradicionais, tornando

os estudos de modelagem computacional bem mais sofisticados. Os modelos numéricos elaborados para estes estudos apresentam maior grau de complexidade e exigem maiores esforços computacionais. Assim sendo, a formulação de modelos e estratégias que viabilizem a descrição do comportamento dos materiais heterogêneos avançados é de grande relevância tecnológica e crucial para o desenvolvimento industrial, assim como para a evolução de diversas áreas científicas que têm forte repercussão no desenvolvimento humano e social.

Com o objetivo de facilitar a modelagem computacional, normalmente substituem-se os materiais heterogêneos por outros homogeneizados com propriedades efetivas ou equivalentes (Figura 1.2). Entretanto, o processo de homogeneização do material conduz a modelos aproximados que muitas vezes não possibilitam uma análise realística do material heterogêneo. Assim, faz-se necessário o uso de metodologias que permitam avaliar a qualidade da solução do problema homogeneizado.

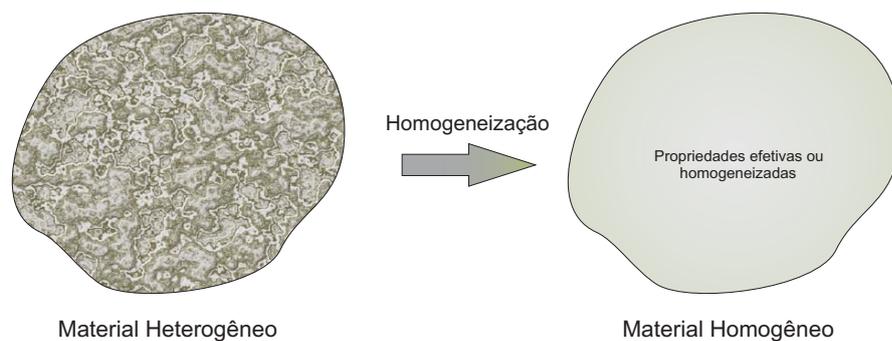


Figura 1.2: Processo de homogeneização do material heterogêneo.

Como forma de quantificar a magnitude do erro em se modelar um material homogeneizado ao invés do material heterogêneo real são utilizadas, neste trabalho, estimativas de erros de modelagem. A formulação empregada é baseada em uma nova e sistemática teoria de avaliação de erros à *posteriori* e utiliza o Método dos Elementos Finitos (MEF) como ferramenta numérica. Um aspecto bastante relevante desta formulação é que para a determinação das referidas estimativas de erros de modelagem não é necessário o conhecimento da solução do problema heterogêneo real, mas apenas de informações relativas à microestrutura do material, como geometria, distribuição espacial e propriedades mecânicas dos constituintes.

A teoria de avaliação de erro à *posteriori* foi apresentada inicialmente por Zohdi *et al.* (1996) e Oden & Zohdi (1997), nos trabalhos sobre modelagem hierárquica para a estimativa dos limites do erro de modelagem global em termos de norma energia. A idéia básica proposta nestes trabalhos é a adaptação matemática e computacional dos modelos de materiais heterogêneos para obter resultados em um nível de acurácia especificado. Posteriormente, esta teoria foi estendida por Oden & Vemaganti (2000), Vemaganti & Oden (2001) e Romkes

et al. (2006) para a estimativa dos limites do erro de modelagem local em quantidades físicas de interesse, tais como tensões e deformações médias nas superfícies das inclusões ou deslocamentos nas interfaces. As referidas estimativas de erro de modelagem global e local são empregadas para estruturas de materiais heterogêneos de múltiplas fases, porém, no presente estudo, são consideradas nas análises estruturas de materiais compósitos elásticos e lineares de duas fases discretas do tipo matriz/inclusão e de materiais que apresentam microestruturas com distribuição gradual, ambos com propriedades mecânicas conhecidas *a priori* e geometria regular dos componentes estruturais.

O Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Alagoas tem uma linha de pesquisa focada na área de Novos Materiais, cujo objetivo envolve a formulação de modelos para a descrição do comportamento de materiais avançados, tendo como trabalho pioneiro o de Cavalcante (2006). Este trabalho inicial apresenta um modelo numérico baseado na Teoria de Volumes Finitos, o qual permite a descrição do comportamento termo-mecânico elástico de estruturas de materiais heterogêneos com inclusões e contorno de geometrias arbitrárias.

O presente trabalho consiste em uma continuidade da linha de pesquisa Novos Materiais e contempla um tema bastante recente e de grande importância tecnológica. Diferentemente daquele trabalho pioneiro, o atual estudo aborda aspectos de erros de modelagem em estruturas de materiais heterogêneos elásticos e lineares usando como ferramenta numérica o Método dos Elementos Finitos (MEF).

1.2 Objetivos

O objetivo central dos estudos desta dissertação é a modelagem computacional de estruturas de materiais heterogêneos, usando recursos de simulação baseados em uma formulação de avaliação de erro de modelagem que possibilite aferir a qualidade da solução do modelo homogeneizado substituto do modelo heterogêneo real. Especificamente, o trabalho contempla os seguintes objetivos:

- Implementar um código computacional em linguagem de programação C++ voltado para a descrição do comportamento mecânico de materiais heterogêneos que permita a obtenção de informações relevantes em nível micromecânico;
- Aplicar o código computacional para descrever o comportamento macromecânico de estruturas de materiais compósitos reforçados por fibras, assim como para avaliar valores

locais de tensões e deformações que se manifestam nas fibras e ao longo de interfaces fibra/matriz;

- Contribuir para o fortalecimento da linha de pesquisa focada na área de Novos Materiais inserida no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Alagoas.

1.3 Estrutura do Trabalho

No Capítulo 2, inicialmente apresentam-se alguns modelos de homogeneização utilizados para a determinação de propriedades elásticas efetivas de materiais compósitos. Em seguida, são realizadas diversas simulações numéricas considerando-se diferentes tipos de materiais compósitos para a obtenção do modelo homogeneizado equivalente.

No Capítulo 3, mostra-se a formulação matemática para as estimativas dos limites do erro de modelagem global, e local em quantidades de interesse. Este erro é decorrente da substituição de um modelo representativo do material heterogêneo por outro modelo homogêneo equivalente. Em termos globais, os limites do erro de modelagem são calculados por meio de norma energia. Os limites são também calculados de forma localizada para quantidades de interesse que representam grandezas físicas da solução do problema, como tensões, deformações e deslocamentos.

O Capítulo 4 apresenta a infra-estrutura computacional utilizada neste estudo. Com o objetivo de realizar simulações numéricas para as estimativas de erros de modelagem, desenvolve-se um sistema computacional denominado MODERE. O referido sistema computacional apresenta três módulos principais que são responsáveis, respectivamente, pelas tarefas de determinação de propriedades elásticas efetivas, geração da malha de elementos finitos e estimativa dos limites dos erros de modelagem.

No Capítulo 5 há diversas aplicações numéricas das estimativas de erro de modelagem global e local em problemas elásticos lineares. Os problemas mostrados envolvem estruturas de materiais compósitos reforçados por fibras e aqueles que apresentam microestruturas com graduação funcional.

Finalmente são apresentadas no Capítulo 6 algumas conclusões deste estudo e sugestões para trabalhos futuros.

2 Determinação de Propriedades Efetivas

Os materiais comumente utilizados em diversas aplicações da ciência dos materiais são em grande parte compostos de múltiplos constituintes que ocupam diversas regiões com distintas interfaces entre eles. Em geral, a escala das heterogeneidades do material é muito pequena comparada com aquela do componente estrutural como um todo, o que permite a utilização do conceito de elemento de volume representativo definido na seção 2.1. Do ponto de vista computacional, para a obtenção da resposta macroscópica de uma estrutura constituída de material heterogêneo, considerando-se todos os detalhes de sua microestrutura, necessita-se de discretizações dos domínios bastante refinadas visando-se capturar os efeitos introduzidos pelas heterogeneidades. Além disto, a caracterização da microestrutura real do material, em geral, apresenta complexidade elevada e a análise computacional requer dos computadores uma considerável capacidade de armazenamento e de processamento.

Para contornar as dificuldades acima mencionadas, recorre-se aos modelos de homogeneização que permitem a substituição do material heterogêneo real por um material substituto homogeneizado. Neste capítulo são apresentados alguns modelos analíticos de homogeneização utilizados para a determinação das propriedades elásticas do material homogeneizado equivalente ao material heterogêneo real.

2.1 Análise do Problema Micromecânico

Para a determinação das propriedades macroscópicas do material heterogêneo, usualmente são utilizados modelos micromecânicos que assumem a existência de uma porção de volume do sólido que representa o comportamento efetivo do material. Em materiais estatisticamente homogêneos, ou seja, materiais cujas propriedades macroscópicas não variam ao longo do domínio, esta porção de volume é conhecida como Elemento de Volume Representativo (EVR) e, no caso de materiais com microestruturas periódicas, Célula Unitária Repetida (CUR). O EVR pode ser definido como o menor volume que, estatisticamente, representa

o comportamento efetivo do material, enquanto que a CUR caracteriza a periodicidade do material heterogêneo (Drago; Pindera, 2007; Yu; Tang, 2007). Na Figura 2.1 estão ilustrados dois sólidos de materiais heterogêneos em que suas microestruturas são caracterizadas, respectivamente, por inclusões dispersas de forma randômica e periódica.

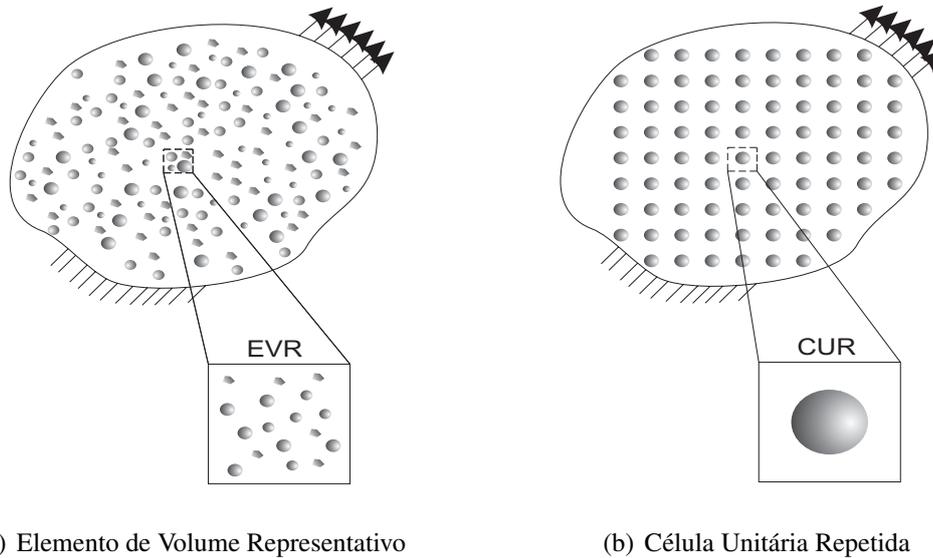


Figura 2.1: Ilustração de porções macroscopicamente representativas do material heterogêneo.

Estes dois conceitos de porções representativas do material levam em conta as diferentes configurações geométricas da microestrutura do material heterogêneo e exigem a imposição de condições de contorno adequadas na execução das análises micromecânicas. Usualmente, nas análises realizadas em um EVR, consideram-se condições de contorno uniformes ou homogêneas, enquanto que naquelas efetuadas através da CUR, impõe-se estrategicamente condições de contorno periódicas compatíveis com a periodicidade do sistema em estudo.

Normalmente, no processo de avaliação das propriedades efetivas de materiais heterogêneos, aproximam-se as quantidades físicas representativas do comportamento macroscópico do material através de relações entre médias, as quais conduzem a campos médios volumétricos calculados na porção representativa do material (EVR ou CUR). No caso particular de análises puramente mecânicas, as referidas quantidades físicas relacionam médias volumétricas de tensão e de deformação. Em geral, as quantidades médias são determinadas pela seguinte expressão:

$$\langle \cdot \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V} \int_V \cdot \, dV, \quad (2.1)$$

onde V representa o volume de material contido na porção representativa.

Assim, pode-se estabelecer a relação constitutiva do material elástico e linear, em termos

médios, por meio do produto tensorial conforme mostrado na expressão a seguir:

$$\langle \sigma \rangle = \mathbf{E}^h : \langle \varepsilon \rangle, \quad (2.2)$$

em que \mathbf{E}^h representa o tensor de elasticidade efetivo ou homogeneizado, $\langle \sigma \rangle$ e $\langle \varepsilon \rangle$ expressam, respectivamente, as médias volumétricas dos tensores de tensão e de deformação. De forma similar, pode-se estabelecer outras quantidades efetivas, como por exemplo a difusividade ou a condutividade. Conforme mostrado em Zohdi & Wriggers (2005), vale ressaltar que estas quantidades efetivas não são, a rigor, propriedades do material, mas uma relação entre médias. Porém, para ser consistente com a literatura técnica, é utilizada no presente trabalho a expressão “propriedades efetivas” ou “propriedades homogeneizadas”.

2.2 Modelos Baseados na Teoria Micromecânica de Campos Médios

A avaliação analítica de propriedades efetivas ou homogeneizadas de materiais não-homogêneos pode ser feita por meio de modelos da micromecânica, os quais têm como um de seus objetivos a caracterização das propriedades macroscópicas de materiais compósitos em função das propriedades de seus constituintes microestruturais (Nemat-Nasser; Hori, 1999; Zohdi; Wriggers, 2005).

Os modelos micromecânicos baseados na teoria de campos médios empregados no presente trabalho baseiam-se no método de Eshelby (1957) que trata de uma inclusão elipsoidal de material homogêneo e elástico imersa em um meio homogêneo, elástico e infinito, sob uma condição de carregamento uniforme aplicado distante da inclusão (Figura 2.2). Com essas considerações impostas, Eshelby provou que para um campo de tensão ou de deformação uniforme aplicado distante da inclusão, a tensão ou a deformação na inclusão é também constante. Este resultado é a base de muitos modelos micromecânicos utilizados para obtenção das propriedades efetivas de materiais heterogêneos. Entretanto, a diferença básica destes modelos consiste na forma de considerar as interações entre as inclusões, que passa a afetar o problema real quando a fração volumétrica de inclusões (relação entre o volume de inclusões e o volume total do compósito) ultrapassa um certo limite.

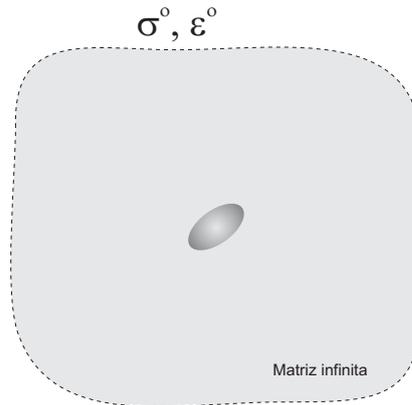


Figura 2.2: Formalismo utilizado no método da inclusão de Eshelby.

Em compósitos reais existem muitas inclusões e, dependendo da distância entre elas, o efeito de suas interações pode ser de grande importância. Neste caso, devem ser utilizados modelos que levem em consideração tal efeito sobre as propriedades efetivas do compósito e de seus campos de tensão e de deformação.

2.2.1 Auto-Consistente (AC)

Proposto por Hill (1965), a estratégia deste modelo resulta na transformação do problema relativo ao compósito real em outro que consiste em uma única inclusão envolvida por uma matriz infinita, a qual é constituída por um material homogeneizado efetivo com as propriedades elásticas efetivas do compósito (Figura 2.3). Tal estratégia é utilizada para considerar o efeito das interações entre as inclusões inseridas na matriz.

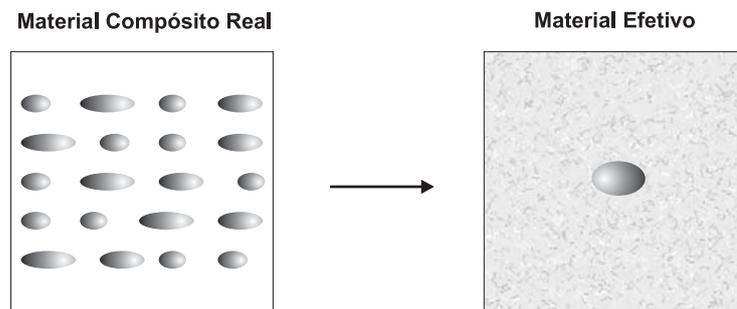


Figura 2.3: Estratégia do modelo Auto-Consistente.

A formulação matemática do modelo Auto-Consistente apresenta para avaliação do tensor de elasticidade efetivo do compósito a seguinte equação implícita:

$$\mathbf{E}^h = \mathbf{E}_M + f_I(\mathbf{E}_I - \mathbf{E}_M) : [\mathbf{I} - \mathbf{S} : (\mathbf{E}^h)^{-1} : (\mathbf{E}^h - \mathbf{E}_I)]^{-1}, \quad (2.3)$$

onde \mathbf{I} representa o tensor identidade, \mathbf{E}_M e \mathbf{E}_I são os tensores de elasticidade da matriz

e da inclusão, respectivamente, f_I é a fração volumétrica da fase inclusão (relação entre o volume de inclusão e o volume total do compósito) e \mathbf{S} simboliza o tensor de Eshelby. Este último é calculado considerando a geometria da inclusão e o tensor constitutivo do material homogeneizado efetivo (Figura 2.3). Tensores de Eshelby para inclusões de diversas formas podem ser encontrados em Suvorov & Dvorak (2002).

Para determinação do tensor \mathbf{E}^h pela Equação (2.3), pode-se utilizar uma estratégia iterativa de solução descrita pela expressão:

$$\mathbf{E}_{k+1}^h = \mathbf{E}_M + f_I(\mathbf{E}_I - \mathbf{E}_M) : [\mathbf{I} - \mathbf{S}_k : (\mathbf{E}_k^h)^{-1} : (\mathbf{E}_k^h - \mathbf{E}_I)]^{-1}, \quad (2.4)$$

onde $k+1$ indica o número do passo iterativo. A condição inicial usada em tal solução pode ser dada por $\mathbf{E}_1^h = \mathbf{E}_M$ e $\mathbf{S}_1 = \mathbf{S}_M$. Esta condição é bastante intuitivas, uma vez que na ausência de inclusões as propriedades elásticas efetivas do compósito são equivalentes às da matriz.

Observação: quando aplicado para a determinação das propriedades elásticas efetivas de sólidos dotados de cavidades esféricas com frações volumétricas de vazios acima de 30%, o modelo Auto-Consistente apresenta problemas na obtenção da resposta devido a inconsistências físicas inerentes ao modelo.

2.2.2 Mori-Tanaka (MT)

O Modelo de Mori-Tanaka tem sido aplicado em problemas micromecânicos diversos, tais como: cálculo das propriedades efetivas de compósitos e de materiais porosos ou celulares, efeito de fraturas e crescimento de vazios em metais, como pode ser visto em Takao *et al.* (1982), Walsh (1965) e Taya & Seidel (1981). Este modelo é baseado no Lema de Mori-Tanaka (Mori; Tanaka, 1973) e a formulação usada no presente estudo foi apresentada em Benveniste (1987).

Lema 2.1. Sejam dois domínios elipsoidais, similares e coaxiais $\bar{\Omega}_0$ e $\bar{\Omega}$, conforme mostrado na Figura (2.4) e definidos por:

$$\begin{cases} \bar{\Omega}_0 = \frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} + \frac{x_3^2}{a_3^2} \leq 1 \\ \bar{\Omega} = \frac{x_1^2}{b_1^2} + \frac{x_2^2}{b_2^2} + \frac{x_3^2}{b_3^2} \leq 1 \end{cases} \quad \text{e} \quad \frac{a_1}{b_1} = \frac{a_2}{b_2} = \frac{a_3}{b_3} = \bar{k}.$$

Assumindo um campo de deformação uniforme $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ imposto no domínio $\bar{\Omega}_0$,

$$\boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}^* & \text{se } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}_0 \\ 0 & \text{se } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}_0 \end{cases}$$

a média das perturbações do campo de deformação no subdomínio $\bar{\Omega} - \bar{\Omega}_0$ é dada por:

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\bar{\Omega} - \bar{\Omega}_0} = \frac{1}{\bar{\Omega} - \bar{\Omega}_0} \int_{\bar{\Omega} - \bar{\Omega}_0} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \, d\Omega = 0. \quad (2.5)$$

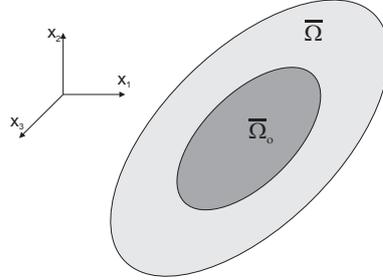


Figura 2.4: Esquema ilustrativo do lema de Mori-Tanaka.

A partir do resultado proposto pelo Lema 2.1, Mori & Tanaka (1973) propuseram a seguinte equação para avaliar o tensor de elasticidade efetivo do compósito:

$$\mathbf{E}^h = [f_I \mathbf{E}_I : \mathbf{A}_I + (1 - f_I) \mathbf{E}_M] : \mathbf{A}_M, \quad (2.6)$$

sendo

$$\mathbf{A}_I = [\mathbf{I} - \mathbf{S} : (\mathbf{E}_M)^{-1} : (\mathbf{E}_M - \mathbf{E}_I)]^{-1}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{A}_M = [f_I \mathbf{A}_I + (1 - f_I) \mathbf{I}]^{-1}, \quad (2.8)$$

onde \mathbf{A}_I e \mathbf{A}_M representam, respectivamente, os tensores de concentração de deformações da inclusão e da matriz, os quais relacionam a deformação média total do corpo com as deformações médias das fases constituintes através de expressões também conhecidas como equações de localização.

2.2.3 Esquema Diferencial (ED)

Formulação Geral

A formulação geral do Esquema Diferencial pode ser encontrada em Hashin (1988). A estratégia usada neste modelo para levar em conta o efeito das interações entre inclusões consiste em conceber o material compósito como resultante de um processo incremental de adição de frações volumétricas infinitesimais da fase inclusão, seguida de posterior processo de homogeneização, até atingir o valor final de f_I . Para cada incremento são calculados o tensor de Eshelby e o tensor constitutivo de rigidez efetiva.

A equação diferencial para avaliar as propriedades elásticas efetivas do compósito é

expressa como:

$$\frac{d\mathbf{E}^h}{df_I} = \frac{1}{1-f_I}(\mathbf{E}_I - \mathbf{E}^h) : \mathbf{A}_I, \quad (2.9)$$

onde

$$\mathbf{A}_I = \{\mathbf{I} - \mathbf{S} : (\mathbf{E}^h)^{-1} : (\mathbf{E}^h - \mathbf{E}_I)\}^{-1}. \quad (2.10)$$

Como condição inicial do processo incremental pode-se utilizar $\mathbf{E}^h(0) = \mathbf{E}_M$, tal como feito no modelo Auto-Consistente.

Formulação para Sólidos Fissurados

A predição de propriedades elásticas efetivas de sólidos porosos ou fissurados tem grande importância em diversas aplicações práticas da geomecânica e da geofísica, a exemplo do estudo do efeito de fluidos sobre os parâmetros elásticos de reservatórios heterogêneos (Berryman, 2005a; Berryman, 2005b). Nos últimos anos, diversos modelos micromecânicos têm sido empregados no sentido de avaliar o efeito de fraturas e poros em rochas (Markov *et al.*, 2005).

O modelo apresentado em Berryman *et al.* (2002) para sólidos dotados de fissuras em forma de elipsóides randomicamente distribuídos (Figura 2.5), secos ou saturados por fluido, consiste em um sistema de equações diferenciais acopladas definido por:

$$\frac{dK^h}{d\varphi} = \frac{1}{1-\varphi}(K_I - K^h)P^*(\varphi), \quad (2.11)$$

$$\frac{dG^h}{d\varphi} = \frac{1}{1-\varphi}(G_I - G^h)Q^*(\varphi), \quad (2.12)$$

onde φ representa a porosidade que, neste caso, equivale à fração volumétrica de inclusão f_I . Os símbolos K e G são utilizados para indicar, respectivamente, os módulos volumétrico e de cisalhamento dos materiais constituintes.

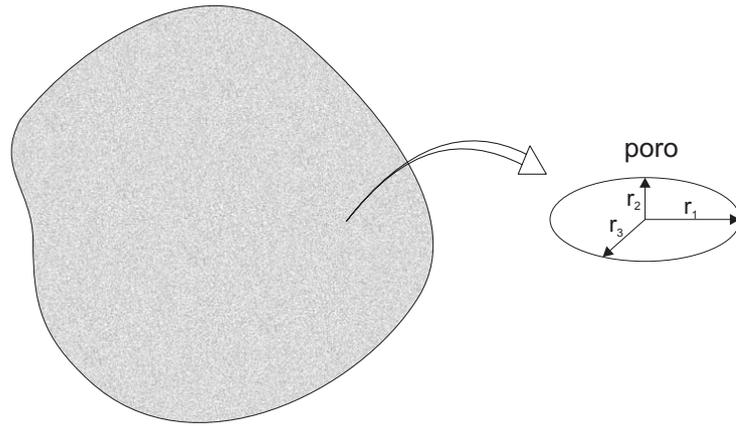


Figura 2.5: Sólido poroso.

Os fatores P^* e Q^* mostrados em (2.11) e (2.12) são conhecidos como fatores de polarização para os módulos volumétrico e de cisalhamento, como mostrado em (Eshelby, 1957). Estes dependem, essencialmente, dos parâmetros mecânicos e geométricos da inclusão (poros) e do meio hospedeiro (matriz), tais como módulos volumétrico e de cisalhamento e a forma da inclusão. No caso de inclusões em forma de discos estes fatores assumem a seguinte forma:

$$P^* = \frac{K^h + \frac{4}{3}G_I}{K_I + \frac{4}{3}G_I + \pi r \gamma^*}, \quad (2.13)$$

$$Q^* = \frac{1}{5} \left[1 + \frac{8G^h}{4G_I + \pi r (G^h + 2\gamma^*)} + 2 \frac{K_I + \frac{2}{3}(G_I + G^h)}{K_I + \frac{4}{3}(G_I + \pi r \gamma^*)} \right], \quad (2.14)$$

sendo

$$\gamma^* = G^h \frac{3K^h + G^h}{3K^h + 4G^h}, \quad (2.15)$$

e $0 < r < 1$, onde $r = r_1/r_2$ representa o fator de forma das fissuras, que no caso particular de inclusões em forma de discos circulares, tem-se: $r_1 = r_2 \gg r_3$.

Para a determinação da solução aproximada do sistema de equações diferenciais estabelecido em (2.11) e (2.12), pode-se utilizar, por exemplo, o método numérico de Runge-Kutta e como condição inicial $K^h(0) = K_M$ e $G^h(0) = G_M$.

2.3 Valores Limites das Propriedades Efetivas

Nesta seção, apresentam-se alguns limites empregados para a determinação de propriedades elásticas efetivas de materiais compósitos.

2.3.1 Limite de Voigt (LV) e Limite de Reuss (LR)

Modelo de Voigt

O modelo de Voigt é um dos mais simples esquemas de homogeneização do material compósito. Em sua formulação é assumida uma deformação longitudinal uniforme no compósito, o que implica em deformações iguais em cada fase do compósito. A condição pressuposta por Voigt sugere que o material compósito seja formado por um conjunto de barras feitas a partir dos materiais da matriz e da inclusão, sujeito a uma deformação uniforme aplicada nas extremidades do compósito (Figura 2.6).

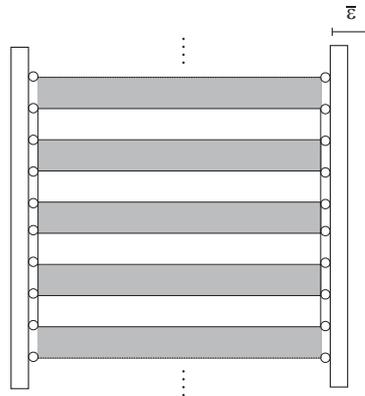


Figura 2.6: Ilustração do modelo de Voigt.

A principal restrição deste modelo está no fato de não considerar aspectos da microestrutura do material, a exemplo da forma e orientação da inclusão. Estimativas realizadas através do referido modelo conduzem a materiais efetivos com rigidezes elásticas *sobrestimadas*. Assim, o modelo de Voigt prediz um limite superior para a rigidez elástica efetiva do material.

A formulação matemática do modelo de Voigt apresenta a seguinte equação para avaliar o tensor de elasticidade efetivo do compósito:

$$\mathbf{E}^h = f_I \mathbf{E}_I + (1 - f_I) \mathbf{E}_M. \quad (2.16)$$

Modelo de Reuss

Diferentemente da formulação de Voigt, o modelo de Reuss assume a igualdade das tensões em cada fase do compósito, o qual pode ser concebido por um conjunto de barras paralelas constituídas pelos materiais da matriz e da inclusão e sujeito a uma tensão normal aplicada nas extremidades do compósito (Figura 2.7). O presente modelo também apresenta limitação por não considerar detalhes da microestrutura do material. Contudo, estimativas das

rigidezes elásticas efetivas realizadas pelo referido modelo conduzem a valores *subestimados*, representando então um limite inferior.

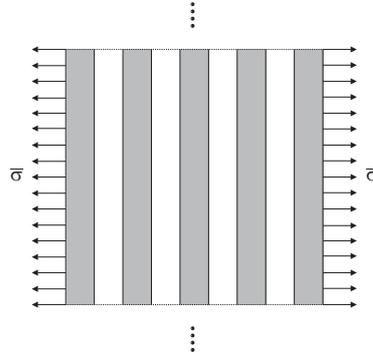


Figura 2.7: Ilustração do modelo de Reuss.

Para avaliar o tensor de elasticidade efetivo do compósito, o modelo apresenta a seguinte equação:

$$\mathbf{E}^h = \left[f_I (\mathbf{E}_I)^{-1} + (1 - f_I) (\mathbf{E}_M)^{-1} \right]^{-1}. \quad (2.17)$$

2.3.2 Limites de Hashin-Shtrikman (HS)

Desenvolvidos por Hashin & Shtrikman (1963), a determinação destes limites baseia-se em princípios variacionais onde o meio é assumido como infinito e nenhuma informação geométrica dos constituintes é considerada. Segundo Zohdi & Wriggers (2005), os limites de Hashin-Shtrikman são as melhores estimativas para a obtenção analítica das propriedades efetivas macroscópicas do material isotrópico. Os limites para as propriedades elásticas efetivas do material isotrópico resultante são estabelecidos pelas expressões:

$$K_M + \frac{f_I}{\frac{1}{K_I - K_M} + \frac{3(1-f_I)}{3K_M + 4G_M}} \leq K^h \leq K_I + \frac{(1-f_I)}{\frac{1}{K_M - K_I} + \frac{3f_I}{3K_I + 4G_I}}, \quad (2.18)$$

$$G_M + \frac{f_I}{\frac{1}{G_I - G_M} + \frac{6(1-f_I)(K_M + 2G_M)}{5G_M(3K_M + 4G_M)}} \leq G^h \leq G_I + \frac{(1-f_I)}{\frac{1}{G_M - G_I} + \frac{6f_I(K_I + 2G_I)}{5G_I(3K_I + 4G_I)}}, \quad (2.19)$$

onde K_M , G_M , K_I e G_I são os módulos volumétrico e de cisalhamento das fases matriz e inclusão, respectivamente. O módulo de elasticidade efetivo E^h e o coeficiente de Poisson efetivo ν^h são obtidos através das expressões:

$$E^h = \frac{9K^h G^h}{3K^h + G^h}, \quad (2.20)$$

$$\nu^h = \frac{3K^h - 2G^h}{2(3K^h + G^h)}. \quad (2.21)$$

2.4 Exemplos de Aplicação

Para verificar o desempenho dos modelos micromecânicos, anteriormente apresentados, na obtenção das propriedades elásticas efetivas de materiais não-homogêneos, são mostrados exemplos considerando-se diferentes tipos de materiais compósitos.

2.4.1 Compósito Particulado

Tessier-Doyen *et al.* (2007) ensaiaram um sólido de matriz vítrea dotado de inclusões esféricas de alumina distribuídas randomicamente na matriz, conforme ilustrado na Figura 2.8, medindo a variação da rigidez do material com o aumento da fração volumétrica de alumina.

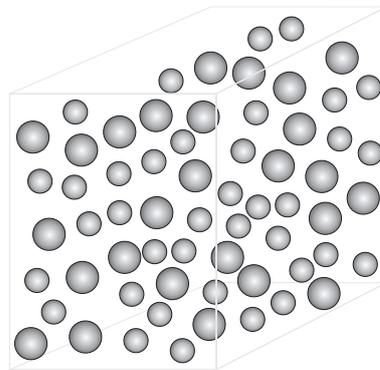


Figura 2.8: Elemento de volume representativo do compósito particulado.

Os módulos de elasticidade e coeficiente de Poisson do vidro puro foram medidos através de ensaios experimentais e seus valores estão representados na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Parâmetros elásticos dos constituintes do compósito particulado.

Constituintes	Módulo de Elasticidade (MPa)	Coefficiente de Poisson
Alumina	240	0,24
Material vítreo	78	0,21

O gráfico ilustrado na Figura 2.9 mostra uma comparação entre os módulos de elasticidade efetivos medidos experimentalmente e os obtidos através de modelos micromecânicos.

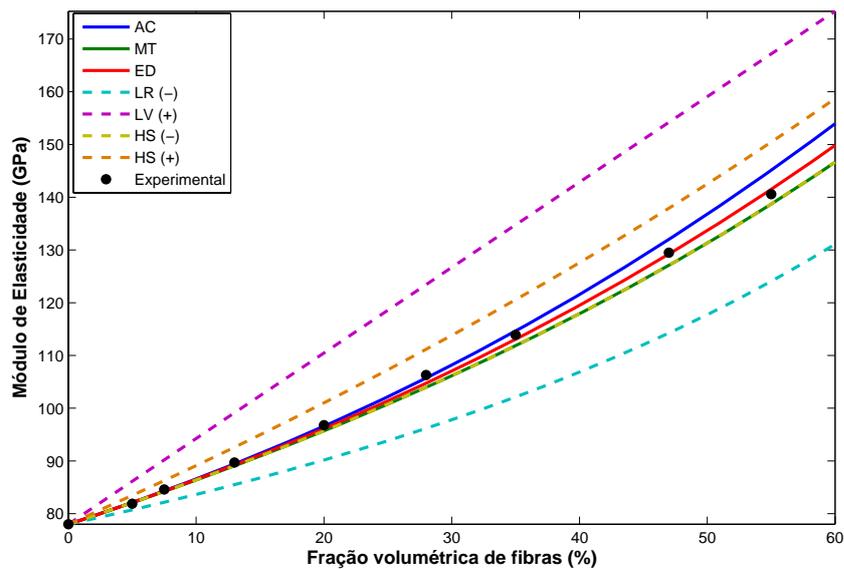


Figura 2.9: Módulo de elasticidade efetivo do compósito particulado.

Como se pode observar, os resultados obtidos através dos modelos micromecânicos apresentam boas estimativas para o módulo elástico efetivo do compósito, principalmente para uma fração volumétrica de inclusão pequena. Dentre todos os modelos analisados, o Esquema Diferencial apresenta melhor concordância com os resultados oriundos de testes experimentais.

O modelo de Mori-Tanaka coincide com o limite inferior de Hashin-Shtrikman. Isto acontece quando o material da matriz é menos rígido do que o das inclusões (Li; Wang, 2005 apud Cavalcante, 2006). Este comportamento é alterado quando se admite que o material da matriz é mais rígido do que o das inclusões, sendo neste caso, o limite superior de Hashin-Shtrikman equivalente ao modelo de Mori-Tanaka.

2.4.2 Mistura Asfáltica

Neste exemplo, o módulo elástico efetivo de uma mistura asfáltica foi determinado por Evangelista Junior *et al.* (2003) através do Método dos Elementos Finitos. A estratégia utilizada para a predição numérica dos parâmetros elásticos do material efetivo é apresentada a seguir: inicialmente concebeu-se uma amostra cilíndrica da mistura, onde uma seção transversal da mesma caracterizava o domínio do problema; através de uma imagem digitalizada desta seção, determinou-se a geometria do EVR; em seguida, uma malha de elementos finitos bidimensionais foi automaticamente gerada; aplicou-se um estado de deslocamento uniforme no topo do EVR (Figura 2.10); e finalmente obteve-se o módulo elástico efetivo da mistura aplicando-se a Equação (2.2).

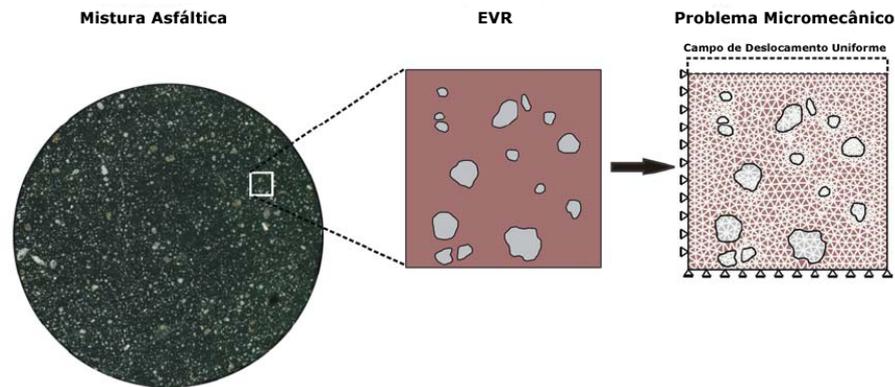


Figura 2.10: Formulação do problema micromecânico (Adaptado de Evangelista Junior *et al.* (2003)).

Neste estudo, considera-se uma fração volumétrica de agregados de 8,73% e 91,27% de ligante asfáltico. Para as análises micromecânicas os parâmetros dos constituintes da mistura são assumidos como elásticos e seus valores estão representados na Tabela 2.2.

Tabela 2.2: Parâmetros elásticos dos constituintes da mistura asfáltica.

Constituintes	Módulo de Elasticidade (MPa)	Coefficiente de Poisson
Agregados	40,50	0,20
Ligante asfáltico	1,32	0,30

A Tabela 2.3 apresenta uma comparação entre os valores dos módulos de elasticidade efetivos obtidos através dos modelos micromecânicos com o resultado encontrado por Evangelista Junior *et al.* (2003) por meio do MEF.

Tabela 2.3: Módulo elástico efetivo da mistura asfáltica em MPa.

MEF	AC	MT	ED	LR	LV	HS(-)	HS(+)
1,570	1,581	1,559	1,569	1,442	4,772	1,559	3,189

Percebe-se uma boa aproximação entre os resultados determinados pelos modelos micromecânicos e os obtidos numericamente através do MEF, destacando-se mais uma vez o Esquema Diferencial. Conforme comentado no exemplo anterior, os valores encontrados com o modelo de Mori-Tanaka coincidem com o limite inferior de Hashin-Shtrikman.

2.4.3 Sólido Fissurado

Este exemplo trata da determinação de propriedades elásticas efetivas de uma rocha composta predominantemente por quartzo e dotada de fissuras em forma de elipsóides. Os

módulos volumétrico e de cisalhamento dos constituintes elásticos utilizados nas análises estão especificados na Tabela 2.4.

Tabela 2.4: Parâmetros elásticos da rocha e das inclusões.

Constituintes	Módulo Volumétrico (GPa)	Módulo de Cisalhamento (GPa)
Rocha	37	44
Fissuras (vazios)	0	0

Nas Figuras 2.11(a) e 2.11(b) encontram-se representados os módulos volumétrico e de cisalhamento da rocha em função da variação de sua porosidade, considerando-se três casos para os fatores de forma das inclusões ($r = 0,01, 0,05, 0,10$).

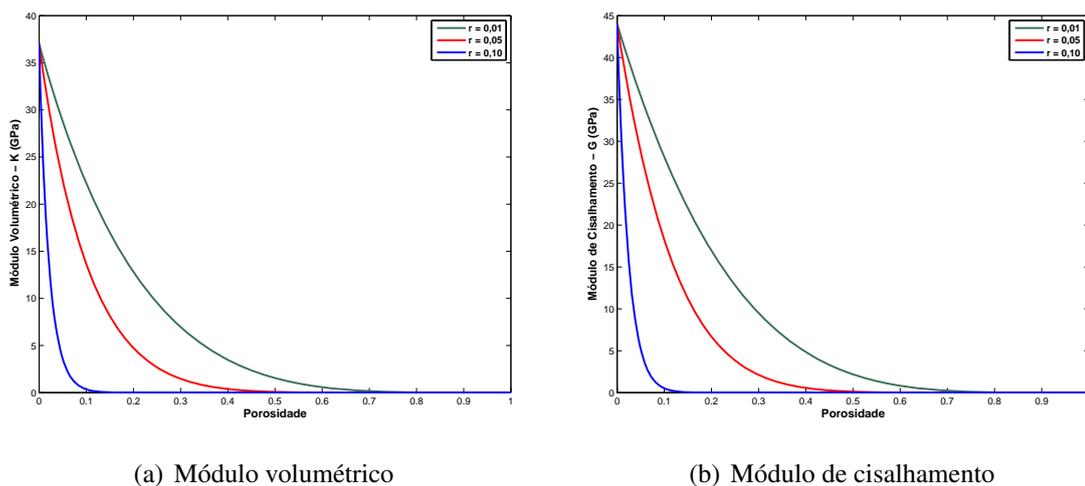


Figura 2.11: Variação das propriedades elásticas efetivas da rocha fissurada com a porosidade.

Os parâmetros de rigidez efetiva da rocha sofrem bastante influência da geometria das fissuras, apresentando valores mais elevados para o caso de fissuras achatadas ($r = 0,01$). Com isso, constata-se neste problema, que o aumento da relação de aspecto da fissura conduz à uma maior degradação do material, envolvendo valores mais baixos para a rigidez efetiva considerando a mesma fração volumétrica de fissuras.

3 *Estimativas de Erro de Modelagem*

A modelagem de estruturas de materiais heterogêneos, em geral, é mais complexa do que aquela que trata das tradicionais estruturas de materiais homogêneos. Isto se justifica pela complexidade inerente à microestrutura do material, a qual pode tornar inviável a solução exata do problema por motivos computacionais ou mesmo pelo desconhecimento de suas características mecânicas e geométricas. Para contornar o problema, na prática, costuma-se utilizar a estratégia de homogeneização do material, a qual consiste em substituir a microestrutura real por outra homogeneizada e com propriedades efetivas equivalentes. No entanto, ao se empregar tal processo de homogeneização, o modelo resultante não permite a captura de muitas informações locais que podem ser cruciais para uma descrição completa do comportamento estrutural. Por outro lado, a substituição do material real por outro homogêneo equivalente introduz erros de modelagem, ou seja, erros relacionados com aspectos físicos do problema, tais como os apresentados em Zohdi *et al.* (1996) e Oden & Vemaganti (2000). Desta forma, o controle de tais erros se apresenta como uma necessidade vital para que os resultados da análise, embora aproximados, sejam representativos do problema real.

Neste capítulo são apresentados teoremas que permitem obter estimativas de erros de modelagem globais e locais em problemas elastostáticos lineares.

3.1 **Descrição do Problema**

3.1.1 **Notações e Definições**

Considere um corpo constituído de material elástico e linear cujos pontos materiais ocupam o domínio $\Omega \in \mathbb{R}^N$, $N = 1, 2$ ou 3 , aberto e limitado por um contorno suave Γ . No caso geral, $N = 3$, quando submetido a forças, o corpo se deforma, apresentando um campo vetorial de deslocamentos $\mathbf{u}(x_1, x_2, x_3)$ com componentes $u_i(x_1, x_2, x_3)$ pertencentes ao espaço normado de funções $H^m(\Omega)$, $m \geq 0$. O símbolo $H^m(\Omega)$, tal como apresentado em Zohdi *et al.* (1996), representa o espaço das funções com derivadas parciais de ordem $\leq m$ pertencentes a $L^2(\Omega)$, o qual consiste no espaço de funções com quadrado integrável em Ω . Assim, $\mathbf{u} \in \mathbf{H}^m(\Omega) =$

$(H^m(\Omega))^N$, ou seja, ao espaço das funções vetoriais cujas componentes pertencem a $H^m(\Omega)$. Além disto, as funções \mathbf{u} devem necessariamente pertencer ao conjunto $\{\hat{\mathbf{u}}\} + \mathbf{V}(\Omega)$, onde:

$$\mathbf{V}(\Omega) \stackrel{\text{def}}{=} \{\mathbf{v} : \mathbf{v} \in \mathbf{H}^1, \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ em } \Gamma_u\}, \quad (3.1)$$

sendo Γ_u a parte do contorno Γ com deslocamentos prescritos. O contorno do corpo é constituído de duas partes Γ_u e Γ_t , tal que $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t$ e $\Gamma_u \cap \Gamma_t = \emptyset$, sendo Γ_t a parte do contorno Γ com carregamentos prescritos, conforme mostrado na Figura 3.1. As funções $\hat{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ são tais que $\hat{\mathbf{u}}|_{\Gamma_u} = \mathcal{U}$, onde \mathcal{U} representa deslocamentos prescritos sobre Γ_u . Admite-se que o conjunto das funções \mathbf{u} não inclui aquelas representativas de deslocamentos de corpo rígido.

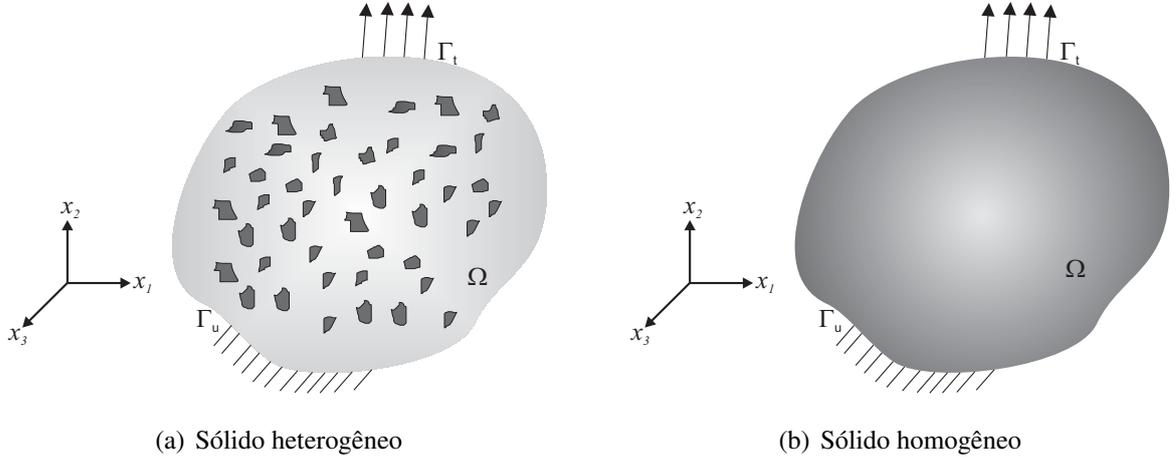


Figura 3.1: Representação dos sistemas estruturais real heterogêneo e homogeneizado.

A energia potencial total do corpo é representada pelo funcional linear $\mathcal{T} : \mathbf{V}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ definido segundo a expressão:

$$\mathcal{T}(\mathbf{v}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \mathcal{B}(\mathbf{v}, \mathbf{v}) - \mathcal{F}(\mathbf{v}), \quad (3.2)$$

onde $\mathcal{B}(\cdot, \cdot)$ representa uma forma bilinear simétrica e positiva-definida $\mathcal{B} : \mathbf{V}(\Omega) \times \mathbf{V}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ definida conforme a expressão:

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \nabla \mathbf{u} \, d\Omega, \quad (3.3)$$

e $\mathcal{F}(\cdot)$ indica um funcional linear $\mathcal{F} : \mathbf{V}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ dado por:

$$\mathcal{F}(\mathbf{v}) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma_t} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, ds. \quad (3.4)$$

Na Equação (3.3), ∇ indica o operador gradiente e \mathbf{E} representa o tensor de elasticidade

do material, o qual para material heterogêneo apresenta variação espacial. Os símbolos \mathbf{f} e \mathbf{t} que figuram na Equação (3.4) são, respectivamente, as forças de massa e de superfície atuantes sobre o corpo.

O tensor de elasticidade do material \mathbf{E} satisfaz as condições de simetria: $E_{ijkl}(\mathbf{x}) = E_{jikl}(\mathbf{x}) = E_{ijlk}(\mathbf{x}) = E_{klij}(\mathbf{x})$, para $\mathbf{x} \in \Omega$, $1 \leq i, j, k, l \leq N$, e as condições de elipticidade uniforme, ou seja, existem constantes reais positivas α_l e α_u tais que para qualquer tensor simétrico de segunda ordem \mathbf{A} ,

$$\alpha_l \mathbf{A} : \mathbf{A} \leq \mathbf{A} : \mathbf{E}(\mathbf{x}) \mathbf{A} \leq \alpha_u \mathbf{A} : \mathbf{A}. \quad (3.5)$$

A notação $(:)$ presente nas Equações (3.3) e (3.5) expressa uma contração de tensores de segunda ordem que, no primeiro caso, representa-se por: $\nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \nabla \mathbf{u} = v_{i,j} E_{ijkl} u_{k,l}$, sendo $v_{i,j} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ e $u_{k,l} = \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$.

3.1.2 O Problema em Escala Refinada

O campo de deslocamentos \mathbf{u} em um corpo de material heterogêneo em equilíbrio estático, como na Figura 3.1(a), é governado pelo princípio dos trabalhos virtuais, o qual estabelece a igualdade entre os trabalhos de forças internas e externas realizados ao longo de deslocamentos virtuais impostos \mathbf{v} . Assim, a obtenção do campo de deslocamento \mathbf{u} consiste na solução do seguinte problema elastostático de valor de contorno:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Achar } \mathbf{u} \in \{\hat{\mathbf{u}}\} + \mathbf{V}(\Omega) \text{ tal que} \\ \mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathcal{F}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \end{array}} \quad (3.6)$$

onde $\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ representa o trabalho virtual das forças internas e $\mathcal{F}(\mathbf{v})$ o trabalho virtual das forças externas. Salienta-se que, observadas as condições anteriores impostas sobre o tensor de elasticidade e funções, a solução deste problema é única e corresponde à minimização do funcional energia potencial dado pela Equação (3.2).

Neste problema, todos os detalhes microestruturais são considerados na análise da estrutura real de material heterogêneo.

3.1.3 O Problema Homogeneizado

Considerando as dificuldades para a descrição do comportamento de estruturas reais de materiais heterogêneos levando em conta todos os detalhes da microestrutura, é

comum se recorrer a métodos de homogeneização, tais como aqueles baseados na teoria micromecânica de campos médios (Nemat-Nasser; Hori, 1999; Zohdi; Wriggers, 2005). Através destes procedimentos, o material real da estrutura é substituído por um material homogêneo equivalente. Como resultado da análise estrutural nestas condições, tem-se campos macromecânicos médios de tensões, deformações e deslocamentos, não permitindo a obtenção de informações a respeito de valores locais destas grandezas.

De forma similar ao problema (3.6), o campo de deslocamentos \mathbf{u}^h em um corpo de material homogêneo equivalente, apresentado na Figura 3.1(b), também é governado pelo princípio dos trabalhos virtuais e representa a solução do seguinte problema elastostático de valor de contorno:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Achar } \mathbf{u}^h \in \{\hat{\mathbf{u}}\} + \mathbf{V}(\Omega) \text{ tal que} \\ \mathcal{B}^h(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}) = \mathcal{F}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \end{array}} \quad (3.7)$$

onde

$$\mathcal{B}^h(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E}^h \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega, \quad (3.8)$$

corresponde à *forma bilinear homogeneizada* e \mathbf{E}^h indica o *tensor de elasticidade efetivo ou homogeneizado*.

As propriedades homogeneizadas representadas pelo tensor de elasticidade \mathbf{E}^h podem ser constantes ao longo de todo o domínio do corpo, como no caso de materiais homogêneos, ou constantes por região, como no caso de materiais laminados.

Vale ressaltar que as mesmas condições de contorno e de carregamento consideradas no corpo de material heterogêneo são impostas sobre o corpo homogeneizado.

3.2 Análise do Erro de Modelagem

A solução do problema homogeneizado \mathbf{u}^h envolve erros de modelagem em relação àquela correspondente ao problema em escala refinada e dado pela Equação (3.6). Tais erros podem ser representados matematicamente pela diferença entre as soluções dos problemas (3.6) e (3.7), conforme definido na expressão:

$$\mathbf{e}^h \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u} - \mathbf{u}^h. \quad (3.9)$$

Desta forma, a magnitude do erro de modelagem está intimamente relacionada com a qualidade da solução homogeneizada do problema. Em geral, a solução \mathbf{u}^h não pode ser determinada

analiticamente e uma aproximação numérica $\mathbf{u}^{h,q}$ deve ser utilizada para a determinação de tal solução. Com isso, pode-se escrever o erro de modelagem como:

$$\mathbf{e}^h \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u} - \mathbf{u}^{h,q}. \quad (3.10)$$

Entretanto, dois tipos de erro decorrem da aproximação empregada para a obtenção da solução do problema homogeneizado, um decorrente da imposição de propriedades homogeneizadas equivalentes e outro devido a discretização inerente ao processo de aproximação finita do problema homogeneizado. É importante destacar que os erros considerados neste trabalho não são aqueles inerentes à discretização do domínio usada para a determinação da solução numérica do problema, mas sim erros relacionados exclusivamente com a substituição da microestrutura real do material por outra homogeneizada. Então, na definição dos modelos numéricos, para reduzir o efeito do erro de discretização, são empregadas malhas de elementos finitos com um grau de refinamento bastante elevado. Informações sobre a caracterização do erro decorrente da discretização do problema podem ser encontradas em Ainsworth & Oden (1997).

Para simplificar o procedimento das estimativas de erro a serem apresentadas nas seções seguintes, define-se como *funcional residual* $\mathcal{R}_{\mathbf{g}} : \mathbf{V}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ em relação a uma dada função $\mathbf{g} \in \mathbf{V}(\Omega)$, a seguinte expressão:

$$\mathcal{R}_{\mathbf{g}}(\mathbf{v}) = - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \mathcal{I} \nabla \mathbf{g} \, d\Omega, \quad (3.11)$$

onde \mathcal{I} é definido em termos do tensor identidade \mathbf{I} e dos tensores de elasticidade \mathbf{E} e \mathbf{E}^h :

$$\mathcal{I} = (\mathbf{I} - \mathbf{E}^{-1} \mathbf{E}^h). \quad (3.12)$$

O funcional residual é bastante útil na caracterização do erro de modelagem \mathbf{e} , como demonstrado no Apêndice A.1, satisfaz a condição:

$$\mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{v}) = \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{v}) = - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega. \quad (3.13)$$

Desta forma, o funcional residual $\mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{v})$ representa a diferença entre os valores dos trabalhos das forças internas correspondentes aos campos de deslocamentos \mathbf{u} e \mathbf{u}^h , respectivamente, impostos sobre o sólido heterogêneo com sua microestrutura real e ao longo do campo de deslocamento virtual \mathbf{v} . Assim, quanto mais próximos estiverem as soluções dos problemas (3.6) e (3.7) menor é o valor do funcional residual.

A forma bilinear $\mathcal{B}(\cdot, \cdot)$ corresponde a um produto interno definido sobre o espaço das funções admissíveis $\mathbf{V}(\Omega)$. A *norma energia* de uma função $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ é definida por:

$$\|\tilde{\mathbf{u}}\|_{E(\Omega)} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\mathcal{B}(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}})}. \quad (3.14)$$

Na definição acima, o subscrito $E(\Omega)$ indica que no cálculo da norma energia deve ser usado o tensor de elasticidade do material heterogêneo real em todo o domínio Ω .

3.3 Erro de Modelagem Global

Zohdi *et al.* (1996) e Vemaganti (2000) mostraram que é possível estabelecer limites superior e inferior para o erro de modelagem global expresso em termos de norma energia. Nesta seção, apresenta-se um teorema que estabelece tais limites em função do campo de deslocamento do problema homogeneizado e dos tensores de elasticidade \mathbf{E} e \mathbf{E}^h , assim como um corolário que permite estender estes limites para o caso de qualquer função admissível, não necessariamente solução do problema elastostático (Vemaganti, 2000).

Teorema 3.1. Sejam \mathbf{u} e \mathbf{u}^h as soluções dos problemas de valor de contorno (3.6) e (3.7), respectivamente, então:

$$\psi_{inf} \leq \|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)} = \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)} \leq \psi_{sup}, \quad (3.15)$$

sendo

$$\psi_{inf} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{u}^h)|}{\|\mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)}} \text{ e } \psi_{sup} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{B}(\mathcal{I}\mathbf{u}^h, \mathcal{I}\mathbf{u}^h)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.16)$$

Nota-se que as expressões dos limites inferior e superior do erro de modelagem global envolvem apenas a solução homogeneizada \mathbf{u}^h e dos tensores que caracterizam as microestruturas do problema em escala refinada \mathbf{E} e homogeneizado \mathbf{E}^h . A demonstração deste teorema encontra-se no Apêndice A.2.

Corolário 3.1. Sejam \mathbf{u} e \mathbf{u}^h as soluções dos problemas de valor de contorno (3.6) e (3.7), respectivamente, e uma função qualquer $\mathbf{z} \in \mathbf{V}(\Omega) \setminus \{\mathbf{0}\}$, então:

$$\psi_{inf}^z \leq \|\mathbf{e}^z\|_{E(\Omega)} = \|\mathbf{u} - \mathbf{z}\|_{E(\Omega)} \leq \psi_{sup}^z, \quad (3.17)$$

sendo

$$\psi_{inf}^z \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathcal{F}(\mathbf{z}) - \mathcal{B}(\mathbf{z}, \mathbf{z})|}{\|\mathbf{z}\|_{E(\Omega)}} \text{ e } \psi_{sup}^z \stackrel{\text{def}}{=} \{2[\mathcal{I}(\mathbf{z}) - \mathcal{I}(\mathbf{u}^h)] + \psi_{sup}^2\}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.18)$$

com \mathcal{T} definido na Equação (3.2).

Um aspecto importante deste corolário é que ele permite a redução do erro de modelagem através da consideração de funções admissíveis resultantes da adição de perturbações à solução homogeneizada. Este fato proporciona o uso de análises adaptativas visando-se a obtenção de campos de deslocamentos que correspondam a menores erros de modelagem (Oden; Vemaganti, 2000).

Estas estimativas são de natureza global e estão relacionadas com a magnitude do erro de modelagem em todo o domínio do corpo. Entretanto, elas não são capazes de capturar efeitos locais associados à microestrutura do material. Para contornar esta deficiência existe uma recente formulação que fornece estimativas do erro de modelagem local (Vemaganti; Oden, 2001) a qual é apresentada na seção seguinte.

3.4 Erro de Modelagem Local

As estimativas baseadas em norma energia podem ser insensíveis a diversos aspectos locais da solução em escala refinada. O erro de modelagem em tensões médias nas interfaces ou superfícies das inclusões, por exemplo, podem não ser detectados pelas estimativas em termos de norma energia, a menos que todas as informações do problema em escala refinada sejam teoricamente definidas no modelo matemático ou computacional. Para controlar a acurácia dos modelos que levam em consideração tais aspectos locais são necessárias estimativas de erro de modelagem local tais como as apresentadas nos trabalhos de Oden & Vemaganti (2000), Vemaganti & Oden (2001) e Romkes *et al.* (2006).

Esta formulação é aplicada para estimativas do erro de modelagem em grandezas físicas, denominadas *quantidades de interesse*, que possam ser expressas como um funcional linear contínuo $\mathcal{L} : \mathbf{V}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ sobre o espaço $\mathbf{V}(\Omega)$. Como exemplo de tais quantidades podem ser citadas tensões ou deformações médias sobre uma pequena região ω do domínio Ω . A seguir são apresentados alguns exemplos de funcionais lineares que caracterizam quantidades de interesse que podem ser empregados na avaliação de erro de modelagem local:

- $\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \varepsilon_{11}(\mathbf{v}) \, d\omega$ (média sobre ω da deformação linear ε_{11});
- $\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{22}(\mathbf{v}) \, d\omega$ (média sobre ω da tensão normal σ_{22});
- $\mathcal{L}(v) = v(x_o, y_o)$ (deslocamento sobre um ponto de coordenadas (x_o, y_o)).

Para a quantidade de interesse caracterizada pelo funcional \mathcal{L} , o erro de modelagem local induzido pela substituição da microestrutura real por outra homogeneizada é definido como segue:

$$\mathcal{L}(\mathbf{e}^h) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}(\mathbf{u}) - \mathcal{L}(\mathbf{u}^h). \quad (3.19)$$

3.4.1 O Problema Adjunto

O problema adjunto é utilizado como uma etapa intermediária para a estimativa do erro de modelagem local em quantidades de interesse. Neste problema, a quantidade de interesse se apresenta de forma similar ao trabalho virtual de forças externas representado na Equação (3.6), conforme mostrado abaixo. Se os funcionais aqui empregados não forem contínuos e lineares, a solução deste problema pode não ter sentido físico. Por exemplo, seria inadequada a identificação de tensões ou deslocamentos em um ponto do domínio Ω como quantidades de interesse, pois as tensões podem ser infinitas e os deslocamentos podem não existir no espaço das funções admissíveis $\mathbf{V}(\Omega)$.

O Problema Adjunto em Escala Refinada

Sendo \mathcal{L} um funcional linear contínuo sobre $\mathbf{V}(\Omega)$, define-se o problema adjunto em escala refinada como:

$$\begin{array}{l} \text{Achar } \mathbf{w} \in \mathbf{V}(\Omega) \text{ tal que} \\ \mathcal{B}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \mathcal{L}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \end{array} \quad (3.20)$$

A função \mathbf{w} é conhecida como *função de influência do problema em escala refinada*.

O Problema Adjunto Homogeneizado

O problema apresentado em (3.20) possui a mesma complexidade daquele expresso em (3.6). Uma forma de contornar as dificuldades consiste em se recorrer à estratégia de homogeneização do material resultando o seguinte problema:

$$\begin{array}{l} \text{Achar } \mathbf{w}^h \in \mathbf{V}(\Omega) \text{ tal que} \\ \mathcal{B}^h(\mathbf{w}^h, \mathbf{v}) = \mathcal{L}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \end{array} \quad (3.21)$$

A função \mathbf{w}^h é conhecida como *função de influência do problema homogeneizado*.

Através do Teorema 3.1, pode-se estabelecer os seguintes limites para o erro de modelagem na função de influência $\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)}$:

$$\bar{\Psi}_{inf} \leq \|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)} = \|\mathbf{w} - \mathbf{w}^h\|_{E(\Omega)} \leq \bar{\Psi}_{sup}, \quad (3.22)$$

sendo

$$\bar{\Psi}_{inf} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathcal{R}_{\mathbf{w}^h}(\mathbf{w}^h)|}{\|\mathbf{w}^h\|_{E(\Omega)}} \text{ e } \bar{\Psi}_{sup} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{B}(\mathcal{I}\mathbf{w}^h, \mathcal{I}\mathbf{w}^h)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.23)$$

3.5 Limites do Erro de Modelagem Local

Teorema 3.2. Sejam \mathbf{u}^h e \mathbf{w}^h as soluções dos problemas de valor de contorno (3.7) e (3.21), respectivamente, então:

$$\eta_{inf} \leq \mathcal{L}(\mathbf{e}^h) \leq \eta_{sup}, \quad (3.24)$$

onde

$$\eta_{inf} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{4}(\eta_{inf}^+)^2 - \frac{1}{4}(\eta_{sup}^-)^2 + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h), \quad (3.25)$$

$$\eta_{sup} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{4}(\eta_{sup}^+)^2 - \frac{1}{4}(\eta_{inf}^-)^2 + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h), \quad (3.26)$$

com

$$\eta_{inf}^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathcal{R}_{\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h}(\mathbf{u}^h + \theta^{\pm}\mathbf{w}^h)|}{\|\mathbf{u}^h + \theta^{\pm}\mathbf{w}^h\|}, \quad (3.27)$$

$$\eta_{sup}^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{s^2\psi_{sup}^2 \pm 2\mathcal{B}(\mathcal{I}\mathbf{u}^h, \mathcal{I}\mathbf{w}^h) + s^{-2}\bar{\psi}_{sup}^2}, \quad (3.28)$$

onde ψ_{sup} e $\bar{\psi}_{sup}$ são definidos, respectivamente, nas Equações (3.16) e (3.23) e θ^{\pm} é dado por:

$$\theta^{\pm} = \frac{\mathcal{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{w}^h)\mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h) - \mathcal{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h)\mathcal{R}_{\mathbf{w}^h}(s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h)}{\mathcal{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{w}^h)\mathcal{R}_{\mathbf{w}^h}(s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h) - \mathcal{B}(\mathbf{w}^h, \mathbf{w}^h)\mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h)}, \quad (3.29)$$

para um fator de escala s real positivo e arbitrário. A prova deste teorema encontra-se no Apêndice A.3.

Baseando-se em experimentos numéricos, Oden & Vemaganti (2000) sugerem o uso das seguintes expressões como melhores estimativas para os limites inferior e superior do erro de modelagem local:

$$\eta_{inf,est} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{4}(\eta_{inf}^+)^2 - \frac{1}{4}(\eta_{inf}^-)^2 + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h), \quad (3.30)$$

$$\eta_{sup,est} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{4}(\eta_{sup}^+)^2 - \frac{1}{4}(\eta_{sup}^-)^2 + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h). \quad (3.31)$$

O fator de escala s é atribuído como sendo o balanço das contribuições do problema original (primitivo) e do problema adjunto. No Apêndice A.4, demonstra-se que o valor ótimo para este fator de escala é dado por:

$$s = \sqrt{\frac{\|\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)}}{\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)}}} \quad (3.32)$$

No entanto, os valores de $\bar{\mathbf{e}}^h$ e \mathbf{e}^h não são conhecidos exatamente e, Oden & Vemaganti (2000), propõem a seguinte aproximação:

$$s \approx \sqrt{\frac{\bar{\Psi}_{sup}}{\Psi_{sup}}}, \quad (3.33)$$

sendo os valores de $\bar{\Psi}_{sup}$ e Ψ_{sup} estabelecidos, respectivamente, pelas Equações (3.23) e (3.16).

Embora não esteja explicitado em Oden & Vemaganti (2000), a expressão (3.33) foi proposta com base na observação de resultados obtidos em problemas para os quais os limites superiores do erro de modelagem global apresentam-se como boa aproximação do correspondente erro de modelagem. No entanto, constata-se que nem sempre isto acontece e que, no caso de compósitos, tais valores dependem da rigidez relativa inclusão/matriz. Como mostrado em problemas apresentados no Capítulo 5, em casos de compósitos com matriz mais rígidas que as inclusões, os valores dos erros de modelagem global estão mais próximos de seus respectivos limites inferiores.

Observação: o funcional $\mathcal{L}(\mathbf{e}^h) = \mathcal{L}(\mathbf{u}) - \mathcal{L}(\mathbf{u}^h)$ nem sempre representa um erro em uma quantidade de interesse, particularmente quando o tensor de elasticidade \mathbf{E} aparece na definição de \mathcal{L} . Por exemplo, suponha que a quantidade de interesse seja representada pela tensão normal média na direção-1 sobre uma região ω :

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{v}) \, d\omega = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} (E_{1111} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + E_{1122} \frac{\partial v_2}{\partial x_2}) \, d\omega \quad (3.34)$$

onde E_{1111} e E_{1122} são componentes do tensor de elasticidade do material correspondente ao problema em escala refinada. Então,

$$\mathcal{L}(\mathbf{e}^h) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{u}) - \sigma_{11}(\mathbf{u}^h) \, d\omega. \quad (3.35)$$

Logo, $\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)$ é o erro na tensão associada às deformações relativas ao problema homogeneizado $\nabla \mathbf{u}^h$ sobre o material relativo ao problema em escala refinada. O erro na componente da tensão média σ_{11} no modelo homogeneizado é dado por:

$$\begin{aligned}
 \text{Erro na tensão} &= \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{u}) - \sigma_{11}^h(\mathbf{u}^h) \, d\omega \\
 &= \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{u}) \, d\omega - \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{u}^h) \, d\omega \\
 &+ \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{u}^h) \, d\omega - \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}^h(\mathbf{u}^h) \, d\omega \\
 &= \underbrace{\frac{1}{\omega} \int_{\omega} [\sigma_{11}(\mathbf{u}) - \sigma_{11}(\mathbf{u}^h)] \, d\omega}_{\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)} + \frac{1}{\omega} \int_{\omega} [\sigma_{11}(\mathbf{u}^h) - \sigma_{11}^h(\mathbf{u}^h)] \, d\omega.
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

O último termo da Equação (3.36) pode ser calculado diretamente, uma vez que esta parcela somente depende dos tensores de elasticidade \mathbf{E} e \mathbf{E}^h e da solução \mathbf{u}^h que são conhecidos.

Em Oden & Vemaganti (2000) são introduzidas estratégias adaptativas para o controle do erro $\mathcal{L}(\mathbf{u}^h)$. Nestas estratégias a última parcela da Equação (3.36), normalmente, se aproxima de zero, uma vez que as propriedades elásticas caracterizadas pelos tensores \mathbf{E} e \mathbf{E}^h tendem a se aproximar.

4 *Sistema Computacional*

Neste capítulo, descreve-se de forma sintetizada a infra-estrutura computacional utilizada no presente trabalho. Para a realização das análises numéricas, desenvolveu-se em linguagem de programação C++ (Stroustrup, 2000) e fazendo-se uso dos recursos de orientação a objetos, o sistema computacional intitulado MODERE (*Software for Modeling Error Estimation*). A linguagem de programação escolhida se deve principalmente ao elevado grau de complexidade computacional requerido nos problemas de estruturas de materiais heterogêneos.

O MODERE é implementado de forma que possa ser facilmente extensível, requerendo apenas de alterações pontuais e bem orientadas. Na Figura 4.1 está representado o diagrama de associação de classes do sistema computacional concebido.

As classes representadas em branco constituem um conjunto de tarefas básicas presentes na maioria dos códigos computacionais que fazem uso do Método dos Elementos Finitos. Entretanto, destacam-se apenas as classes representadas em cinza por representarem as tarefas principais do sistema computacional.

Classe Homogenization

Nesta classe estão implementados os métodos responsáveis pela determinação de propriedades elásticas efetivas do material homogeneizado.

Classe ModelingError

Desta classe derivam as classes **Global** e **Local** que são responsáveis, respectivamente, pelas estimativas de erro de modelagem global e local. A classe **Adjoint** é responsável pela obtenção das funções de influência utilizadas na classe **Local** e, por isso, existe uma associação entre elas.

Assim, pode-se organizar o MODERE em três módulos principais, os quais possuem funções responsáveis pela execução de tarefas específicas.

Módulo 1: Determinação de Propriedades Efetivas

Neste módulo, determinam-se as propriedades elásticas efetivas de materiais compósitos através dos métodos de homogeneização baseados na teoria de campos médios (Auto-Consistente, Mori-Tanaka, Esquema Diferencial) e por meio de limites (Voigt-Reuss e Hashin-Shtrikman). As propriedades do material efetivo podem ser calculadas para diferentes frações volumétricas de inclusão ou para distintos valores de rigidez relativa para os materiais da matriz e das inclusões.

Módulo 2: Geração da Malha de Elementos Finitos

Para a realização das análises numéricas, o MODERE precisa de um programa adicional que permita a geração da malha de elementos finitos do modelo computacional. Assim sendo, utiliza-se, neste estudo, a plataforma computacional MTOOL (Lira, 1998) para viabilizar a simulação numérica.

Nas análises, apenas é gerada a malha do problema em escala refinada, sendo esta utilizada também para o problema homogeneizado. Vale ressaltar que as malhas de elementos finitos geradas são bastante refinadas para reduzir a influência do erro numérico nas simulações.

Módulo 3: Estimativa dos Limites

A partir da malha de elementos finitos gerada, obtêm-se o campo de deslocamento relativo ao problema homogeneizado e os tensores de elasticidade dos problemas em escala refinada e homogeneizado. Com estas informações, podem-se estimar os limites do erro de modelagem global e em quantidades físicas de interesse.

A Figura 4.2 mostra um diagrama no qual está representada a interação entre os módulos do sistema computacional MODERE.

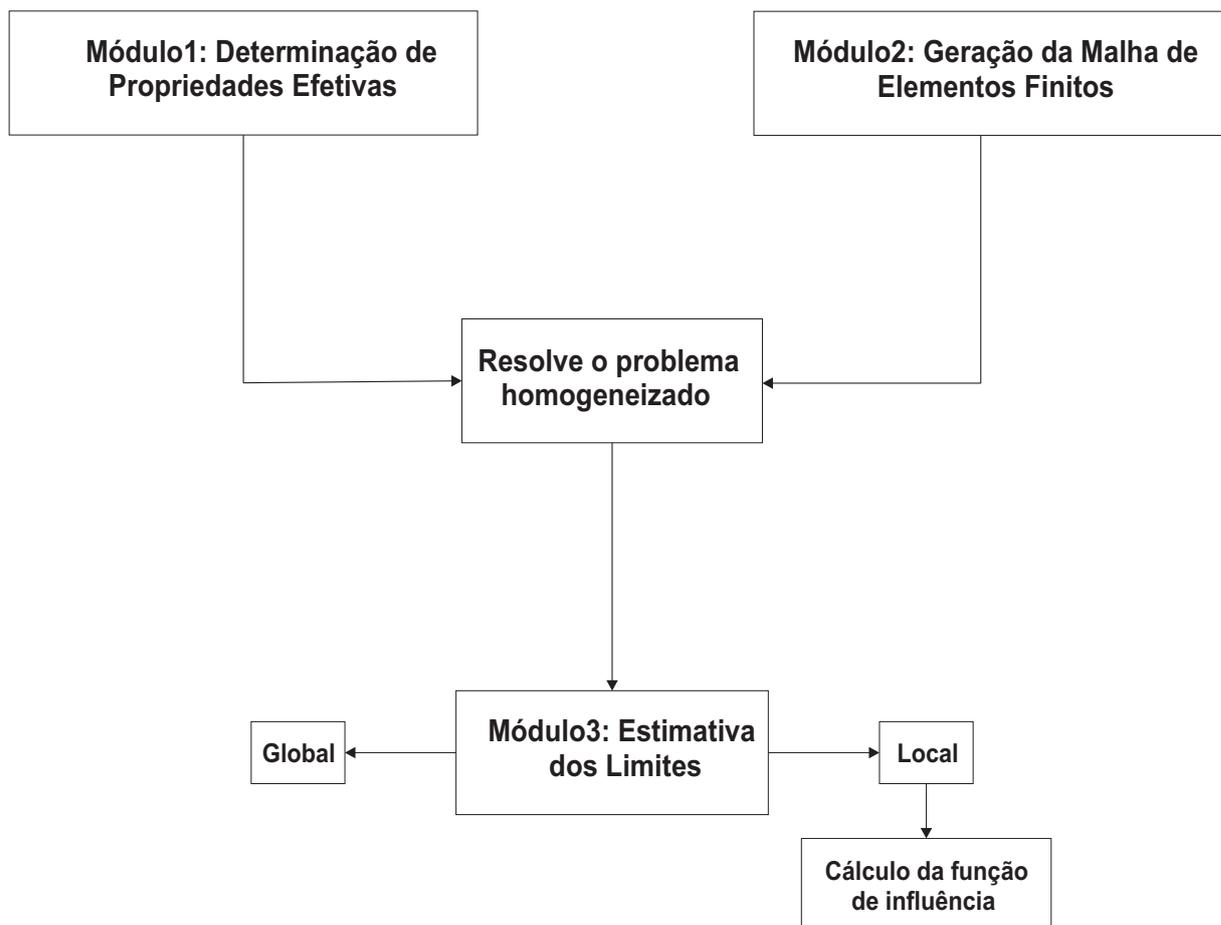


Figura 4.2: Representação da interação entre os módulos do MODERE.

5 Aplicações Numéricas: Erros de Modelagem

Neste capítulo são realizadas análises de erros de modelagem em quatro casos de estruturas constituídas por materiais heterogêneos. Como forma de verificar os resultados dos teoremas apresentados no Capítulo 3, consideram-se três problemas em escala refinada com soluções analíticas conhecidas e um outro resolvido e divulgado no trabalho de Oden & Vemaganti (2000). As estimativas de erro neste último caso são obtidas com o uso exclusivo do código computacional MODERE, descrito no Capítulo 4.

5.1 Barra de Material Heterogêneo

Este problema consiste de uma barra de comprimento total $L = 0,60\text{m}$ e área da seção transversal $A = 4 \times 10^{-4}\text{m}^2$, constituída de dois materiais homogêneos e isotrópicos, fixada em sua extremidade esquerda e sujeita a uma carga axial $P = 600\text{kN}$, conforme mostrado na Figura 5.1. O campo de deslocamento é admitido uniaxial e a carga P corresponde à resultante do carregamento uniformemente distribuído ao longo da seção transversal. Sob estas condições, a solução analítica apresenta facilidade em sua obtenção e, sendo assim, todas as estimativas de erros de modelagem são determinadas analiticamente.

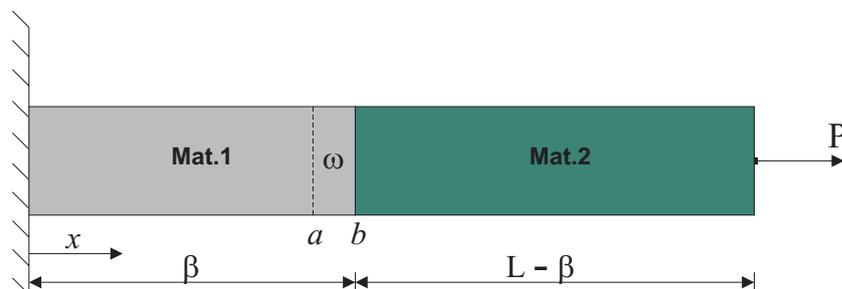


Figura 5.1: Barra de material heterogêneo.

Com as condições geométricas impostas para os materiais constituintes da barra, este problema pode não ser estatisticamente homogeneizável. No entanto, o objetivo deste estudo não é verificar aspectos relativos a homogeneização do material, mas apenas quantificar os

erros de modelagem introduzidos devido a consideração de um material substituto do material heterogêneo real. Sendo assim, obtém-se o módulo elástico efetivo do material através do modelo de Reuss, apresentado na Seção (2.3.1).

Os problemas em escala refinada e homogeneizado são representados, respectivamente, através das seguintes equações diferenciais e condições de contorno:

$$-\frac{d}{dx} \left(E(x)A \frac{du}{dx} \right) = 0, \quad u(0) = 0, \quad (5.1)$$

$$-\frac{d}{dx} \left(E^h A \frac{du^h}{dx} \right) = 0, \quad u^h(0) = 0. \quad (5.2)$$

Estas equações representam a formulação forte dos problemas apresentados nas Equações 3.6 e 3.7, respectivamente.

Conhecendo-se as soluções dos problemas em escala refinada e homogeneizado, faz-se um estudo paramétrico em função da rigidez relativa $\phi = E_{Mat.2}/E_{Mat.1}$ dos erros de modelagem ao longo do domínio $\Omega : (0,L)$ para o caso global e sobre uma pequena região $\omega : (a,b)$ para o caso local em uma quantidade de interesse escolhida. Para tanto, atribui-se ao módulo de elasticidade do material constituinte da porção esquerda da barra o valor $E_{Mat.1} = 2 \times 10^8 \text{ kN/m}^2$ e ao parâmetro $\beta = L/2$.

Estimativas do Erro de Modelagem Global

A substituição da barra de material heterogêneo pela barra de material homogeneizado implica em erro de modelagem. No caso de uma avaliação global, este erro é escrito como mostra expressão:

$$e^h = u - u^h. \quad (5.3)$$

Em termos de norma energia, o erro de modelagem global é dado por:

$$\begin{aligned} \|e^h\|_E(\Omega) &= \int_{\Omega} \left(\frac{du}{dx} - \frac{du^h}{dx} \right) E \left(\frac{du}{dx} - \frac{du^h}{dx} \right) d\Omega = \int_0^{\beta} \left(\frac{du}{dx} - \frac{du^h}{dx} \right) A E_{Mat.1} \left(\frac{du}{dx} - \frac{du^h}{dx} \right) dx + \\ &+ \int_{\beta}^L \left(\frac{du}{dx} - \frac{du^h}{dx} \right) A E_{Mat.2} \left(\frac{du}{dx} - \frac{du^h}{dx} \right) dx. \end{aligned} \quad (5.4)$$

O campo de deslocamento correspondente a barra homogeneizada é usado, de forma similar, para determinar os limites inferior e superior do erro de modelagem global através das Equações (3.16).

A Figura 5.2 mostra a variação do erro de modelagem global em função da rigidez relativa ϕ , bem como dos limites inferior e superior apresentados no Teorema 3.1, ambos calculados

usando a solução analítica. Nota-se uma boa concordância entre o erro exato e o limite superior para os diversos valores de ϕ , o que não ocorre com o limite inferior. Percebe-se que quando ϕ se aproxima do valor unitário todas as estimativas convergem para o valor zero. Isto é esperado, uma vez que para $\phi = 1$, os módulos de elasticidade dos dois materiais que constituem o problema são iguais, tornando o problema homogeneizado exatamente igual ao problema em escala refinada.

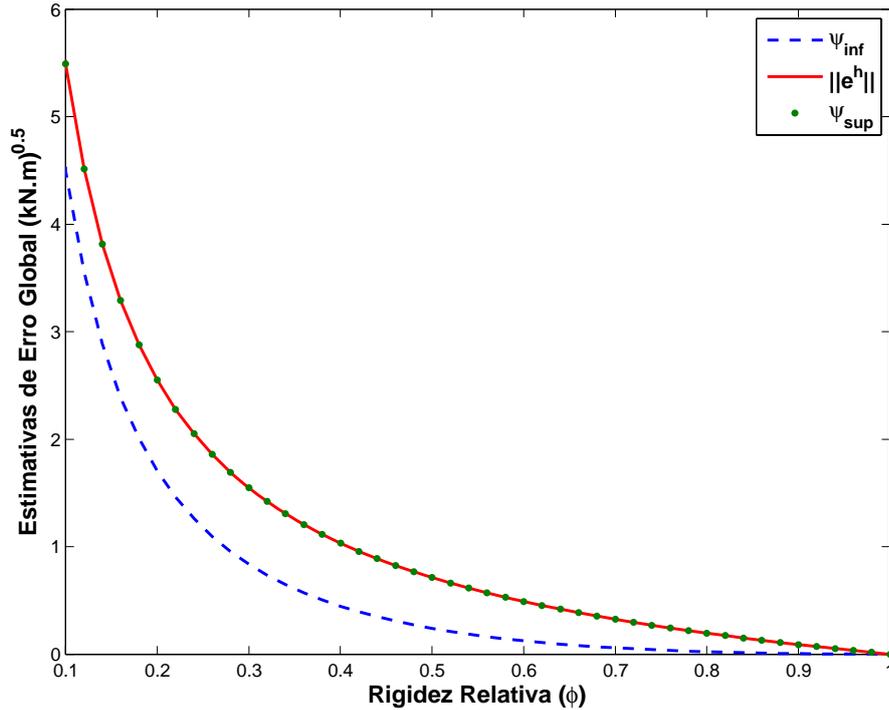


Figura 5.2: Estimativas do erro de modelagem global em função da rigidez relativa (ϕ).

Estimativas do Erro de Modelagem Local

Para analisar a eficiência do Teorema de erro de modelagem local, a média dos deslocamentos sobre uma pequena região ω : ($a = 0,20\text{m}$, $b = 0,30\text{m}$) da barra é escolhida como quantidade de interesse, conforme estabelecida pela expressão:

$$\mathcal{L}(v) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} v d\omega = \frac{1}{b-a} \int_a^b vA dx. \quad (5.5)$$

A determinação dos limites do erro de modelagem local em quantidades de interesse requer o conhecimento da solução do problema adjunto, ou seja, a determinação da função de influência. A referida função é obtida através da igualdade entre a forma bilinear \mathcal{B} representativa do trabalho virtual das forças internas e o funcional linear \mathcal{L} correspondente a quantidade de interesse escolhida, conforme a Equação (3.21). Partindo-se dessa igualdade

pode-se chegar à seguinte equação diferencial que corresponde a formulação forte do problema mostrado na Equação (3.21):

$$-\frac{d}{dx} \left(E^h \mathbf{A} \frac{dw^h}{dx} \right) = \frac{\mathcal{H}(x-a) - \mathcal{H}(x-b)}{b-a}, \quad (5.6)$$

onde \mathcal{H} representa a função passo unitário.

A função w^h que figura na Equação (5.6) deve necessariamente pertencer ao espaço das funções cinematicamente admissíveis $\mathbf{V}(\Omega)$. Assim, como condição de contorno para esta equação diferencial impõe-se $w^h(0) = 0$. Conhecendo-se a função de influência relativa ao problema homogeneizado e o campo de deslocamento homogeneizado, determinam-se os limites do erro de modelagem local através das Equações (3.25) e (3.26).

A Figura 5.3 ilustra a variação das estimativas de erro de modelagem local em função da rigidez relativa ϕ . De acordo com os resultados, percebe-se que o erro de modelagem local apresenta-se entre os limites para os diversos valores de rigidez relativa, como propõe o Teorema 3.2. Nota-se que os valores estimados propostos no trabalho de Oden & Vemaganti (2000) ilustram um bom nível de aproximação quando comparados com o erro de modelagem local exato.

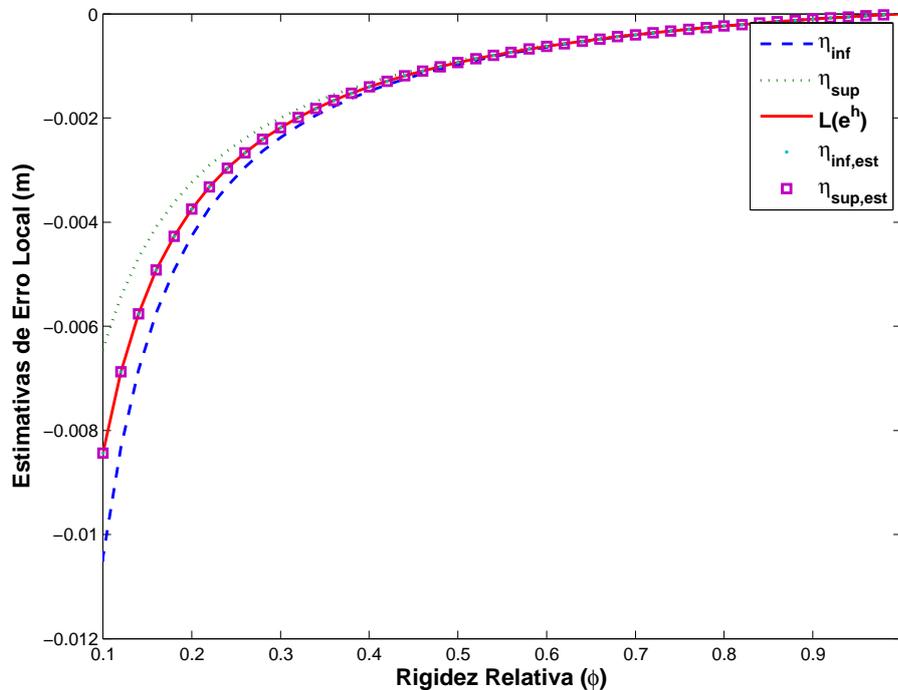


Figura 5.3: Estimativas do erro de modelagem local em função da rigidez relativa (ϕ).

5.2 Tubo de Material com Gradação Funcional

A heterogeneidade da microestrutura dos materiais constituídos por diferentes fases discretas, como no caso dos compósitos reforçados por fibras, particulados e laminados, caracteriza-se por variações bruscas nas propriedades termo-mecânicas, o que pode resultar em uma grande concentração de tensão e conseqüentemente no surgimento de fraturas localizadas. Os materiais com gradação funcional (*Functionally Graded Material - FGM*), por apresentarem variação gradual em suas propriedades termo-mecânicas, têm encontrado variadas e relevantes aplicações industriais, incentivando os estudos voltados para a modelagem computacional dos mesmos.

A Figura 5.4 mostra um tubo de parede espessa constituído de material com gradação funcional, submetido à condições de contorno uniforme de pressão, representadas pelos valores P_I e P_E aplicadas nos bordos interno e externo, respectivamente. Estas condições de contorno produzem um estado axissimétrico de tensão e de deformação o que permite expressar a solução do problema em função apenas da posição radial do tubo.

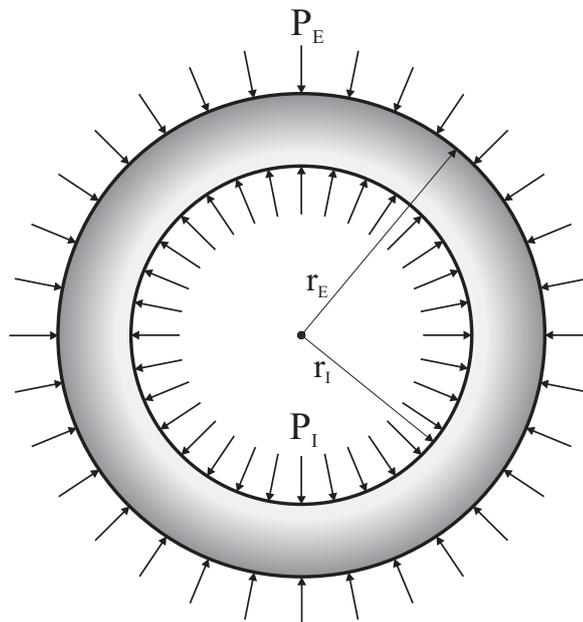


Figura 5.4: Tubo de FGM.

A solução analítica do tubo de parede espessa de FGM para uma análise termo-mecânica em estado plano de deformação é encontrada no trabalho de Jabbari *et al.* (2002). Para esta solução, as constantes elásticas do material são definidas pelas expressões a seguir:

$$E(r) = E_0 r^m \text{ e } \nu(r) = \nu_0, \quad (5.7)$$

onde E_0 e ν_0 representam os valores de referência para o módulo de elasticidade e coeficiente

de Poisson, e m uma constante que define o grau da heterogeneidade do material.

No presente estudo, utiliza-se a solução proposta por Jabbari *et al.* (2002) para o caso particular de uma análise puramente mecânica. Assim, o campo de deslocamento no tubo é expresso em função de sua posição radial conforme mostra a expressão:

$$u_r(r) = B_1 r^{\eta_1} + B_2 r^{\eta_2}, \quad (5.8)$$

sendo os parâmetros $\eta_{1,2}$ dependentes essencialmente do coeficiente de Poisson e do grau de heterogeneidade do material, e são definidos pela expressão:

$$\eta_{1,2} = -\frac{m}{2} \mp \sqrt{\frac{m^2}{4} - \frac{\nu_0 m}{1 - \nu_0} + 1}. \quad (5.9)$$

Os coeficientes B_1 e B_2 envolvem, além das propriedades do material (E_0 , ν_0 e m), as condições de contorno impostas ao tubo, como mostra as expressões:

$$B_1 = \frac{d_5 d_4 - d_6 d_2}{d_1 d_4 - d_2 d_3}, \quad (5.10)$$

$$B_2 = \frac{d_1 d_6 - d_3 d_5}{d_1 d_4 - d_2 d_3}, \quad (5.11)$$

onde

$$d_1 = [(1 - \nu_0)\eta_1 + \nu_0] r_I^{\eta_1 + m - 1}, \quad (5.12)$$

$$d_2 = [(1 - \nu_0)\eta_2 + \nu_0] r_I^{\eta_2 + m - 1}, \quad (5.13)$$

$$d_3 = [(1 - \nu_0)\eta_1 + \nu_0] r_E^{\eta_1 + m - 1}, \quad (5.14)$$

$$d_4 = [(1 - \nu_0)\eta_2 + \nu_0] r_E^{\eta_2 + m - 1}, \quad (5.15)$$

$$d_5 = -\frac{(1 - \nu_0)(1 - 2\nu_0)}{E_0} P_I, \quad (5.16)$$

$$d_6 = -\frac{(1 - \nu_0)(1 - 2\nu_0)}{E_0} P_E. \quad (5.17)$$

Salzar *et al.* (1996) propuseram uma metodologia de solução aproximada para o tubo de parede espessa de FGM. Nesta metodologia, substitui-se o tubo de FGM, o qual apresenta uma variação contínua do material, por outro constituído por um conjunto finito de camadas homogêneas, tratando-se o tubo como se fosse um material laminado (Figura 5.5). Para a determinação da solução analítica deste problema são impostas condições de compatibilidade em deslocamentos e tensões radiais nas interfaces em comum de cada lâmina do material.

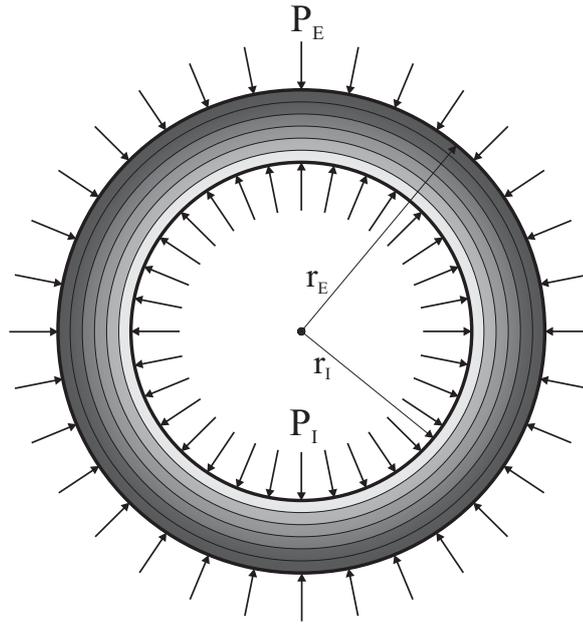


Figura 5.5: Tubo laminado.

No entanto, a substituição do tubo real, envolvendo o material com microestrutura continuamente gradada, por outro tubo laminado constituído por lâminas discretas homogeneizadas conduz a erros de modelagem, os quais são discutidos nas análises seguintes. Os parâmetros que definem a geometria e as propriedades de referência do material do tubo utilizadas nas análises, representados no sistema americano de unidades¹, são mostrados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Parâmetros e propriedades do tubo utilizados nas análises.

r_I (in)	r_E (in)	E_0 (psi)	ν_0
1,00	2,00	$4,35 \times 10^7$	0,22

Estimativas do Erro de Modelagem Global

A partir desta seção, as estimativas de erro de modelagem são avaliadas através de índices de efetividade que indicam a qualidade da solução do problema homogeneizado. Estes índices representam uma relação entre as estimativas e o erro de modelagem exato. Sabe-se, no entanto, que quanto mais próximo do valor unitário, melhor é a qualidade da estimativa de erro de modelagem. Os índices de efetividade são expressos como:

$$\lambda_{inf} = \frac{\Psi_{inf}}{\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)}} \text{ e } \lambda_{sup} = \frac{\Psi_{sup}}{\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)}}, \quad (5.18)$$

¹ 1 in = 0,0254 m e 1 psi \approx 6,894 kN/m²

onde λ_{inf} e λ_{sup} representam, respectivamente, os índices de efetividade global inferior e superior.

Análise 1: Variação do número de lâminas do tubo laminado

Nesta análise, para a avaliação do erro de modelagem global, considera-se um tubo constituído por um número de lâminas variando de 1 a 100, onde as propriedades efetivas homogeneizadas de cada lâmina são admitidas como aquelas obtidas pela Equação (5.7), sendo r o raio médio da lâmina. As estimativas de erro são apresentadas para um valor fixo do grau de heterogeneidade do material ($m = 2,5$), verificando-se o comportamento das mesmas em função das condições de carregamento aplicadas.

O gráfico ilustrado na Figura (5.6) expressa as estimativas de erro de modelagem global considerando-se o carregamento imposto apenas na face interna do tubo ($P_I = 10^4$ psi). Os resultados apresentados mostram que os limites do erro de modelagem global nem sempre figuram como bons estimadores. Diferentemente do que foi constatado no trabalho de Oden & Vemaganti (2000), o limite superior global não apresenta resultados satisfatórios para esta condição de carregamento.

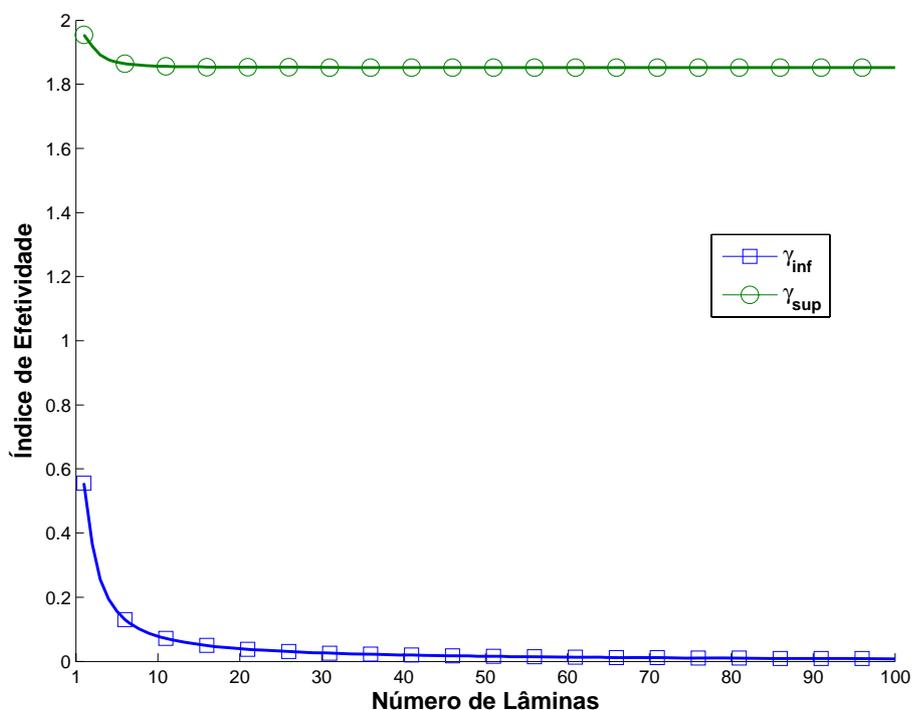


Figura 5.6: Estimativas do erro de modelagem global em função do número de lâminas para o caso de pressão interna.

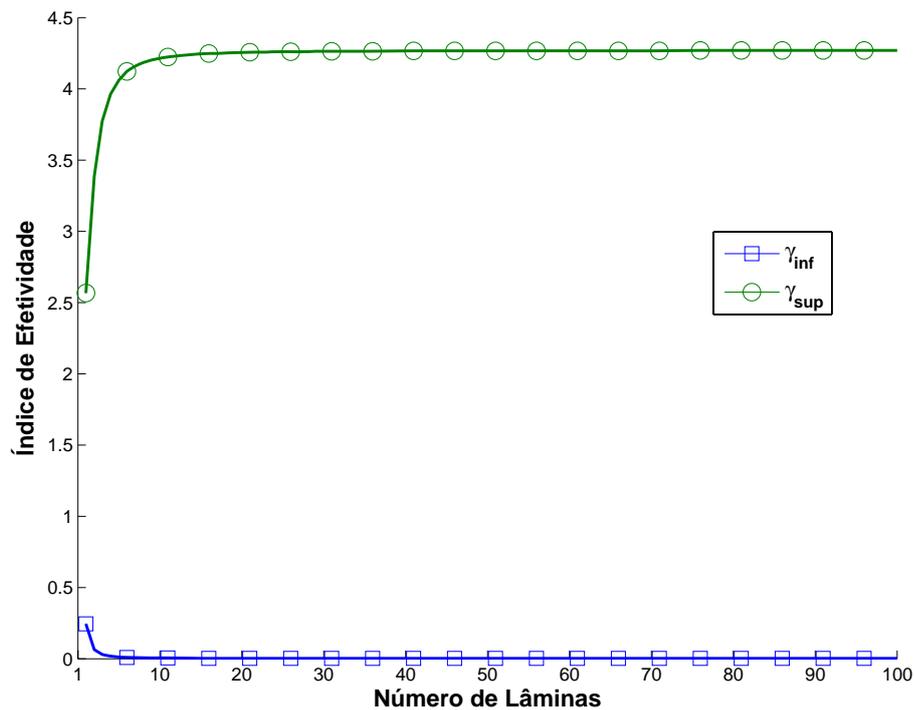


Figura 5.7: Estimativas do erro de modelagem global em função do número de lâminas para o caso de pressão externa.

Na Figura 5.7 as estimativas de erro de modelagem global são obtidas para um carregamento imposto apenas na face externa do tubo ($P_E = 10^4$ psi). Tal como observado na Figura 5.6, os limites apresentam resultados com baixo nível de aproximação do erro de modelagem exato.

Vale ressaltar que para as duas situações de carregamento consideradas, o número de lâminas do tubo laminado mostra ser um parâmetro bastante influente para as estimativas de erro de modelagem global. À medida que se aumenta este número, as estimativas de erro tendem a valores relativamente pequenos, o que significa dizer que a solução do problema do tubo laminado pode fornecer, a depender do número de lâminas, uma boa aproximação para o tubo de FGM. Essa afirmação não está evidente nos gráficos, uma vez que estes são apresentados em termos de índices de efetividade que representam relação entre os limites e o erro exato.

Análise 2: Variação do grau de heterogeneidade do material

Nesta análise, o erro de modelagem global é avaliado em função do grau de heterogeneidade do material. Para tanto, admite-se como problema homogeneizado o tubo laminado constituído por um número de lâminas homogêneas igual a 10. Tal como feito na Análise 1, verifica-se o comportamento das estimativas de erro em função das condições de carregamento aplicadas.

Conforme observa-se na Figura 5.8, para o caso em que o carregamento é imposto

apenas na face interna do tubo ($P_I = 10^4$ psi), que as estimativas de erro exibem uma grande dependência do grau de heterogeneidade do material, principalmente para elevados valores deste parâmetro. Para esta situação de carregamento, o limite superior do erro de modelagem global apresenta maior aproximação em relação ao erro de modelagem exato. Conforme se observa na Figura 5.8, um aumento no parâmetro m implica em uma maior aproximação entre o erro de modelagem exato e o referido limite superior.

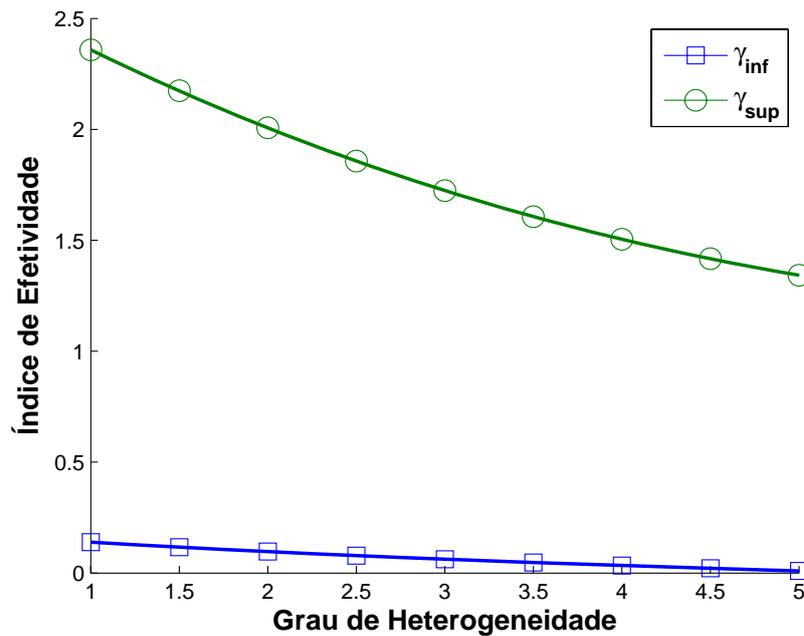


Figura 5.8: Estimativas do erro de modelagem global em função do grau de heterogeneidade para o caso de pressão interna.

A Figura 5.9 ilustra os resultados das estimativas de erro de modelagem global considerando-se o tubo com carregamento imposto na face externa ($P_E = 10^4$ psi). Nesta situação de carregamento, os limites não apresentam resultados satisfatórios para a estimativa do erro de modelagem global, principalmente quando se aumenta o grau de heterogeneidade do material. Assim, conclui-se que as estimativas de erro são fortemente influenciadas pelo estado de carregamento imposto e pelo grau de heterogeneidade do material.

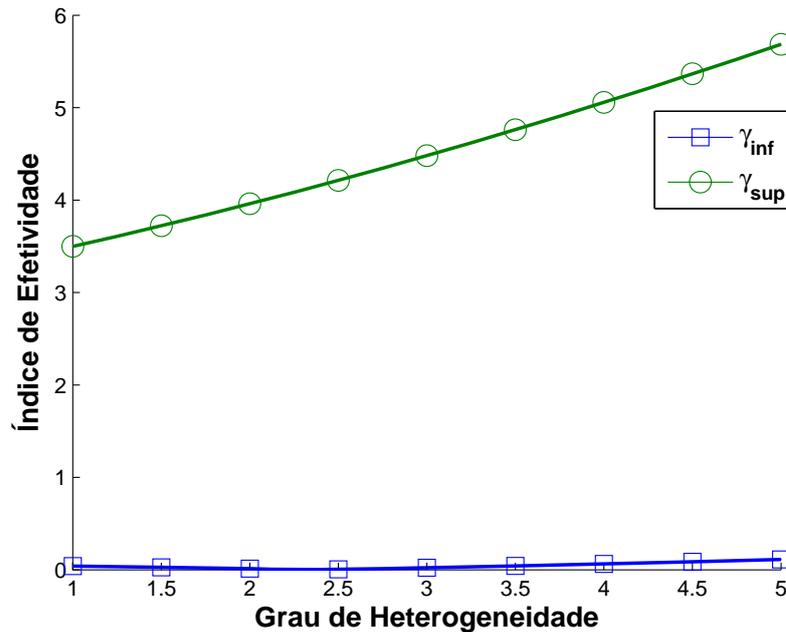


Figura 5.9: Estimativas do erro de modelagem global em função do grau de heterogeneidade para o caso de pressão externa.

Análise 3: Contribuição de cada lâmina no erro de modelagem global

Nesta análise, procura-se mostrar a contribuição do erro de modelagem por lâmina do tubo laminado. Para isso, considera-se um tubo constituído por 10 lâminas homogêneas sendo as propriedades efetivas de cada lâmina determinadas com o mesmo grau de heterogeneidade adotado na Análise 1.

Os gráficos ilustrados nas Figuras 5.10 e 5.11 mostram a contribuição de cada lâmina no erro de modelagem global para os casos de carregamento na face interna e externa, respectivamente. Os valores dos carregamentos interno e externo são aqueles adotados nas Análises 1 e 2.

Assim, observa-se que para o caso de carregamento interno a lâmina mais interna do tubo apresenta a maior contribuição para o erro, uma vez que esta possui os maiores gradientes de deformações. No caso de carregamento externo, a lâmina mais externa do tubo apresenta a maior parcela, mas em magnitude menor quando comparado ao caso de carregamento interno. Isto se deve porque as propriedades efetivas do material, calculadas de acordo com a Equação (5.7), crescem em função do raio do tubo tornando a face externa do mesmo mais rígida do que a face interna.

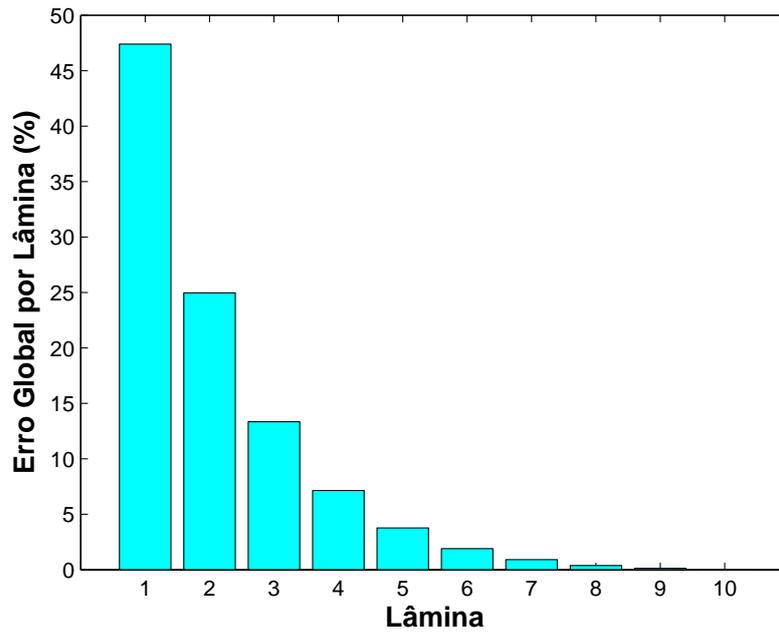


Figura 5.10: Contribuição de cada lâmina no erro de modelagem global para o caso de pressão interna.

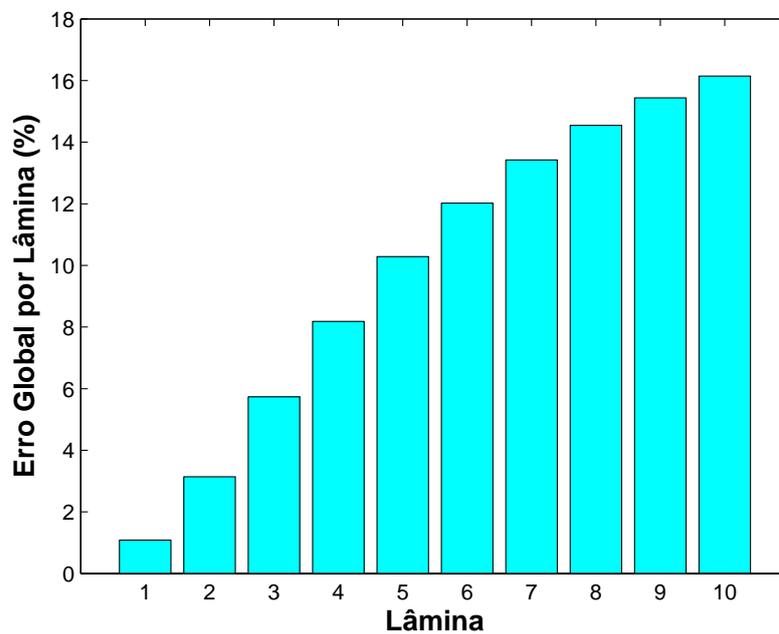


Figura 5.11: Contribuição de cada lâmina no erro de modelagem global para o caso de pressão externa.

5.3 O Problema de Eshelby

Esta aplicação trata do problema clássico de uma inclusão elástica envolvida por uma larga matriz, submetida a um carregamento uniforme $\sigma_{xx}^{\infty} = 100 \text{ MPa}$ aplicado ao longo da direção horizontal e distante da inclusão. Para uma matriz infinita, este problema consiste em um caso particular do problema de Eshelby e sua solução pode ser obtida através das equações apresentadas em Dugdale & Ruiz (1971). Estas equações são dadas em termos de dois conjuntos de funções potenciais complexas ξ e ζ , com cada par correspondendo as fases fibra e matriz. As tensões no plano x-y são representadas por:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= 2\text{Re}(\xi') - \text{Re}(\bar{z}\xi'' + \zeta'), \\ \sigma_{yy} &= 2\text{Re}(\xi') + \text{Re}(\bar{z}\xi'' + \zeta'), \\ \sigma_{xy} &= \text{Im}(\bar{z}\xi'' + \zeta'),\end{aligned}\tag{5.19}$$

onde $z = x + iy$, Re e Im denotam, respectivamente, a parte real e imaginária das expressões entre parênteses. Para a fase fibra, as duas funções potenciais complexas são dadas por:

$$\xi_F = a_1 z, \quad \zeta_F = p_1 z,\tag{5.20}$$

e para a fase matriz:

$$\xi_M = \tilde{a}_2 z^{-1} + \tilde{a}_1 z, \quad \zeta_M = \tilde{p}_3 z^{-3} + \tilde{p}_2 z^{-1} + \tilde{p}_1 z,\tag{5.21}$$

onde

$$a_1 = \frac{1}{4} \sigma_{xx}^{\infty} \frac{(k_M + 1)\mu_F}{2\mu_F + (k_F - 1)\mu_M}, \quad p_1 = -\frac{1}{2} \sigma_{xx}^{\infty} \left(1 + \frac{\mu_F - \mu_M}{\mu_M + k_M \mu_F}\right),\tag{5.22}$$

$$\tilde{a}_2 = -\frac{1}{2} \sigma_{xx}^{\infty} \left(\frac{\mu_F - \mu_M}{\mu_M + k_M \mu_F}\right), \quad \tilde{a}_1 = \frac{1}{4} \sigma_{xx}^{\infty}, \quad \tilde{p}_3 = \tilde{a}_2,\tag{5.23}$$

$$\tilde{p}_2 = 2a_1 - \frac{1}{2} \sigma_{xx}^{\infty}, \quad \tilde{p}_1 = -\frac{1}{2} \sigma_{xx}^{\infty},\tag{5.24}$$

sendo os parâmetros k 's expressos em termos das constantes de Lamé's λ e μ , conforme a expressão:

$$k = \frac{\lambda + 3\mu}{\lambda + \mu}\tag{5.25}$$

Neste estudo, considera-se uma fibra circular de raio unitário e uma matriz de dimensões 30×30 , escolhida estrategicamente para representar de forma satisfatória o problema de Eshelby, como mostra a Figura 5.12. Os parâmetros elásticos utilizados nas análises são $E_M = 4800 \text{ MPa}$, $\nu_M = 0,20$ para a matriz e $E_F = \phi E_M$, $\nu_F = \nu_M$ para a fibra, sendo ϕ a

rigidez relativa. Levando-se em consideração a simetria do problema, basta analisar apenas um quarto do sistema estrutural, impondo-se condições de contorno que representem esta simetria.

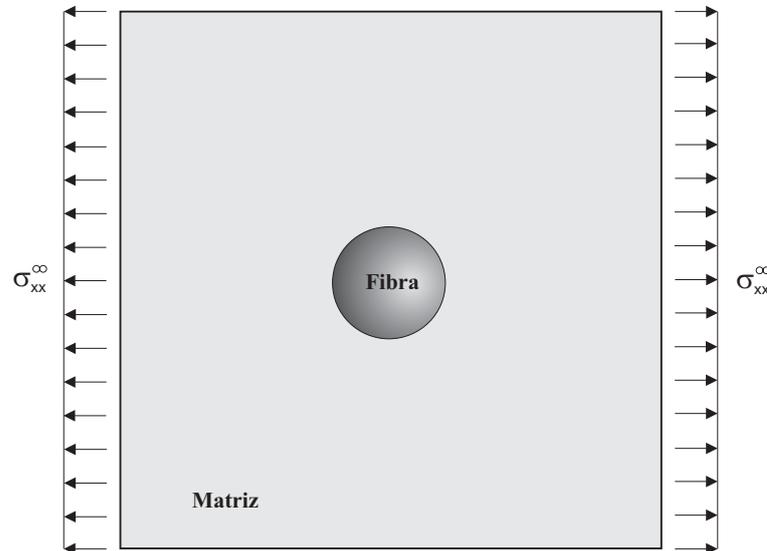


Figura 5.12: Fibra circular envolvida por uma larga matriz submetida a um carregamento uniformemente aplicado.

As propriedades elásticas do material homogeneizado são determinadas com o uso do modelo micromecânico de Mori-Tanaka, para uma variação da rigidez relativa ϕ de 10 a 50. Outros modelos de homogeneização poderiam ser utilizados para a determinação das propriedades elásticas efetivas. No entanto, os resultados encontrados apresentariam valores similares, tendo em vista que a fração volumétrica de fibra é pequena e, conforme mostrado no Capítulo 2, todos os modelos de homogeneização aqui apresentados exprimem valores próximos entre si, para pequenas frações volumétricas de inclusão.

Estimativas do Erro de Modelagem Global

Neste estudo, avalia-se o erro de modelagem global devido a substituição de um compósito reforçado por uma única fibra (Problema de Eshelby) por um modelo homogeneizado com propriedades efetivas equivalentes. As análises são realizadas para duas situações: fibra mais rígida do que a matriz e matriz mais rígida do que a fibra.

Análise 1: Fibra mais Rígida do que a Matriz

Na Figura 5.13 estão representados os resultados das estimativas de erro de modelagem global obtidos analiticamente para as rigidezes relativa fibra/matriz com valores variando de 10

a 50. Nota-se que o limite superior do erro de modelagem global se comporta como um bom estimador de erro de modelagem, principalmente nos casos em que a rigidez da fibra é muito maior do que a rigidez da matriz. Em contrapartida, o limite inferior do erro de modelagem global apresenta valores afastados do erro de modelagem exato.

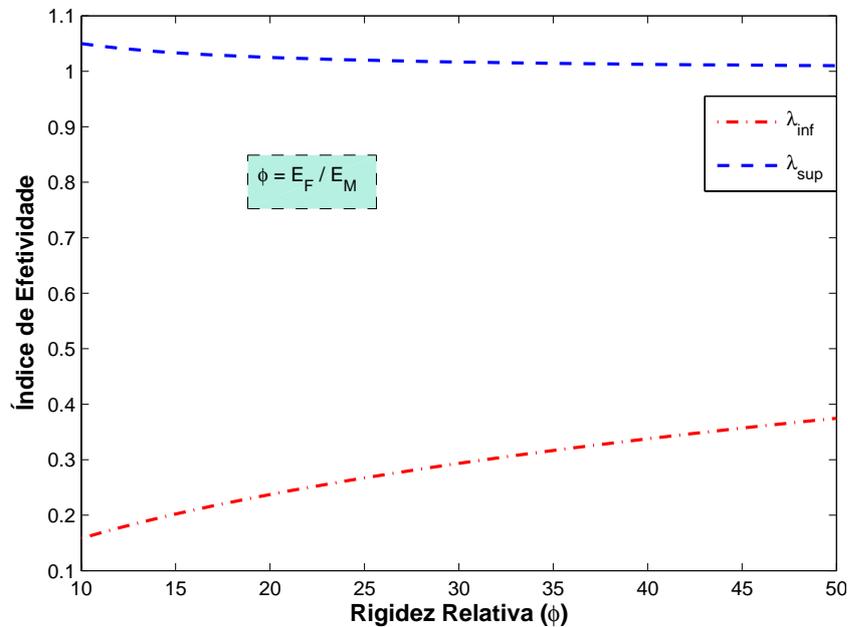


Figura 5.13: Estimativas de erro de modelagem global - rigidez relativa fibra/matriz.

Análise 2: Matriz mais Rígida do que a Fibra

A Figura 5.14 apresenta os resultados obtidos para as estimativas de erro de modelagem global, considerando-se neste caso, como rigidez relativa, a relação entre os módulos de elasticidade da matriz e da fibra, ou seja $\phi = E_M/E_F$. Nesta situação, sendo a matriz mais rígida do que a fibra, o limite inferior global apresenta resultados mais próximos do erro de modelagem exato em comparação com o limite superior global. Portanto, as estimativas de erro de modelagem estão estritamente ligadas às propriedades mecânicas do material da fibra e da matriz.

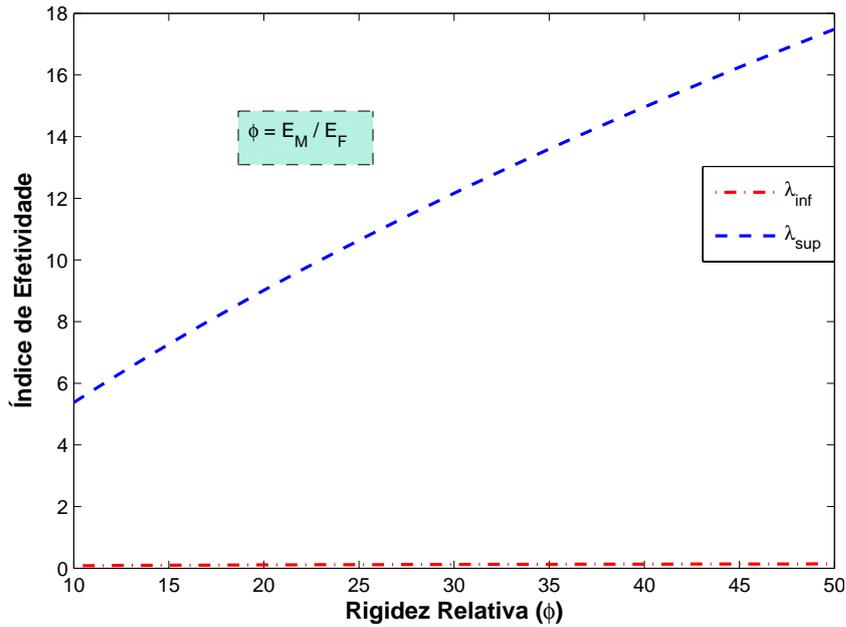


Figura 5.14: Estimativas de erro de modelagem global - rigidez relativa matriz/fibra.

Estimativas do Erro de Modelagem Local

As estimativas de erro de modelagem local requerem a definição de uma função de influência, relativa ao problema adjunto, que muitas vezes não pode ser determinada analiticamente, tendo em vista a complexidade matemática do problema. Sendo assim, neste estudo, as referidas estimativas são obtidas através do código computacional MODERE.

A quantidade de interesse escolhida neste estudo representa uma tensão normal média sobre a região da fibra (Figura 5.12), representada por:

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{v}) \, d\omega. \quad (5.26)$$

Com a quantidade de interesse do problema definida, verifica-se a influência da rigidez relativa fibra/matriz sobre as estimativas de erro de modelagem local a partir dos seguintes índices de efetividade:

$$\gamma_{inf} = \frac{\eta_{inf}}{\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)}, \quad \gamma_{sup} = \frac{\eta_{sup}}{\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)}, \quad \gamma_{inf,est} = \frac{\eta_{inf,est}}{\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)}, \quad \gamma_{sup,est} = \frac{\eta_{sup,est}}{\mathcal{L}(\mathbf{e}^h)}, \quad (5.27)$$

onde γ_{inf} , γ_{sup} , $\gamma_{inf,est}$ e $\gamma_{sup,est}$ representam, respectivamente, os índices de efetividade local inferior, superior, inferior estimado e superior estimado. Os resultados encontrados das estimativas de erro de modelagem local estão ilustrados na Figura 5.15 para $\phi = E_F/E_M$ variando entre 10 e 50.

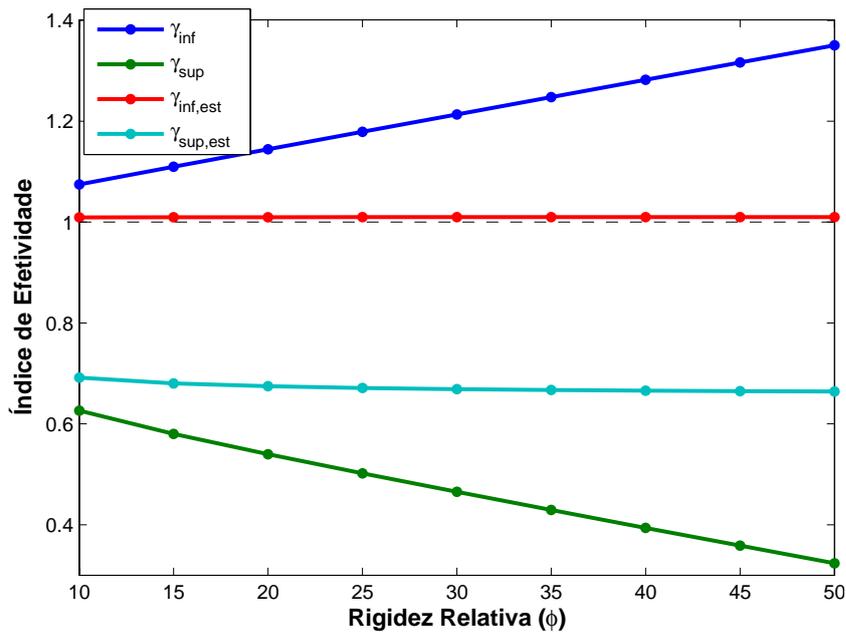


Figura 5.15: Estimativas de erro de modelagem local no problema de Eshelby.

De acordo com os resultados, para os casos em que a fibra é mais rígida do que a matriz, pode-se perceber que o índice de efetividade inferior estimado apresenta valores bem próximos da unidade para os diversos valores de rigidez relativa. Isto implica dizer que, para a situação considerada, tal limite produz resultados muito próximos do erro exato na quantidade de interesse, sendo, portanto, conforme constatado em diversos experimentos de Oden & Vemaganti (2000), o melhor estimador para o erro de modelagem local em quantidades de interesse.

5.4 Estrutura de Material Compósito Dotada de Inclusões Cilíndricas

Este problema foi inicialmente analisado por Oden & Vemaganti (2000) utilizando um código em elementos finitos com uma estratégia adaptativa baseada em erro de modelagem. A estrutura consiste em um sólido constituído por fibras cilíndricas paralelas e solicitada por uma carga vertical, formando um sistema estrutural em estado plano de deformação (Figura 5.16). Para efeito de análise, o sólido é concebido como um conjunto com 42 células quadradas de lado unitário e contendo as inclusões distribuídas de acordo com a Figura 5.16. O material compósito é constituído por uma matriz homogênea e isotrópica, com $E = 100\text{MPa}$ e $\nu = 0,20$, envolvendo fibras também homogêneas e isotrópicas com $E = 1000\text{MPa}$ e $\nu = 0,20$. A fração volumétrica de fibras corresponde a 0,30. Neste estudo, estimam-se os erros de modelagem global em termos de norma energia, e local em uma quantidade de interesse sobre

a região ω , ilustrada na Figura 5.16.

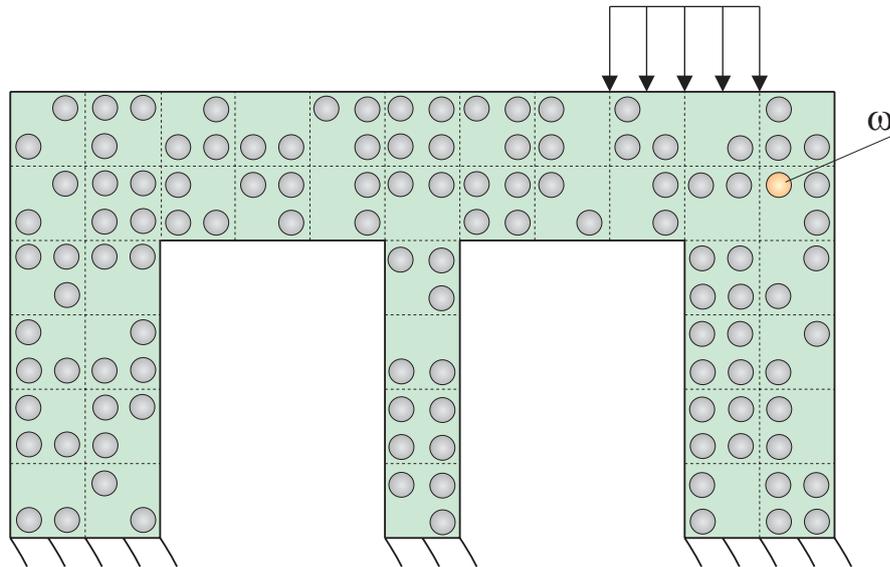


Figura 5.16: Representação esquemática da estrutura de material compósito com inclusões cilíndricas.

Estimativas do Erro de Modelagem Global

Para analisar o problema, o sólido é discretizado conforme mostrado na Figura 5.17, utilizando uma malha constituída por 29587 elementos finitos triangulares T6 e 59802 nós, que permite um erro de discretização suficientemente pequeno. Tal como feito em Oden & Vemaganti (2000), o material compósito é homogeneizado e adotadas como propriedades efetivas aquelas correspondentes aos valores médios dos limites de Hashin-Shtrikman ($E^h = 218,37 \text{ MPa}$ e $\nu^h = 0,20$). Usando o código implementado no presente trabalho são feitas análises do sólido com a microestrutura real e homogeneizada, obtendo-se os campos de deslocamentos \mathbf{u} e \mathbf{u}^h , respectivamente. Com base nos resultados numéricos, obtêm-se o erro de modelagem global e os limites estabelecidos pelo Teorema 3.1.

Os índices de efetividade correspondentes aos limites do erro de modelagem global são apresentados na Tabela 5.2, juntamente com aqueles obtidos por Oden & Vemaganti (2000).

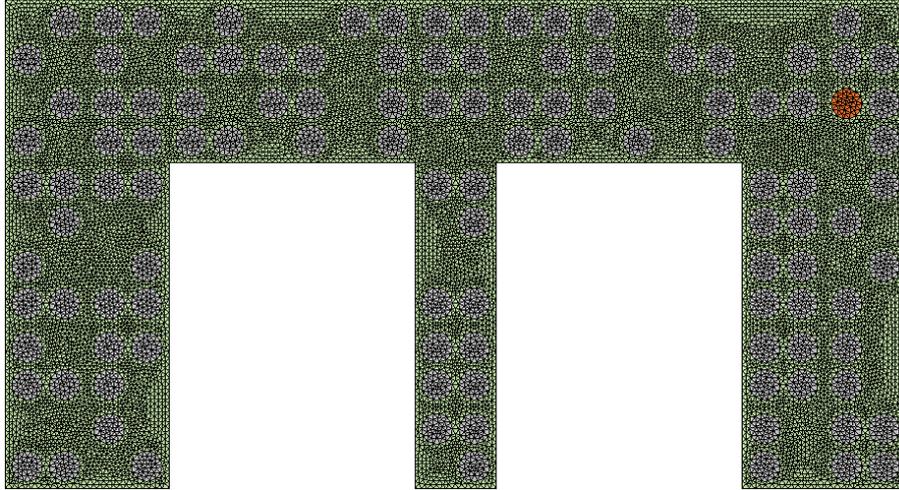


Figura 5.17: Malha de elementos finitos T6 utilizada nas análises.

Tabela 5.2: Índices de efetividade das estimativas de erro de modelagem global.

Estimativa de Erro	MODERE	Oden & Vemaganti (2000)
λ_{inf}	0,496	0,494
λ_{sup}	1,088	1,085

Conforme pode ser visto, mesmo utilizando-se códigos computacionais, elementos finitos e discretizações diferentes, os valores de tais índices de efetividade encontrados são bastante aproximados daqueles obtidos por Oden & Vemaganti (2000).

Estimativas do Erro de Modelagem Local

Para a verificação do código computacional implementado e comparação com os resultados de Oden & Vemaganti (2000) é selecionada a quantidade de interesse:

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}) = \frac{1}{\omega} \int_{\omega} \sigma_{11}(\mathbf{v}) \, d\omega, \quad (5.28)$$

correspondente ao valor médio da tensão σ_{11} na inclusão ω mostrada na Figura 5.16.

Os problemas adjuntos, considerando-se as microestruturas real e homogeneizada do material são resolvidos, obtendo-se \mathbf{w} e \mathbf{w}^h que, juntamente com os campos de deslocamentos \mathbf{u} e \mathbf{u}^h , servem para a obtenção dos índices de efetividade apresentados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Índices de efetividade das estimativas de erro de modelagem local.

Estimativa de Erro	MODERE	Oden & Vemaganti (2000)
$\frac{\Psi_{inf}}{\ \mathbf{w}-\mathbf{w}^h\ }$	0,997	0,994
$\frac{\Psi_{sup}}{\ \mathbf{w}-\mathbf{w}^h\ }$	1,126	1,123
γ_{inf}	198,091	161,4
γ_{sup}	-200,124	-162,7
$\gamma_{inf,est}$	0,753	0,709
$\gamma_{sup,est}$	-2,786	-2,028

Como se pode observar, os valores correspondentes aos dois primeiros índices de efetividade obtidos pelo código computacional estão próximos daqueles encontrados por Oden & Vemaganti (2000), enquanto que aqueles relativos aos demais índices apresentam diferenças mais acentuadas. Tais diferenças podem ser atribuídas às formas de avaliação de tensões e discretizações empregadas, as quais não estão explicitadas na referência mencionada. Vale também ressaltar que as tensões não são as variáveis primárias da formulação em deslocamentos empregado no Método dos Elementos Finitos.

6 *Considerações Finais*

No presente trabalho foi utilizada uma formulação para avaliação de erros de modelagem global e local em estruturas de materiais elásticos lineares e heterogêneos. A formulação empregada fundamenta-se em teoremas que permitem a obtenção de limites inferiores e superiores dos referidos erros. O estudo trata apenas de erros resultantes da substituição do material real heterogêneo que constitui a estrutura por outro que apresenta homogeneidade total ou parcial, ou seja, erros relacionados com aspectos físicos do problema.

Modelos da micromecânica foram aplicados para a avaliação de propriedades elásticas efetivas de tais materiais heterogêneos permitindo a caracterização do problema substituído homogeneizado. As estimativas dos erros de modelagem são obtidas através de soluções correspondentes ao problema homogeneizado e dos tensores de elasticidade dos materiais real e equivalente. Para isto, foi implementado um código computacional, denominado MODERE, baseado no Método dos Elementos Finitos, escrito em linguagem de programação C++ e fazendo uso de recursos de orientação a objetos.

Com o objetivo de verificar o desempenho dos teoremas apresentados foram analisadas quatro aplicações de estruturas de material heterogêneo, três dos quais com soluções analíticas conhecidas.

Na primeira aplicação, a qual envolveu uma barra constituída por dois materiais, foram avaliados erros de modelagem global e local. Neste caso foi observada uma boa aproximação entre o erro de modelagem global e seu limite superior para diferentes valores de rigidez relativa dos materiais. Para o erro de modelagem local as estimativas apresentaram valores aceitáveis, ganhando destaque os valores estimados apresentados no trabalho de Oden & Vemaganti (2000).

Na segunda aplicação foram determinados erros de modelagem global, para o caso de um tubo de FGM quando substituído por um tubo laminado, verificando-se a influência do grau de heterogeneidade do material e do número de lâminas do problema substituído. Os resultados mostraram que as estimativas de erro de modelagem apresentam significativa dependência do grau de heterogeneidade do material. Com aumento do número de lâminas do problema substituído, as estimativas de erro tenderam, como esperado, a valores relativamente pequenos,

significando que a partir de um determinado número de lâminas, a solução do tubo laminado apresenta uma boa aproximação em relação àquela correspondente ao tubo de FGM. Percebeu-se ainda que as estimativas de erro de modelagem dependem essencialmente das condições de carregamento empregadas.

Na terceira aplicação, considerou-se o problema clássico de uma fibra imersa em uma larga matriz, avaliando-se as estimativas de erros de modelagem global e local em função de diversos valores de rigidez relativa. O limite superior global, para o caso da fibra mais rígida do que a matriz, apresentou valores muito próximos daqueles correspondentes ao erro de modelagem exato, não acontecendo o mesmo para o correspondente limite inferior. Percebeu-se também que para o caso da matriz mais rígida do que a fibra, o erro de modelagem global se apresentou mais próximo de seu limite inferior. Com base nestes resultados, observa-se mais uma vez a influência das rigidezes dos constituintes sobre as estimativas de erros de modelagem. A análise local, tendo como variável de interesse a tensão normal na direção do carregamento, mostrou uma boa aproximação entre o erro de modelagem local e seu limite inferior estimado.

A última aplicação serviu para verificar o código computacional implementado, tomando-se como referência os resultados obtidos por Oden & Vemaganti (2000). Vale ressaltar que, mesmo usando códigos computacionais com características diferentes, os resultados obtidos foram bastante aproximados daqueles encontrados nesta última referência.

A primeira sugestão para trabalhos futuros é o estudo e implementação do método da decomposição de domínios. Com este método é possível estabelecer erros de modelagem em um nível de acurácia especificado, utilizando um procedimento adaptativo.

A segunda sugestão é utilizar o erro de modelagem global como a função objetivo de um problema de material compósito para determinar as propriedades elásticas efetivas, ou seja, especifica-se um erro de modelagem global, para um determinado compósito, e determinam-se as propriedades homogeneizadas que produzem aquele erro.

Outra sugestão é expandir a teoria de avaliação de erros de modelagem para outras relações constitutivas do material, pois neste trabalho considerou-se apenas o material como elástico linear.

Referências Bibliográficas

- AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. A posteriori error estimation in finite element analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 142, n. 1-2, p. 1–88, mar. 1997.
- BENVENISTE, Y. A new approach to the application of Mori-Tanaka theory in composite-materials. *Mechanics of Materials*, v. 6, n. 2, p. 147–157, jun. 1987.
- BERRYMAN, J. G. Pore fluid effects on shear modulus in a model of heterogeneous rocks, reservoirs, and granular media. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, v. 110, n. B7, 2005.
- BERRYMAN, J. G. Poroelastic fluid effects on shear for rocks with soft anisotropy. *Geophysical Journal International*, v. 161, n. 3, p. 881–890, 2005.
- BERRYMAN, J. G.; PRIDE, S. R.; WANG, H. F. A differential scheme for elastic properties of rocks with dry or saturated cracks. *Geophysical Journal International*, v. 151, n. 2, p. 597–611, 2002.
- CAVALCANTE, M. A. A. *Modelagem do Comportamento Termo-Mecânico Transiente de Estruturas de Materiais Compósitos pela Teoria de Volumes Finitos*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2006.
- DRAGO, A.; PINDER, M. J. Micro-macromechanical analysis of heterogeneous materials: Macroscopically homogeneous vs periodic microstructures. *Composites Science and Technology*, v. 67, n. 6, p. 1243–1263, maio 2007.
- DUGDALE, D.; RUIZ, C. *Elasticity for Engineers*. London: McGraw-Hill, 1971. 304 p. ISBN 978-0070941526.
- ESHELBY, J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences*, v. 241, n. 1226, p. 376–396, 1957.
- EVANGELISTA JUNIOR, F.; SOUZA, F. V.; CAVALCANTE NETO, J. B.; SOARES, J. B. Computational modeling approach for homogenization techniques based on the finite element method. In: XXIV IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING. Ouro Preto, Brazil, 2003.
- HASHIN, Z. The differential scheme and its application to cracked materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 36, n. 6, p. 719–734, 1988.
- HASHIN, Z.; SHTRIKMAN, S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 11, n. 2, p. 127–140, 1963.

- HILL, R. A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 13, n. 4, p. 213–222, 1965.
- JABBARI, A.; SOHRABPOUR, S.; ESLAMI, M. R. Mechanical and thermal stresses in a functionally graded hollow cylinder due to radially symmetric loads. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, v. 79, n. 7, p. 493–497, jul. 2002.
- LI, L. X.; WANG, T. J. A unified approach to predict overall properties of composite materials. *Materials Characterization*, v. 54, n. 1, p. 49–62, jan. 2005.
- LIRA, W. W. M. *Um sistema Integrado Configurável para Simulações em Mecânica Computacional*. Dissertação (Mestrado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1998.
- MARKOV, M.; LEVINE, V.; MOUSATOV, A.; KAZATCHENKO, E. Elastic properties of double-porosity rocks using the differential effective medium model. *Geophysical Prospecting*, v. 53, n. 5, p. 733–754, 2005.
- MORI, T.; TANAKA, K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, v. 21, n. 5, p. 571–574, 1973.
- NEMAT-NASSER, S.; HORI, M. *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*. Amsterdam: Elsevier, 1999. 810 p. ISBN 0-444-50084-7.
- ODEN, J. T.; VEMAGANTI, K. S. Estimation of local modeling error and goal-oriented adaptive modeling of heterogeneous materials i. error estimates and adaptive algorithms. *Journal of Computational Physics*, v. 164, n. 1, p. 22–47, out. 2000.
- ODEN, J. T.; ZOHDHI, T. I. Analysis and adaptive modeling of highly heterogeneous elastic structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 148, n. 3-4, p. 367–391, set. 1997.
- ROMKES, A.; ODEN, J. T.; VEMAGANTI, K. Multi-scale goal-oriented adaptive modeling of random heterogeneous materials. *Mechanics of Materials*, v. 38, n. 8-10, p. 859–872, ago. 2006.
- SALZAR, R. S.; PINDER, M. J.; BARTON, F. W. Elastoplastic analysis of layered metal matrix composite cylinders .2. numerical results. *Journal of Pressure Vessel Technology-Transactions of the Asme*, v. 118, n. 1, p. 21–26, fev. 1996.
- STROUSTRUP, B. *The C++ Programming Language*. Boston, MA, USA: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 2000.
- SUVOROV, A. P.; DVORAK, G. J. Rate form of the Eshelby and Hill. *International Journal of Solids and Structures*, v. 39, n. 21-22, p. 5659–5678, out. 2002.
- TAKAO, Y.; CHOU, T. W.; TAYA, M. Effective longitudinal Young modulus of misoriented short fiber composites. *Journal of Applied Mechanics-Transactions of the Asme*, v. 49, n. 3, p. 536–540, 1982.
- TAYA, M.; SEIDEL, E. D. Void growth in a viscous metal. *International Journal of Engineering Science*, v. 19, n. 8, p. 1083–1094, 1981.

- TESSIER-DOYEN, N.; GLANDUS, J. C.; HUGER, M. Experimental and numerical study of elastic behavior of heterogeneous model materials with spherical inclusions. *Journal of Materials Science*, v. 42, n. 14, p. 5826–5834, jul. 2007.
- VEMAGANTI, K. S. *Goal-Oriented Adaptive Modeling of Heterogeneous Elastic Solids*. Tese (Doutorado) — University of Texas, Austin/USA, 2000.
- VEMAGANTI, K. S.; ODEN, J. T. Estimation of local modeling error and goal-oriented adaptive modeling of heterogeneous materials part ii: A computational environment for adaptive modeling of heterogeneous elastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 190, n. 46-47, p. 6089–6124, 2001.
- WALSH, J. B. Effect of cracks on compressibility of rock. *Journal of Geophysical Research*, v. 70, n. 2, p. 381–389, 1965.
- YU, W. B.; TANG, T. Variational asymptotic method for unit cell homogenization of periodically heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, v. 44, n. 11-12, p. 3738–3755, jun. 2007.
- ZOHDI, T. I.; ODEN, J. T.; RODIN, G. J. Hierarchical modeling of heterogeneous bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 138, n. 1-4, p. 273–298, dez. 1996.
- ZOHDI, T. I.; WRIGGERS, P. *Introduction to Computational Micromechanics*. New York: Springer, 2005. 196 p. (Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics, v. 20). ISBN 978-3-540-22820-2.

APÊNDICE A – Erro de Modelagem

A.1 Funcional Residual

Demonstração. Dados os problemas em escala refinada e homogeneizado:

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathcal{F}(\mathbf{v}), \quad (\text{A.1})$$

$$\mathcal{B}^h(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}) = \mathcal{F}(\mathbf{v}). \quad (\text{A.2})$$

A partir da subtração destas equações, tem-se:

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - \mathcal{B}^h(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}) = 0. \quad (\text{A.3})$$

Por definição, sabe-se que:

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \nabla \mathbf{u} \, d\Omega, \quad (\text{A.4})$$

$$\mathcal{B}^h(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E}^h \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega. \quad (\text{A.5})$$

Então,

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \nabla \mathbf{u} \, d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E}^h \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : (\mathbf{E} \nabla \mathbf{u} - \mathbf{E}^h \nabla \mathbf{u}^h) \, d\Omega = 0. \quad (\text{A.6})$$

Seja $\mathcal{J} = \mathbf{I} - \mathbf{E}^{-1} \mathbf{E}^h \therefore \mathbf{E} \mathcal{J} = \mathbf{E} - \mathbf{E}^h$.

Logo,

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : [\mathbf{E} \nabla \mathbf{u} - (\mathbf{E} - \mathbf{E} \mathcal{J}) \nabla \mathbf{u}^h] \, d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : [\mathbf{E} \nabla \mathbf{u} - \mathbf{E} \nabla \mathbf{u}^h + \mathbf{E} \mathcal{J} \nabla \mathbf{u}^h] \, d\Omega = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : [\mathbf{E} (\nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^h) + \mathbf{E} \mathcal{J} \nabla \mathbf{u}^h] \, d\Omega = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \nabla \mathbf{e}^h \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \mathcal{J} \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega = 0. \quad (\text{A.9})$$

Então,

$$\mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{v}) = - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega = \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{v}). \quad (\text{A.10})$$

A.2 Prova do Teorema 3.1

Demonstração. Sendo,

$$\mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{v}) = - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \mathbf{E} \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega, \quad (\text{A.11})$$

tem-se:

$$\mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{e}^h) = - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e}^h : \mathbf{E} \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega = \|\mathbf{e}^h\|^2. \quad (\text{A.12})$$

Sabe-se que $\mathcal{B}(\cdot, \cdot)$ representa um produto interno sobre o espaço das funções admissíveis, então:

$$\|\mathbf{e}^h\|^2 = - \left(\left(\nabla \mathbf{e}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right)_E. \quad (\text{A.13})$$

Pela desigualdade de Cauchy-Schwarz:

$$|((\mathbf{A}, \mathbf{B}))| \leq |((\mathbf{A}, \mathbf{A}))|^{\frac{1}{2}} \cdot |((\mathbf{B}, \mathbf{B}))|^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.14})$$

Logo,

$$\left| \left(\left(\nabla \mathbf{e}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right| \leq \left| \left(\left(\nabla \mathbf{e}^h, \nabla \mathbf{e}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}} \cdot \left| \left(\left(\mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.15})$$

$$\left| \left(\left(\nabla \mathbf{e}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right| \leq \sqrt{\left| \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e}^h : \mathbf{E} \nabla \mathbf{e}^h \, d\Omega \right|} \cdot \sqrt{\left| \int_{\Omega} \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h : \mathbf{E} \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \, d\Omega \right|}, \quad (\text{A.16})$$

$$\left| \left(\left(\nabla \mathbf{e}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right| \leq \|\mathbf{e}^h\| \cdot \left| \left(\left(\mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.17})$$

$$|-\|\mathbf{e}^h\|^2| \leq \|\mathbf{e}^h\| \cdot \left| \left(\left(\mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.18})$$

$$\|\mathbf{e}^h\|^2 \leq \|\mathbf{e}^h\| \cdot \left| \left(\left(\mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.19})$$

$$\|\mathbf{e}^h\| \leq \left| \left(\left(\mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.20})$$

sendo

$$\psi_{sup} = \left| \left(\left(\mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h, \mathcal{I} \nabla \mathbf{u}^h \right) \right) \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.21})$$

Considere a seguinte expressão:

$$\frac{\mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{v})}{\|\mathbf{v}\|_{E(\Omega)}} = \mathcal{B}\left(\mathbf{e}^h, \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_{E(\Omega)}}\right) \leq \|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)}. \quad (\text{A.22})$$

Assim,

$$\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)} \geq \mathcal{B}\left(\mathbf{e}^h, \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_{E(\Omega)}}\right), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega). \quad (\text{A.23})$$

Em particular, se $\mathbf{v} = \mathbf{u}^h$:

$$\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)} \geq \mathcal{B}\left(\mathbf{e}^h, \frac{\mathbf{u}^h}{\|\mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)}}\right) = \frac{1}{\|\mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)}} \mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{u}^h), \quad (\text{A.24})$$

$$\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)} \geq \frac{1}{\|\mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)}} \left[\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{u}^h) - \mathcal{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h) \right]. \quad (\text{A.25})$$

Sendo $\mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{u}^h) = \mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{u}^h) - \mathcal{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h)$, então:

$$\|\mathbf{e}^h\|_{E(\Omega)} \geq \frac{1}{\|\mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)}} \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{u}^h), \quad (\text{A.26})$$

com

$$\psi_{inf} = \frac{1}{\|\mathbf{u}^h\|_{E(\Omega)}} \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{u}^h). \quad (\text{A.27})$$

A.3 Prova do Teorema 3.2

Demonstração. O erro na quantidade de interesse pode ser decomposto como:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{e}^h) &= \mathcal{L}(\mathbf{u}) - \mathcal{L}(\mathbf{u}^h) = \mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) - \mathcal{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{w}) \\ \mathcal{L}(\mathbf{e}^h) &= \mathcal{B}(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{w}) = \mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{w}). \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Sabendo-se que: $\bar{\mathbf{e}}^h = \mathbf{w} - \mathbf{w}^h \implies \mathbf{w} = \bar{\mathbf{e}}^h + \mathbf{w}^h$, têm-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{e}^h) &= \mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \bar{\mathbf{e}}^h + \mathbf{w}^h) = \mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \bar{\mathbf{e}}^h) + \mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \mathbf{w}^h) \\ \mathcal{L}(\mathbf{e}^h) &= \mathcal{B}(\mathbf{e}^h, \bar{\mathbf{e}}^h) + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h) \\ \mathcal{L}(\mathbf{e}^h) &= \mathcal{B}(s\mathbf{e}^h, s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h) + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h), \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

sendo s um escalar real e positivo. Fazendo-se uso de uma propriedade de produto interno, conhecida como identidade de polarização, têm-se:

$$\mathcal{B}(s\mathbf{e}^h, s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h) = \frac{1}{4} \|s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)}^2 - \frac{1}{4} \|s\mathbf{e}^h - s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)}^2. \quad (\text{A.30})$$

Com isso, pode-se escrever:

$$\mathcal{L}(\mathbf{e}^h) = \frac{1}{4} \|s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)}^2 - \frac{1}{4} \|s\mathbf{e}^h - s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)}^2 + \mathcal{R}_{\mathbf{u}^h}(\mathbf{w}^h). \quad (\text{A.31})$$

De acordo com o Teorema 3.1, têm-se:

$$\|s\mathbf{e}^h \pm s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)} \leq \eta_{sup}^{\pm}, \quad (\text{A.32})$$

com,

$$\eta_{sup}^{\pm} = \left\{ \int_{\Omega} [\mathcal{I}\nabla(s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h) : \mathbf{E}\mathcal{I}\nabla(s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h)] d\Omega \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.33})$$

$$\eta_{sup}^{\pm} = \left\{ s^2 \psi_{sup}^2 \pm 2\mathcal{B}(\mathcal{I}\mathbf{u}^h, \mathcal{I}\mathbf{w}^h) + s^{-2} \bar{\psi}_{sup}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Usando novamente o Teorema 3.1:

$$\|s\mathbf{e}^h \pm s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)} \geq \eta_{inf}^{\pm}, \quad (\text{A.34})$$

com,

$$\eta_{inf}^{\pm} = \frac{|\mathcal{R}_{s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h}(\mathbf{v})|}{\|\mathbf{v}\|_{E(\Omega)}}, \quad (\text{A.35})$$

para um $\mathbf{v} \in \mathbf{V}(\Omega) \setminus \{\mathbf{0}\}$. Uma combinação linear de \mathbf{u}^h e \mathbf{w}^h na forma $\mathbf{v} = \mathbf{u}^h + \theta^{\pm}\mathbf{w}^h$, $\theta^{\pm} \in \mathbb{R}$, é usada na expressão acima para obter o melhor limite inferior possível. Assim,

$$\eta_{inf}^{\pm} = \frac{|\mathcal{R}_{s\mathbf{u}^h \pm s^{-1}\mathbf{w}^h}(\mathbf{u}^h + \theta^{\pm}\mathbf{w}^h)|}{\|\mathbf{u}^h + \theta^{\pm}\mathbf{w}^h\|_{E(\Omega)}}. \quad (\text{A.36})$$

A.4 Fator de Escala

Demonstração. Considere a seguinte norma de energia:

$$\chi = \|s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h\|_{E(\Omega)} = \int_{\Omega} \nabla(s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h) : \mathbf{E}\nabla(s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h) d\Omega. \quad (\text{A.37})$$

Expandindo a integral, tem-se:

$$\chi = \int_{\Omega} \nabla s\mathbf{e}^h : \mathbf{E}\nabla(s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h) + \nabla s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h : \mathbf{E}\nabla(s\mathbf{e}^h + s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h) d\Omega, \quad (\text{A.38})$$

$$\chi = \int_{\Omega} \nabla s\mathbf{e}^h : \mathbf{E}\nabla s\mathbf{e}^h d\Omega + 2 \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e}^h : \mathbf{E}\nabla \bar{\mathbf{e}}^h d\Omega + \int_{\Omega} \nabla s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h : \mathbf{E}\nabla s^{-1}\bar{\mathbf{e}}^h d\Omega, \quad (\text{A.39})$$

$$\chi = s^2 \|\mathbf{e}^h\|^2 + 2 \int_{\Omega} \nabla \mathbf{e}^h : \mathbf{E} \nabla \bar{\mathbf{e}}^h \, d\Omega + s^{-2} \|\bar{\mathbf{e}}^h\|^2. \quad (\text{A.40})$$

Derivando χ em relação a s e igualando a zero, tem-se:

$$\frac{d\chi}{ds} = 2s \|\mathbf{e}^h\|^2 - 2s^{-3} \|\bar{\mathbf{e}}^h\|^2 = 0, \quad (\text{A.41})$$

$$s = \sqrt{\frac{\|\bar{\mathbf{e}}^h\|}{\|\mathbf{e}^h\|}}. \quad (\text{A.42})$$