

Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Análise de sensibilidade topológica em modelos
constitutivos multi-escalas**

Por

Sebastián Miguel Giusti

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2009

ANÁLISE DE SENSIBILIDADE TOPOLÓGICA EM MODELOS
CONSTITUTIVOS MULTI-ESCALAS

Sebastián Miguel Giusti

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DE FORMAÇÃO
DE RECURSOS HUMANOS DO LABORATÓRIO NACIONAL DE COMPUTAÇÃO
CIENTÍFICA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO
DO GRAU DE DOUTOR EM MODELAGEM COMPUTACIONAL.

DOUTOR EM CIÊNCIAS

Aprovado por:

Prof. Antonio André Novotny, DSc. (PRESIDENTE)

Eduardo Alberto de Souza Neto, PhD.

Jan Sokołowski, PhD.

Eduardo Alberto Fancello, DSc.

Gustavo Alberto Perla Menzala, PhD.

Abimael Fernando Dourado Loula, DSc.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2009

GIUSTI, SEBASTIÁN MIGUEL

G538a Análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escalas /
Sebastián Miguel Giusti. Petrópolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação
Científica, 2009.

xxiii, 176 p. : il.; 29 cm

Orientadore(s): Antonio André Novotny e Eduardo Alberto de Souza Neto

Tese (D.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2009.

1. Equações diferenciais parciais. 2. Derivada topológica. 3. Modelagem
Multi-escala. I. Antonio André Novotny II. Eduardo Alberto de Souza Neto III.
MCT/LNCC IV. Título

CDD – 515.353

“I have no special talents. I am only
passionately curious”

Albert Einstein (1879-1955)

Para Ale

Prefácio

Este trabalho de doutorado resume as minhas atividades de pesquisa dos quatro anos de participação no programa de pós-graduação do Laboratório Nacional de Computação Científica do Ministério da Ciência e Tecnologia da República Federativa do Brasil. A missão principal do curso de pós-graduação é aperfeiçoar profissionais na área da modelagem computacional, sendo a formação multidisciplinar fornecida pela instituição a característica principal do mencionado programa. Participar deste curso não foi uma tarefa fácil, mais ainda para uma pessoa com formação em engenharia civil não muito habituada com o rigor matemático necessário para encarar um tema tão desafiador como o proposto. Quanto a minhas pesquisas, sempre tive um grande interesse nas ciências mecânicas o que é refletido a longo de todo o presente estudo. Este trabalho é o resultado de um esforço pessoal muito grande e espero, ansiosamente, poder transmitir de uma maneira agradável todos os conhecimentos adquiridos neste período.

Gostaria de aproveitar este espaço para os agradecimentos, começando por meus pais Alberto e Adriana, os quais sempre me apoiaram incondicionalmente em todas as minhas iniciativas e cuja ajuda teve um caráter fundamental para finalizar este trabalho. A minha irmã Analía, pela irreverência, perspicácia e alegria que norteiam sua vida.

Agradeço aos meus orientadores, pelos valiosos ensinamentos, perseverança, infinita paciência, sincera amizade e respeito com que foi conduzido meu trabalho ao longo destes quatro anos. Ao professor Antônio André Novotny, por ter-me acolhido como orientando, pelo apoio no desenvolvimento deste trabalho, pelas valiosas discussões, generosidade, confiança, moral, ética, humildade e disciplina mostrada nestes anos de convívio. Por essas razões é difícil enumerar todas as palavras necessárias para demonstrar porque minha relação com André transcendeu notavelmente as barreiras do âmbito profissional, chegando a ser um grande amigo. Agradeço enormemente ao professor Eduardo Alberto de Souza Neto por ter aceitado trabalhar comigo num tema tão grato e, por sua vez, desafiador. Em especial, agradeço-lhe pela generosidade, confiança e alegria com que transmite sua experiência e conhecimento.

Aos professores Raúl Antonino Feijó e Edgardo Aliano Taroco, agradeço a disponibilidade, confiança e amizade com que compartilham seus conhecimentos e experiências com as novas gerações. Em especial, por serem exemplos de luta e perseverança, e pela forma respeitosa e infalível com que contribuíram a minha formação com suas adequadas observações.

Ao LNCC agradeço-lhe por ter-me aceitado no seu programa de pós-graduação, pela confiança e respeito dos seus funcionários, pela liberdade e gratos momentos vivenciados. A CAPES pelo apoio financeiro as minhas pesquisas, outorgado através da bolsa de Doutorado.

Agradeço, também, aos professores do LNCC pela dedicação e ensinamentos transmitidos nas aulas. Em particular aos professores Abimael Fernando Dourado Loula, Gustavo Alberto Perla Menzala e Cláudio Padra, que acompanharam desde o início meu desenvolvimento profissional, pela disponibilidade e adequadas observações dentro e fora das salas de aula.

Destaco a disponibilidade dos professores Jan Sokołowski e Eduardo Alberto Fancello para participar da banca de avaliação deste trabalho, razão pela qual sou muito grato.

Agradeço ao professor Mario Alberto Nieto, pois sendo ainda aluno do curso de engenharia civil na Facultad Regional Córdoba da Universidad Tecnológica Nacional, convidou-me a participar do seu grupo de pesquisa em mecânica estrutural no ano 2003,

fato que possibilitou meu primeiro contato com o mundo da ciência e motivou-me a trabalhar em desenvolvimento científico. Em particular, agradeço ao engenheiro Javier Eduardo Salomone pela sua generosa amizade e, em especial, pela orientação durante os meus primeiros passos como estagiário no grupo de pesquisa em informática para engenharia (CIII). Neste contexto destaco a uma pessoa muito importante do grupo: ao doutor Juan José Lopensino, por sua sincera amizade e permanente motivação e, especialmente, por ter-me vinculado ao LNCC através do professor André Novotny.

Durante a minha estadia em Petrópolis, tive a sorte de conhecer um grupo de pessoas que contribuiu de maneira significativa na minha formação tanto profissional com pessoal. Agradeço a Ignacio Larrabide, Gianina Ciccimarra, Pablo Blanco, Mariela Castellote, Sebastián Arias e Gabriela Arce Cardosa pela generosidade, ajuda, apoio e compreensão com que conduzem suas vidas; fatores que forneceram as bases de uma sincera amizade que não reconhece distância nem barreiras. Quero expressar, também, meu reconhecimento e gratidão aos meus amigos da pós-graduação do LNCC: Jairo Rocha de Faria, Cláudia Adam Ramos, Marcelo Miranda Barros, Riedson Baptista, Carlos Magno Martins Cosme e Diogo Marinho Almeida, pelos agradáveis momentos vivenciados.

Também gostaria de agradecer a Gustavo Colazo, Gustavo Mauhum, Pablo Persello, Diego Carranza, Maximiliano Castro, Pablo Hernández, Federico Marti, Juan Martinez e Guillermo Mosconi pela paciência e amizade de tantos anos.

Peço desculpas se esqueci de alguém, mas são tantas as pessoas que, direta ou indiretamente, apoiaram-me e participaram desta aventura que nesta hora de escrever os agradecimentos, com certeza, cometo o erro de não agradecer a todas elas.

Finalmente, anseio dedicar este trabalho a María Alejandra Asensio, incondicional companheira cuja inspiração, apoio e ajuda foi determinante nesta etapa da minha vida.

SEBASTIÁN MIGUEL GIUSTI
ABRIL 2009, PETRÓPOLIS - RJ

Resumo da tese submetida à Coordenação de Pós-Graduação do Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC/MCT como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Doutor em Ciências

ANÁLISE DE SENSIBILIDADE TOPOLÓGICA EM MODELOS CONSTITUTIVOS MULTI-ESCALAS

Sebastián Miguel Giusti

Abril/2009

Orientadores: Antonio André Novotny, Orientador
Eduardo Alberto de Souza Neto, Co-Orientador

O presente trabalho tem como propósito principal desenvolver a análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escala. Neste sentido, utilizando o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel e o conceito de média volumétrica, foi estabelecida uma formulação variacional para derivar uma elegante estrutura axiomática de modelos constitutivos multi-escala deste tipo, permitindo escrever as equações de equilíbrio na micro-escala de maneira rigorosa através de uma clara identificação dos espaços envolvidos. Com essa formulação, obteve-se uma estrutura adequada para o desenvolvimento da análise de sensibilidade topológica de modelos constitutivos multi-escala. De fato, como resultado fundamental dessa análise, foi identificado um campo tensorial que representa a derivada topológica do tensor constitutivo macroscópico quando é introduzida uma perturbação singular na micro-escala. As componentes do mencionado campo tensorial dependem apenas das soluções dos problemas variacionais canônicos associados ao domínio original não perturbado. Cabe mencionar que através desse resultado, é possível escrever de forma explícita a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico, permitindo obter rapidamente a derivada topológica para uma vasta classe de funcionais de forma. Em particular, neste trabalho são tratados dois problemas clássicos da modelagem computacional: condução estacionária de calor e elasticidade linear. Assim, inicialmente é desenvolvida a modelagem constitutiva multi-escala de cada um dos problemas ora mencionados. Em seguida, considerando que a micro-estrutura sofre uma perturbação singular caracterizada pela nucleação de uma inclusão circular composta de material com propriedades físicas distintas do meio, são calculadas as respectivas derivadas topológicas. Finalmente, são realizados diversos experimentos numéricos mostrando algumas das diferentes maneiras possíveis de utilização do tensor de sensibilidade topológica no projeto e/ou otimização de micro-estruturas especializadas, o que demonstra o caráter fundamental dos resultados desenvolvidos neste trabalho para a modelagem computacional.

Abstract of a Thesis Submitted to LNCC/MCT as a partial fulfilment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

TOPOLOGICAL SENSITIVITY ANALYSIS IN CONSTITUTIVE MULTI-SCALE MODELS

Sebastián Miguel Giusti

April/2009

Advisors: Antonio André Novotny, Thesis Advisor
Eduardo Alberto de Souza Neto, Thesis Co-Advisor

The purpose of the present work is to carry out a topological sensitivity analysis in constitutive multi-scale models. By making use of the Hill-Mandel Principle of Macro-Homogeneity and the concept of volume average, a variational formulation was established to derive a clearly structured axiomatic framework for constitutive multi-scale models of the present type, allowing the equilibrium equations at the micro-scale to be rigorously written through the clear identification of the functional spaces involved. This formulation lead to a structure that is particularly well-suited for the development of topological sensitivity analyses of constitutive multi-scale models of the present type. As a fundamental result of the topological sensitivity analyses carried out, tensorial fields were identified that represent the topological derivative of the macroscopic constitutive tensor when a singular perturbation is introduced at the micro-scale. The components of such tensorial fields depend on the solution of the canonical variational problems associated to the original unperturbed domain. It is worth emphasising that this result allows the topological asymptotic expansion of the macroscopic constitutive operator to be written explicitly which, in turn, makes it possible to get promptly the topological derivative for a vast class of shape functionals. In particular, in this thesis, two classical computational modelling problems are addressed within the proposed framework: stationary heat conduction and linear elasticity. Multi-scale constitutive models for both problems are firstly derived. Then, the corresponding topological derivatives are obtained by considering the micro-structure to suffer a singular perturbation characterised by the nucleation of a circular inclusion made of a material with physical properties different from those of the medium. Finally, several numerical experiments are performed which show some of the different possible manners of using the topological sensitivity tensor in the project/optimisation of specialised micro-structures. These demonstrate the fundamental nature of the results obtained in this work for use in the computational modelling context.

Sumário

Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xxi
Tabela de símbolos	xxiii
1. Introdução e Motivação	1
1.1 Modelagem multi-escala	2
1.2 Derivada topológica	5
1.3 Objetivos	7
1.4 Apresentação	8
2. Condução estacionária de calor	11
2.1 Modelagem multi-escala	12
2.1.1 Homogeneização e campos de temperatura microscópicos	13
2.1.2 Equilíbrio térmico do elemento de volume representativo	15
2.1.3 Fluxo de calor homogeneizado	16
2.1.4 Princípio de macro-homogeneidade de Hill-Mandel	17
2.1.5 Formulação do problema de equilíbrio térmico	19
2.1.6 Classes de modelos multi-escala	21
2.1.7 Tensor de condutividade térmica homogeneizado	28
2.1.8 Implementação computacional	30
2.1.9 Experimentos numéricos	36
2.2 Análise de sensibilidade topológica	45
2.2.1 Obtenção da derivada topológica	47
2.2.2 Interpretação dos resultados	55
2.2.3 Resultados numéricos	57
2.3 Comentários adicionais	80
3. Elasticidade linear	83
3.1 Modelagem multi-escala	84
3.1.1 Homogeneização e campos de deslocamentos microscópicos	85
3.1.2 Equilíbrio mecânico do elemento de volume representativo	88
3.1.3 Tensão homogeneizada	89
3.1.4 Princípio de macro-homogeneidade de Hill-Mandel	90
3.1.5 Formulação do problema de equilíbrio mecânico	91
3.1.6 Classes de modelos multi-escala	93
3.1.7 Tensor de elasticidade homogeneizado	100
3.1.8 Implementação computacional	103

3.1.9	Experimentos numéricos	110
3.2	Análise de sensibilidade topológica	121
3.2.1	Obtenção da derivada topológica	123
3.2.2	Interpretação dos resultados	132
3.2.3	Experimentos numéricos	134
3.3	Comentários adicionais	157
4.	Conclusões	159
4.1	Contribuições deste trabalho	159
4.2	Problemas em aberto	161
4.3	Indicadores acadêmicos	162
A.	Análise assintótica	163
A.1	Condução estacionária de calor	163
A.2	Elasticidade linear	165
B.	Estimativas de convergência	169
B.1	Condução estacionária de calor	169
B.2	Elasticidade linear	171
C.	Operações básicas	173
C.1	Álgebra tensorial	173
C.2	Operações de diferenciação	175
C.3	Operações integrais	175
	Referências bibliográficas	i

Lista de Figuras

2.1	macro-escala cont�nua com a micro-escala local	13
2.2	geometrias do EVR peri�dico - c�lulas quadradas e hexagonais.	23
2.3	geometrias discretas para os EVR peri�dicos.	32
2.4	exemplo 1 - EVR estudados.	37
2.5	exemplo 1 - compara�o dos resultados com os modelos te�ricos.	38
2.6	exemplo 2 - geometria do EVR	39
2.7	exemplo 2 - resultados e compara�es.	40
2.8	exemplo 3 - geometrias dos EVRs.	41
2.9	exemplo 3 - resultados e compara�o com os dados experimentais.	43
2.10	exemplo 4 - geometria do EVR.	44
2.11	micro-estrutura perturbada com uma inclus�o \mathcal{I}_ε	45
2.12	EVR de an�lise e malha para o estudo.	53
2.13	verifica�o de converg�ncia da derivada topol�gica num�rica.	55
2.14	exemplo 1 - EVR utilizado no estudo.	57
2.15	exemplo 1 - caso A: componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma = 0.1$	58
2.16	exemplo 1 - caso B: componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma = 10.0$	59
2.17	exemplo 1 - EVR perturbado	60
2.18	exemplo 1 - EVR perturbado	60
2.19	exemplo 1 - EVR perturbado	61
2.20	exemplo 1 - EVR perturbado	61
2.21	exemplo 2 - geometria do EVR de an�lise.	62
2.22	exemplo 2 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow 0$	62
2.23	exemplo 2 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow \infty$	63
2.24	exemplo 2 - tend�ncia do campo $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$	64
2.25	exemplo 3 - geometria do EVR de an�lise.	64
2.26	exemplo 3 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow 0$	65
2.27	exemplo 3 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow \infty$	66
2.28	exemplo 3 - tend�ncia da componente $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$	67

2.29	exemplo 4 - geometria do EVR de análise.	67
2.30	exemplo 4 - configuração das perturbações.	69
2.31	exemplo 4 - função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ para o modelo de flutuação periódica.	70
2.32	exemplo 5 - geometria do EVR de análise.	71
2.33	exemplo 5 - domínios topologicamente perturbado em cada iteração.	72
2.34	exemplo 5 - evolução da função \varkappa na simulação.	73
2.35	exemplo 6 - domínios de análise para os casos de estudo.	75
2.36	exemplo 6 - campo $D_{T_\mu}\psi$ para os casos de estudo.	76
2.37	exemplo 6 - tendência mostrada pelo campo $D_{T_\mu}\psi$	76
2.38	exemplo 7 - geometria do EVR objetivo.	77
2.39	exemplo 7 - domínios de análise para os casos de estudo.	78
2.40	exemplo 7 - evolução da topologia no processo de otimização - caso A.	79
2.41	exemplo 7 - evolução da topologia no processo de otimização - caso B.	79
2.42	exemplo 7 - topologias obtidas na iteração $j = 130$	79
2.43	exemplo 7 - evolução do valor relativo da função custo.	80
3.1	macro-escala contínua com micro-escala local.	85
3.2	separação aditiva do campo de deslocamento microscópico.	86
3.3	geometrias do EVR periódico - células quadradas e hexagonais.	96
3.4	geometrias discretas para os EVR periódicos.	106
3.5	exemplo 1 - geometria dos EVRs estudados.	112
3.6	exemplo 1 - resultados e comparação com os modelos teóricos.	112
3.7	exemplo 2 - geometria do EVR.	114
3.8	exemplo 2 - resultados e comparação com os modelos teóricos.	115
3.9	exemplo 3 - geometrias dos EVRs estudados.	116
3.10	exemplo 3 - resultados e comparação com dados experimentais.	117
3.11	exemplo 4 - geometria do EVR.	118
3.12	exemplo 4- resultados obtidos.	119
3.13	exemplo 5 - geometria do EVR.	120
3.14	micro-estrutura perturbada com uma inclusão \mathcal{I}_ε	121
3.15	verificação numérica - EVR e malha de elementos finitos.	131

3.16	verificação de convergência da derivada topológica numérica.	132
3.17	exemplo 1 - EVR utilizado no estudo.	135
3.18	exemplo 1 - caso A: componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para $\gamma = 0.1$	136
3.19	exemplo 1 - caso B: componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para $\gamma = 10.0$	137
3.20	ex.1 - EVR perturbado	139
3.21	ex.1 - EVR perturbado	139
3.22	ex.1 - EVR perturbado	139
3.23	ex.1 - EVR perturbado	139
3.24	ex.1 - EVR perturbado	140
3.25	ex.1 - EVR perturbado	140
3.26	ex.1 - EVR perturbado	140
3.27	ex.1 - EVR perturbado	140
3.28	ex.1 - EVR perturbado	141
3.29	exemplo 2 - geometria do EVR de análise.	141
3.30	exemplo 2 - caso A: componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow 0$	142
3.31	exemplo 2 - caso B: componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow \infty$	143
3.32	exemplo 2 - tendência do campo $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1111}$	144
3.33	exemplo 3 - geometria do EVR de análise.	145
3.34	exemplo 3 - configuração das perturbações.	146
3.35	exemplo 3 - função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ para o modelo periódico.	148
3.36	exemplo 4 - geometria do EVR de análise.	148
3.37	exemplo 4 - domínios topologicamente perturbado em cada iteração.	150
3.38	exemplo 4 - evolução da função ξ na simulação.	151
3.39	exemplo 5 - domínios de análise para os casos de estudo.	153
3.40	exemplo 5 - campo D_T para os casos de estudo.	153
3.41	exemplo 5 - tendência do campo D_T	154
3.42	exemplo 6 - geometria do domínio de análise.	155
3.43	exemplo 6 - evolução da topologia no processo de otimização.	156
3.44	exemplo 6 - resultados obtidos.	156
3.45	exemplo 6 - evolução do valor relativo da função custo.	157
A.1	domínio infinito com inclusão circular \mathcal{I}_ε	167

Lista de Tabelas

2.1	exemplo 3 - propriedades físicas.	41
2.2	exemplo 3 - resposta constitutiva macroscópica.	42
2.3	exemplo 4 - resposta constitutiva macroscópica.	69
3.1	exemplo 1 - propriedades físicas dos materiais.	111
3.2	exemplo 2 - propriedades físicas dos materiais.	114
3.3	exemplo 3 - propriedades físicas dos constituintes do material composto. . . .	116
3.4	exemplo 3 - resposta constitutiva macroscópica.	147

Tabela de símbolos

\cdot	produto escalar.	$H^n(\Omega)$	espaço de Hilbert de ordem n no domínio Ω .
\otimes	produto tensorial.	$\varepsilon \rightarrow a$	ε tende ao valor a .
\boxtimes	produto tensorial de transformação.	$\lim_{\varepsilon \rightarrow a}$	limite quando ε tende ao valor a .
\otimes_s	parte simétrica do produto tensorial.	$o(\cdot)$	operador que contem elementos de maior ordem que (\cdot) .
v, u, λ, k	escalares.	$\mathcal{O}(\cdot)$	operador que contem elementos da mesma ordem que (\cdot) .
$\mathbf{x}, \mathbf{n}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\nu}$	vetores.	$\text{tr}(\cdot)$	traço de (\cdot) .
$\mathbf{I}, \mathbf{K}, \mathbf{P}$	tensores de segunda ordem.	$(\cdot) _\xi$	(\cdot) avaliado em ξ .
$\mathbf{I}, \mathbf{K}, \mathbf{P}$	tensores de terceira ordem.	$ (\cdot) $	módulo de (\cdot) , valor absoluto.
$\mathbb{I}, \mathbb{K}, \mathbb{P}$	tensores de quarta ordem.	$\ (\cdot)\ _S$	norma de (\cdot) no espaço S .
$\mathbf{I}, \mathbf{K}, \mathbf{P}$	matrizes.	$ (\cdot) _S$	semi norma de (\cdot) no espaço S .
\mathbf{F}^T	transposta da matriz \mathbf{F} .	$\llbracket(\cdot)\rrbracket$	salto de (\cdot) através do contorno da inclusão, i.e. $\llbracket\eta\rrbracket = \eta _m - \eta _i$.
\mathbf{F}^{-1}	inversa da matriz \mathbf{F} .	$\frac{\partial(\cdot)}{\partial\xi}$	derivada parcial de (\cdot) com relação a ξ .
$\mathcal{J}_{(\cdot)}(\xi)$	funcional de forma definido no domínio (\cdot) avaliado em ξ .	$\frac{d(\cdot)}{d\xi}$	derivada total de (\cdot) com relação a ξ .
$\psi(\cdot)$	funcional de forma definido no domínio (\cdot) .	$\text{div}(\cdot)$	divergência de (\cdot) .
\emptyset	conjunto vazio.	$\nabla(\cdot)$	gradiente de (\cdot) .
\mathbf{e}_i	i -ésimo vetor ortonormal da base do espaço Euclideano.	$\nabla^s(\cdot)$	parte simétrica do gradiente de (\cdot) .
Ω, ω	domínios de forma arbitrária.	$\Delta(\cdot)$	Laplaceano de (\cdot) .
$\partial\Omega, \partial\omega$	contorno de Ω e ω , respectivamente.	$\left\langle \frac{\partial\mathcal{J}_\Omega(\xi)}{\partial\xi}; \eta \right\rangle$	derivada Fréchet do funcional $\mathcal{J}_\Omega(\xi)$ avaliado em ξ na direção η .
dV, dS	elementos diferenciais de volume e superfície, respectivamente.	$D_T\psi$	Derivada topológica do funcional ψ .
EVR	Elemento de Volume Representativo.		
V_μ, V_μ^m, V_μ^i	Volume total, da matriz e da inclusão do EVR.		
Ω_μ	domínio do EVR.		
$\partial\Omega_\mu$	contorno de Ω_μ .		
$\overline{(\cdot)}$	fecho do conjunto (\cdot) .		
\mathfrak{R}^n	espaço real de dimensão n .		
\mathcal{N}	conjunto dos números naturais.		

Capítulo 1

Introdução e Motivação

Em diversos âmbitos da ciência existe a necessidade de conhecer de uma forma suficientemente precisa a resposta constitutiva de um corpo submetido a um determinado estado de excitação. Inicialmente essa questão foi adequadamente respondida através das chamadas teorias constitutivas fenomenológicas, nas quais a resposta constitutiva pode ser estimada a partir do estudo do comportamento de certas variáveis internas de interesse, dependendo de cada problema. No entanto, com o avanço da tecnologia e a maior demanda de conhecimento sobre comportamento de materiais, vindas principalmente das indústrias metal-mecânica, química, eletrônica, aeroespacial e civil, entre outras; essa questão inicial passou a ser difícil ou mesmo impossível de ser respondida utilizando apenas as teorias fenomenológicas. Dessa necessidade foram desenvolvidas nas últimas décadas as chamadas teorias multi-escala, onde a resposta constitutiva do material é obtida a partir da análise em diferentes escalas de comprimento e/ou tempo. Através da abordagem multi-escala é possível transferir informação do comportamento da constituição intrínseca do material (micro-estrutura) do nível atômico, se for necessário, até o nível do corpo macro-contínuo, obtendo-se, como conseqüência, estimativas muito precisas da resposta constitutiva do material estudado. Tais avanços na compreensão do comportamento constitutivo dos materiais permitiram ir muito além da modelagem. De fato, passou-se inclusive a utilizar a modelagem constitutiva multi-escala no projeto da micro-estrutura de um material de modo a obter um comportamento macroscópico desejado. Para compreender melhor o impacto desses avanços, como exemplo pode-se mencionar o caso dos materiais biológicos, que possuem uma micro-estrutura quase impossível de ser reproduzida artificialmente, mas sua resposta constitutiva macroscópica, para alguns casos de interesse prático, pode ser bem determinada. Uma vez conhecida a resposta constitutiva macroscópica, poder-se-ia desenhar um material sintético que reproduza, com um nível de precisão adequado, a mesma resposta constitutiva macroscópica do material biológico. Uma situação em que este tipo de aplicação traria benefícios imediatos é na área médica, em particular no desenvolvimento de próteses. De fato, uns dos maiores problemas que limitam a vida útil das próteses para ossos é a degradação da região de contato (interface) entre o material artificial (prótese) e o biológico (osso). Especialistas da área acreditam que a solução é construir as próteses com um material artificial cuja micro-estrutura favoreça a deposição e retenção das células biológicas dos ossos no interior do material, permitindo (num prazo

de tempo completamente aceitável) a assimilação completa da prótese pelo osso, gerando como conseqüência uma melhora substancial na qualidade de vida das pessoas que utilizam estas próteses.

Retomando a discussão levantada anteriormente, cabe mencionar que pesquisadores da área da mecânica computacional têm investido muito tempo e esforço no desenvolvimento de diversas técnicas computacionais para sínteses de microestruturas. Importantes contribuições nesse sentido foram alcançadas nos trabalhos de Sigmund (1994) [111], Fonseca (1997) [39], Silva *et al.* (1997) [112], Kikuchi *et al.* (1998) [63], Silva *et al.* (1998) [113], Silva *et al.* (1999) [114], Yin *et al.* (2000) [135], Hyun & Torquato (2001) [59] e Torquato *et al.* (2002) [128]. As principais idéias e contribuições desses trabalhos podem ser achadas no livro de Torquato (2005) [127]. Para os avanços mais recentemente podem ser citados, por exemplo, os trabalhos de Guest & Prevost (2006) [46] e Challis *et al.* (2008) [28]. A característica principal desses trabalhos é a utilização de procedimentos de homogeneização periódica multi-escala conjuntamente com técnicas de otimização baseadas em métodos relaxados, onde as mudanças na micro-estrutura são conduzidas pela sensibilidade do problema às variações de um campo de densidade fictícia.

No entanto, uma questão fundamental que permanece ainda em aberto é como determinar a sensibilidade topológica do operador que caracteriza a resposta constitutiva macroscópica quando uma perturbação singular é introduzida na micro-estrutura. Neste contexto, uma forma bastante geral de abordar o problema é utilizando o conceito de derivada topológica, que representa a sensibilidade topológica de um dado funcional de forma quando perturbações singulares (tipicamente furos) são introduzidas no domínio de definição do problema. A análise de sensibilidade topológica foi rigorosamente introduzida no final de década passada no trabalho de Sokołowski & Źochowski (1999) [116], e tem-se mostrado como uma poderosa ferramenta na resolução de diversos problemas como por exemplo: otimização topológica, problemas inversos e processamento de imagens (restauração e segmentação). Cabe mencionar que, desde a publicação do artigo ora citado até o presente trabalho, não se encontra na literatura o cálculo da derivada topológica no contexto de modelos multi-escala. Sendo assim, além de ser um tema em aberto, nunca antes reportado na literatura, a análise de sensibilidade topológica de modelos constitutivos multi-escala desenvolvida neste trabalho conduz a um resultado teórico fundamental, com potenciais aplicações sobretudo na síntese de microestruturas especializadas. Antes de discutir os objetivos deste trabalho, a serem apresentados na Seção 1.3, uma breve resenha histórica destas duas grandes áreas (modelagem multi-escala e derivada topológica) são apresentadas nas Seções 1.1 e 1.2. Em ambas as seções são salientados os trabalhos pioneiros e as mais recentes aplicações dessas áreas do conhecimento.

1.1 Modelagem multi-escala

Durante os últimos anos, a modelagem constitutiva de sólidos por meios de teorias de múltiplas escalas se tornou um assunto de pesquisa intensiva dentro dos grupos de mecânica aplicada e computacional. O interesse crescente na modelagem de sólidos levando em conta informação de várias escalas é orientado principalmente pela demanda

atual por modelos constitutivos mais precisos, pois as teorias constitutivas fenomenológicas convencionais parecem estar atingindo o limite da capacidade descritivo-preditiva. Nas duas décadas anteriores, o uso prático de teorias constitutivas de sólidos tem passado gradualmente de disciplinas de engenharia tradicionais a aplicações mais exigentes que requerem a descrição do comportamento constitutivo de materiais que apresentam históricos de deformação complexos. Frequentemente, a modelagem de tais fenômenos por meio de teorias puramente macroscópicas resulta em discrepâncias significativas entre a resposta constitutiva estimada e a observada. Essa diferença, porém, pode aumentar dramaticamente com a complexidade do material. Em tais casos, o desenvolvimento e uso de teorias multi-escala parece ser uma alternativa muito promissora aos modelos fenomenológicos clássicos, fornecendo descrições mais realísticas da resposta constitutiva. O interesse em abordagens multi-escalas na modelagem computacional é evidente pelo número crescente de artigos em periódicos especializados no tema, por exemplo, Hori & Nemat-Nasser (1999) [57], Michel *et al.* (1999) [81], Nemat-Nasser (1999) [88], Miehe (2002) [82], Miehe & Koch (2002) [83], Clayton & McDowell (2003) [29], Ibrahimbegović & Markovič (2003) [60], Kouznetsova *et al.* (2004) [65], Matsui *et al.* (2004) [78], como também as conferências e simpósios nos principais congressos e eventos científicos mundiais, por exemplos, Owen & Oñate (2005) [98], Sadowski (2005) [105], Tvergaard (2006) [131], Eberhard (2006) [34] e Schrefler & Perego (2008) [110].

A origem das teorias de homogeneização multi-escala situa-se na década dos 70. Desenvolvida, simultaneamente, por Sanchez-Palencia na França e Bakhvalov na Rússia. Ambos focaram seus trabalhos na modelagem matemática de meios heterogêneos com distribuição periódica da micro-estrutura do material. Em particular, Sanchez-Palencia trabalhou no problema de propagação de ondas num meio heterogêneo (Sanchez-Palencia (1971) [107] e Sanchez-Palencia (1974) [108]). Uma revisão detalhada dos avanços da teoria de homogeneização periódica durante as décadas de 70 e 80 podem ser encontrada em diversos livros, por exemplo, Bensoussan *et al.* (1978) [17], Sanchez-Palencia (1980) [109], Lions (1981) [73] e Bakhvalov & Panasenko (1989) [14]; e mais recentemente em Markov (2000) [76] e Böhm (2004) [18].

Das diferentes metodologias existentes na literatura¹, no desenvolvimento deste trabalho será utilizada uma modelagem constitutiva multi-escala construída a partir de formulações variacionais e baseada nos conceitos da média volumétrica de campos micro-estruturais sobre um elemento de volume representativo (EVR)². Dentre os principais trabalhos que empregaram essa metodologia, publicados em periódicos, destacam-se, entre outros, Michel *et al.* (1999) [81], Nemat-Nasser (1999) [88], Miehe & Koch (2002) [83] e Terada *et al.* (2003) [124]. No entanto, teorias multi-escalas deste tipo são apresentadas frequentemente de uma maneira *ad-hoc*, o que dificulta a distinção entre as hipóteses básicas de cada modelo e as conseqüências destas sobre a teoria resultante. Neste sentido, no trabalho de de Souza Neto & Feijóo (2006) [32] foi apresentada uma completa descrição

¹Para uma descrição detalhada das diferentes técnicas existentes, veja Böhm (2004) [18].

²No trabalho de Ostoja-Starzewski (2006) [96], apresenta-se uma discussão detalhada acerca da validade física deste tipo de representação para micro-estruturas de materiais.

das bases variacionais (cinemáticas) necessárias para a construção axiomática de modelos multi-escala deste tipo, onde os princípios básicos utilizados, no contexto da mecânica de sólidos, são: *(i)* equilíbrio do EVR; *(ii)* Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel (Hill (1965) [53] e Mandel (1971) [75]); *(iii)* média volumétrica dos tensores de deformação e tensão; *(iv)* suposição de que o espaço das flutuações de deslocamento cinematicamente admissíveis no EVR é um subespaço do espaço da mínima restrição cinemática sobre as flutuações de deslocamento compatíveis com a hipótese da média volumétrica de deformação microscópica. Considerando esta estrutura variacional, qualquer classe de modelo constitutivo está completamente definida pela escolha do espaço dos deslocamentos virtuais do EVR (incluindo as restrições cinemáticas assumidas para o EVR). Neste contexto, a forma variacional do Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel desempenha um papel crucial, pois permite que o sistema de cargas externas do EVR (forças de corpo e campos de trações externas) seja enxergado como meras reações às restrições cinemáticas prescritas no EVR. Com esta modelagem, classicamente deriva-se quatro modelos multi-escalas, quais sejam: *(a)* modelo de Taylor, mais conhecido na literatura como regra da mistura; *(b)* modelo de deslocamento linear no contorno do EVR; *(c)* modelo de flutuação de deslocamento periódica no contorno do EVR; e *(d)* modelo da mínima restrição cinemática. Além disso, esta técnica permite obter uma expressão fechada do operador constitutivo homogeneizado, através da resolução de um sistema canônico de equações variacionais no nível microscópico. Essa representação da resposta constitutiva macroscópica geralmente é aplicável a problemas nos quais a resposta constitutiva micro-estrutural é descrita por teorias baseadas em variáveis internas (fenomenológicas). Permitindo que uma micro-estrutura constituída por materiais descritos a partir dessas teorias gerem uma resposta constitutiva macroscópica dificilmente reproduzível por teorias convencionais baseadas na fenomenologia do material macroscópico. Além do mais, esta metodologia também é aplicável a problemas nos quais as variáveis internas microscópicas evoluem no tempo, sendo necessário aproximar a evolução temporal por algum esquema de integração numérica incremental, como as proposta por Miehe *et al.* (1999) [84] e Giusti *et al.* (2009) [43], entre outros.

Cabe mencionar que esta modelagem constitutiva multi-escala foi estendida para problemas de grandes deformações e grandes deslocamentos em de Souza Neto & Feijóo (2008) [33], onde é mostrado que a média volumétrica do tensor tensão de Cauchy sobre a configuração deformada do EVR é mecanicamente equivalente à média volumétrica do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff sobre a configuração de referência, ou seja, as médias volumétricas material ou espacial do tensor tensão resultam em modelos macroscópicos idênticos³. Finalmente, em Speirs *et al.* (2008) [121], esta técnica foi aplicada com sucesso na modelagem constitutiva do tecido da parede arterial do sistema cardiovascular humano. Nesse mesmo trabalho são comparados os resultados da modelagem discutida anteriormente com resultados prévios da modelagem computacional clássica do tecido arterial, veja Holzapfel *et al.* (2000) [56], Humphrey (2003) [58] e Holzapfel (2004) [55].

³Esta equivalência mecânica é estritamente válida apenas para os modelos de deformação homogênea do EVR, deslocamento linear no contorno do EVR e flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR. Entretanto, não é válida em geral para o modelo da mínima restrição cinemática no EVR.

1.2 Derivada topológica

A expansão assintótica topológica permite quantificar a sensibilidade de um dado funcional de forma em relação a uma perturbação infinitesimal na topologia do domínio de definição do problema. O principal termo dessa expansão, denominado derivada topológica, depende apenas da solução do problema definido no domínio não perturbado. Assim, a análise de sensibilidade topológica, associada de maneira geral a uma perturbação singular introduzida em um ponto arbitrário do domínio, pode ser obtida através de funções calculadas sobre o domínio original. Mais precisamente, considere uma função de forma ψ possuindo a regularidade necessária de modo que admita a seguinte expansão

$$\psi(\varepsilon) = \psi(0) + f(\varepsilon) D_T \psi + o(f(\varepsilon)), \quad (1.1)$$

onde $\psi(0)$ é a função de forma associada ao domínio original e $\psi(\varepsilon)$ denota a função de forma associada ao domínio topologicamente perturbado, sendo ε um parâmetro pequeno. Além do mais, $f(\varepsilon)$ é uma função *regularizadora* tal que $f(\varepsilon) \rightarrow 0$, com $\varepsilon \rightarrow 0^+$, e $o(f(\varepsilon))$ denota os termos de maior ordem que $f(\varepsilon)$, tal que:

$$\frac{o(f(\varepsilon))}{f(\varepsilon)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (1.2)$$

Assim, a eq.(1.1) é denominada *expansão assintótica topológica*, sendo que o termo $D_T \psi$ é definido como a *derivada topológica de primeira ordem* da função de forma ψ . Observa-se ainda que $D_T \psi$ pode ser interpretado como uma *correção de primeira ordem* da função de forma $\psi(0)$ para obter $\psi(\varepsilon)$. Das definições anteriores e, particularmente, da eq.(1.1) tem-se que a definição clássica da derivada topológica é dada por

$$D_T \psi = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(\varepsilon) - \psi(0)}{f(\varepsilon)}. \quad (1.3)$$

No entanto, desde que a expansão assintótica topológica (1.1) satisfaça certas propriedades, uma definição alternativa da derivada topológica pode ser escrita da seguinte maneira (Novotny (2003) [90])

$$D_T \psi = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{f'(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} \psi(\varepsilon), \quad (1.4)$$

onde a derivada do funcional $\psi(\varepsilon)$ em relação ao parâmetro ε pode ser interpretada como a análise de sensibilidade à mudança de forma clássica, para o caso particular em que a perturbação singular sofre uma expansão uniforme.

Historicamente, o conceito de derivada topológica foi rigorosamente definido pela primeira vez em Sokołowski & Źochowski (1999) [116], considerando domínios topologicamente perturbados mediante a introdução de furos com condição de contorno de Neumann homogênea em sua fronteira. Ainda no mesmo ano, em Sokołowski & Źochowski (1999) [117] é apresentado o cálculo da derivada topológica para a equação de Laplace tridimensional. No ano seguinte, no trabalho de C ea *et al.* (2000) [26], esse conceito foi estendido

para domínios perturbados com furos com condição de contorno de Dirichlet prescrita em sua fronteira. No ano seguinte foi proposta em Garreau *et al.* (2001) [40] uma técnica para o cálculo da derivada topológica, denominada *domain truncation method*. Esse método foi então estendido para furos de forma arbitrária no trabalho de Guillaume & Sid Idris (2002) [47]. Mais tarde, em Novotny *et al.* (2003) [92] foi proposta uma definição alternativa para a derivada topológica que permitiu estabelecer a relação estrita entre os conceitos de análise de sensibilidade topológica e análise de sensibilidade à mudança de forma, o que resultou em um novo método de cálculo da derivada topológica denominado *topological-shape sensitivity method*, cujos resultados preliminares foram apresentados um ano antes em Novotny *et al.* (2002) [91]. Ainda em 2003, em Feijóo *et al.* (2003) [38] foi apresentada uma análise comparativa entre o *topological-shape sensitivity method* e o *domain truncation method*. No trabalho de Nazarov & Sokołowski (2003) [86] foram utilizados os métodos *mached* e *compound* na construção das expansões assintóticas de funcionais de volume e superfície.

No trabalho de Lewinski & Sokołowski (2003) [72] foi estudado o problema de variação da energia de deformação devido ao surgimento de pequenas cavidades em sólidos elásticos, obtendo com a derivada topológica os mesmos resultados fornecidos por Maz'ya *et al.* (1991) [80] e por Nemat-Nasser & Hori (1993) [89], para furo elíptico no \mathbb{R}^2 e cavidade esférica no \mathbb{R}^3 . Ainda no mesmo ano, em Samet *et al.* (2003) [106] foi considerada a equação de Helmholtz com condição de contorno de Dirichlet homogênea na fronteira do furo; em Sokołowski (2003) [115] foram apresentadas novas condições de otimalidade para uma classe de problemas em otimização de forma e topológica; Novotny (2003) [90] defende a primeira tese de doutorado na área e, logo em seguida, Amstutz (2003) [3] defende a segunda.

No ano seguinte em Guillaume & Sid Idris (2004) [48] a análise de sensibilidade topológica foi realizada para a equação de Stokes considerando funcionais de forma gerais e furos de forma arbitrária e em Burger *et al.* (2004) [22] a derivada topológica foi utilizada para obter a inicialização de métodos *level-sets*. No trabalho de Nazarov & Sokołowski (2004) [87] foi calculada a expansão assintótica da solução e do funcional energia correspondente ao problema de Poisson para uma perturbação associada à formação de um ligamento. Em Feijóo (2004) [37] a derivada topológica foi calculada para o problema de Helmholtz em um meio infinito, sendo o resultado empregado na resolução do problema inverso do espalhamento.

O primeiro resultado em análise de sensibilidade topológica para um caso não-linear foi obtido em Amstutz (2005) [4], onde a derivada topológica foi calculada para o problema de Navier-Stokes considerando uma condição de não deslizamento no contorno de um obstáculo de forma arbitrária. No trabalho de Amstutz *et al.* (2005) [8] o gradiente topológico foi aplicado no problema de identificação de trincas em um domínio bidimensional, considerando a equação de Laplace e o critério de Khon-Vogelius como função custo, Khon & Vogelius (1987) [64]. Em Sokołowski & Żochowski (2005) [119] foi calculada a derivada topológica para problemas de contato, e para problemas com obstáculos em Sokołowski & Żochowski (2005) [120]. No trabalho de Hintermüller (2005) [54] a derivada

topológica foi utilizada conjuntamente com métodos *level-sets* no desenvolvimento de algoritmos eficientes de otimização. Em Novotny *et al.* (2005) [93] o *topological-shape sensitivity method* foi aplicado para o cálculo da derivada topológica no problema flexão elástica linear de placas de Kirchhoff. No trabalho de Masmoudi *et al.* (2005) [77] foi estudada a sensibilidade topológica para a equação de Maxwell tridimensional quando o domínio é perturbado com a introdução de um pequeno objeto dielétrico ou metálico, sendo mostradas algumas aplicações no problema inverso de identificação de propriedades eletromagnéticas.

A questão da utilização da derivada topológica conjuntamente com o método de *level-set* é retomada no trabalho de Amstutz & Andrä (2006) [7], onde foi desenvolvido um novo algoritmo de evolução baseado na derivada topológica. Nos trabalhos de Guzina & Bonnet (2006) [50] e Bonnet (2006) [20] a derivada topológica foi calculada no problema de acústica respectivamente no domínio da frequência e do tempo, permitindo sua aplicação no problema inverso do espalhamento. A determinação da derivada topológica em alguns problemas não lineares é retomada no ano 2006 em Amstutz (2006) [6].

No ano seguinte, Larrabide (2007) [70] defende sua tese de doutorado aplicando a derivada topológica no contexto de restauração e segmentação de imagens médicas. Ainda nesse período são publicados três artigos na área de processamento de imagens, Auroux *et al.* (2007) [11], Belaid *et al.* (2008) [15] e Larrabide *et al.* (2008) [71]. No trabalho de Guzina & Chikichev (2007) [51] foi apresentada uma aplicação da derivada topológica em diagnósticos médicos, sobretudo na identificação de câncer de mama. Em Novotny *et al.* (2007) [94] foi apresentado o cálculo da derivada topológica no problema de elasticidade linear tridimensional, que possibilitou a otimização topológica de estruturas tridimensionais. Nos trabalhos Rocha de Faria (2007) [30] e Rocha de Faria *et al.* (2007) [31] foi considerado mais um termo na expansão assintótica topológica, denominado derivada topológica de segunda ordem, que permitiu obter estimativas mais precisas para o valor da função custo e melhores direções de descida em problemas de otimização. Finalmente, em Giusti *et al.* (2008) [45] é proposto um método de otimização topológica capaz de pôr e retirar material simultaneamente em cada passo do processo de otimização, permitindo obter configurações sub-ótimas com desempenho superior àquelas obtidas simplesmente retirando material.

1.3 Objetivos

Da breve descrição apresentada nas seções anteriores, observa-se que a estrutura variacional na qual a teoria multi-escala está fundada fornece um ferramental adequado para o uso conjunto com os conceitos da análise de sensibilidade topológica (derivada topológica), destacando-se, em particular, a clara identificação dos espaços utilizados na modelagem. Assim sendo, o objetivo principal deste trabalho é desenvolver a análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escala, visando obter a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando uma perturbação singular é introduzida na micro-escala. Ressalta-se que o enfoque do mencionado estudo é **essencialmente teórico**, no entanto são realizados diversos experimentos numéricos com o

objetivo de avaliar o potencial da formulação e das ferramentas desenvolvidas neste trabalho, sobretudo no projeto de micro-estruturas especializadas.

Como produto final da análise de sensibilidade topológica de modelos constitutivos multi-escala, obter-se-á a forma explícita da derivada topológica, cujo formato final é notavelmente simples e depende apenas da solução do sistema canônico de equações variacionais associadas ao EVR não perturbado. Em particular, a derivada topológica resulta em um campo tensorial que representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando uma perturbação singular é introduzida na micro-escala. Além do mais, será mostrado que a derivada topológica pode ser potencialmente utilizada em aplicações de interesse prático como, por exemplo, na síntese e projeto ótimo de micro-estruturas para satisfazer um comportamento macroscópico específico. No entanto, os conceitos da análise de sensibilidade topológica e, em particular, da derivada topológica são bem mais amplos, pois a metodologia aqui desenvolvida pode ser aplicada a problemas inversos e na modelagem de fenômenos físicos que experimentam alterações na configuração do domínio da micro-escala.

Finalmente, cabe ainda mencionar que, levando em conta a detalhada análise bibliográfica apresentada na Seção 1.2, é possível afirmar que a análise de sensibilidade topológica na modelagem constitutiva multi-escala é um tema que permanece em aberto até o presente trabalho.

1.4 Apresentação

Lembrando o mencionado nas seções anteriores, neste trabalho é desenvolvida a análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escala visando obter a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando uma perturbação singular é introduzida na micro-escala. Assim sendo, a estrutura do presente trabalho é a seguinte:

- Capítulo 2: neste capítulo é estudada a análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escala para o problema de condução estacionária linear de calor em micro-estruturas constituídas por materiais isotrópicos. Com esse objetivo, na Seção 2.1 é descrita detalhadamente a modelagem constitutiva multi-escala empregada. Na Seção 2.2, é apresentado o cálculo da derivada topológica para esta classe de problemas. Encerrando o capítulo, na Seção 2.3 são realizados alguns comentários finais acerca dos resultados apresentados nas seções anteriores.
- Capítulo 3: nesta parte do trabalho é estudada a análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escala para o problema de elasticidade linear em micro-estruturas constituídas por materiais isotrópicos. Inicialmente, na Seção 3.1 é mostrada detalhadamente a modelagem constitutiva multi-escala para esta classe de problema. Na Seção 3.2, é apresentado o cálculo da derivada topológica. A fim de encerrar o capítulo, na Seção 3.3 são apresentados alguns comentários finais pertinentes.

- Capítulo 4: embora cada capítulo tenha suas próprias conclusões, aqui serão apresentadas as conclusões finais de caráter global sobre este trabalho. Salientando as principais contribuições e colocando alguns dos temas em aberto que serão objeto de futuros trabalhos.

Cabe mencionar que na introdução dos Capítulos 2 e 3 é apresentada em forma detalhada a organização interna de cada um deles, a fim de facilitar a leitura dos mencionados capítulos. Finalmente, objetivando deixar este trabalho auto-contido, são apresentados três apêndices: *(i)* Apêndice A, reservado para mostrar as expansões assintóticas utilizadas na análise desenvolvida nas Seções 2.2 e 3.2; *(ii)* Apêndice B, aqui são apresentadas de uma maneira simples as estimativas de convergência utilizadas, também, nas seções mencionadas anteriormente; e *(iii)* Apêndice C, onde são mostradas algumas relações básicas da álgebra tensorial, utilizadas ao longo de todo o trabalho.

Capítulo 2

Condução estacionária de calor

A condutividade térmica macroscópica (ou efetiva) dos materiais é uma propriedade física de suma importância no projeto de componentes mecânicos, térmicos e eletrônicos para um número vasto de aplicações na indústria civil, aeroespacial, biomédica, nuclear e eletrônica. Em muitas circunstâncias, esta propriedade condiciona o projeto do componente e qualquer melhora no desempenho só pode ser alcançada por meio de mudanças satisfatórias no comportamento da condutividade térmica dos materiais adotados. Neste contexto, a habilidade para prever com precisão a condutividade térmica macroscópica das propriedades micro-estruturais correspondentes é essencial na análise, projeto e otimização do meio heterogêneo subjacente. A fim de estimar a condutividade térmica efetiva, diferentes métodos foram propostos e investigados, entre outros, por Germain *et al.* (1983) [42], Auriault (1993) [9], Auriault & Royer (1993) [10], Ostoja-Starzewski & Schulte (1996) [97], Yin *et al.* (2005) [134], Wang *et al.* (2006) [133] e Jiang & Sousa (2007) [61]. Neste caso, a sensibilidade da condutividade térmica efetiva às mudanças topológicas na microestrutura é de crucial importância, e seu cálculo é um dos objetivos deste trabalho.

Este capítulo propõe uma expressão analítica geral para a sensibilidade do tensor bi-dimensional de condutividade térmica macroscópica quando mudanças topológicas são introduzidas na microestrutura. A condutividade macroscópica é estimada empregando uma teoria constitutiva multi-escala baseada na técnica de homogeneização para o problema de condução estacionária de calor onde, seguindo as idéias apresentadas por Germain *et al.* (1983) [42], o gradiente térmico macroscópico e o vetor de fluxo de calor em cada ponto do macro-contínuo são definidos como a média volumétrica das contrapartes microscópicas sobre o Elemento de Volume Representativo (EVR) do material associado com aquele ponto. Neste contexto, a condutividade térmica efetiva estimada para uma dada microestrutura depende da escolha das restrições impostas sob os campos de temperatura admissíveis do EVR, e os limites inferiores e superiores estabelecidos por Ostoja-Starzewski & Schulte (1996) [97] podem ser obtidos mediante escolhas adequadas das restrições térmicas a serem impostas. Dentro deste contexto de homogeneização, assume-se que a clássica lei de Fourier é válida na escala de referência da microestrutura. Conseqüentemente, o tamanho mínimo do EVR que pode ser considerado deve ser tal que esta suposição ainda forneça uma descrição adequada da condução estacionária de calor.

A sensibilidade proposta é caracterizada através de um campo tensorial simétrico de segunda ordem sobre o EVR que mede como a condutividade macroscópica muda quando uma inclusão é introduzida na micro-escala. Além do mais, a sensibilidade topológica obtida depende apenas da solução do sistema canônico de equações variacionais sobre o domínio original (não perturbado). A fórmula analítica é derivada usando os conceitos de *expansão assintótica topológica* e *derivada topológica*, dentro da teoria constitutiva multi-escala adotada. Estes conceitos matemáticos permitem o cálculo da sensibilidade de um determinado funcional de forma com relação a perturbações infinitesimais no domínio, como aqueles produzidos pela inserção de furos, inclusões ou termos fontes. O uso de tais conceitos no contexto da mecânica dos sólidos, otimização topológica de estruturas e problemas inversos pode ser encontrado na breve resenha histórica apresentada na Seção 1.2.

Este capítulo está dividido essencialmente em três partes. A Seção 2.1 descreve detalhadamente a modelagem constitutiva multi-escala adotada na estimação do tensor bi-dimensional de condutividade térmica macroscópico. O desenvolvimento da análise de sensibilidade topológica em materiais isotrópicos é apresentado na Seção 2.2. Aqui é obtido o principal resultado teórico desde capítulo – uma fórmula fechada da sensibilidade da resposta constitutiva macroscópica (condutividade térmica) para perturbações topológicas micro-estruturais. As aplicações dos resultados obtidos são mostradas no final da Seção 2.2.3, através de alguns exemplos numéricos de interesse aos objetivos deste trabalho. A fim de encerrar o capítulo, comentários adicionais são apresentados na Seção 2.3.

2.1 Modelagem multi-escala

Nesta seção é apresentado o desenvolvimento da formulação variacional de uma família de modelos constitutivos multi-escala para o problema de condução estacionária de calor, seguindo a metodologia proposta por Germain *et al.* (1983) [42] e a teoria apresentada, entre outros, por Suquet (1987) [123], Michel *et al.* (1999) [81] e Miehe *et al.* (1999)[84] no contexto dos problemas da mecânica dos sólidos. Estes modelos multi-escala são construídos sob a hipótese de que um campo macroscópico associado a qualquer ponto material \boldsymbol{x} do domínio contínuo Ω é a média volumétrica da sua contraparte microscópica sobre a micro-célula local, chamada de EVR, veja Fig.2.1. Para uma descrição adequada do modelo multi-escala é necessário que o comprimento característico do EVR, l_μ , seja muito menor que o comprimento característico da macro-escala, l . Geralmente, o domínio do EVR, representado por $\Omega_\mu \subset \mathbb{R}^N$, é constituído por uma parte denominada matriz, denotada como Ω_μ^m , e outra denominada inclusão¹, denotada como Ω_μ^i , veja Fig. 2.1. Baseado no anterior, tem-se as seguintes definições para os domínios de análise:

$$\Omega_\mu = \Omega_\mu^m \cup \overline{\Omega_\mu^i}; \quad \partial\Omega_\mu^m = \partial\Omega_\mu \cup \partial\Omega_\mu^i, \quad (2.1)$$

¹No caso que o EVR possua vazios (Ω_μ^v) a análise é totalmente análoga ao apresentado nesta seção.

onde $\overline{\Omega_\mu^i}$ denota o fecho do conjunto Ω_μ^i . Por simplicidade, somente serão consideradas micro-células nas quais as inclusões não interceptam o contorno do EVR, ou seja

$$\partial\Omega_\mu \cap \overline{\Omega_\mu^i} = \emptyset. \quad (2.2)$$

Com a caracterização geométrica do domínio do EVR apresentada anteriormente, tem-se que as normais unitárias a cada contorno $\partial\Omega_\mu^m$ e $\partial\Omega_\mu^i$ podem ser definidas como

$$\mathbf{n} := \mathbf{n}|_{\partial\Omega_\mu^m} \quad \text{e} \quad \mathbf{n}|_{\partial\Omega_\mu^i} := -\mathbf{n}. \quad (2.3)$$

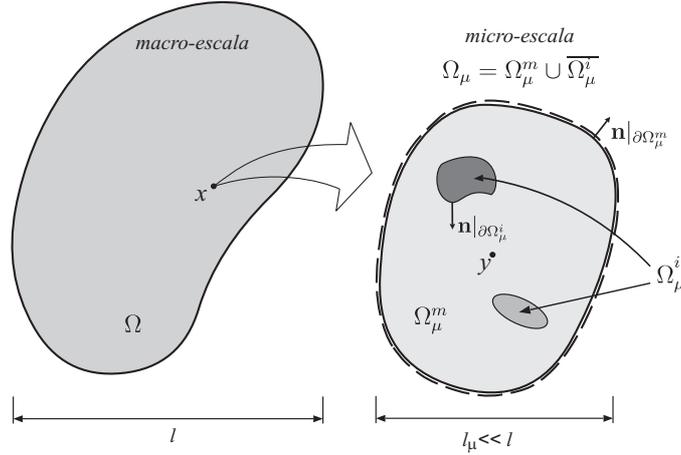


Figura 2.1: macro-escala contínua com a micro-escala local

2.1.1 Homogeneização e campos de temperatura microscópicos

Segundo dito no início da seção, o estudo dos modelos constitutivos multi-escala do ponto de vista de sua formulação variacional inicia assumindo que o gradiente da temperatura ∇u num ponto \mathbf{x} da macro-escala contínua é a média volumétrica do gradiente térmico da micro-escala, ∇u_μ , sobre o EVR associado ao ponto \mathbf{x} . Assim sendo, tem-se que

$$\nabla u(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \nabla u_\mu(\mathbf{y}) dV, \quad (2.4)$$

onde $u_\mu(\mathbf{y})$ é o campo de temperatura na micro-escala associada a cada ponto \mathbf{y} do EVR. O processo definido pela eq.(2.4), que toma um campo definido sobre o EVR, neste caso $\nabla u_\mu(\mathbf{y})$, e o mapeia numa quantidade definida na macro-escala, neste caso $\nabla u(\mathbf{x})$, é conhecido como *homogeneização*.

Decomposição aditiva da temperatura microscópica. Sem perda de generalidade, qualquer campo de temperatura microscópico u_μ pode ser decomposto numa soma

$$u_\mu(\mathbf{y}) = u(\mathbf{x}) + \bar{u}(\mathbf{y}) + \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}), \quad (2.5)$$

de um campo de temperatura constante dada pela temperatura macroscópica $u(\mathbf{x})$ no ponto \mathbf{x} associado com o EVR, um campo associado ao gradiente de temperatura homogêneo

$$\bar{u}(\mathbf{y}) := \nabla u(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} \quad (2.6)$$

que varia linearmente em \mathbf{y} e um campo de *flutuações de temperatura* $\tilde{u}_\mu(\mathbf{y})$. Baseado na decomposição aditiva mostrada na eq.(2.5), o gradiente da temperatura microscópica pode ser escrito como:

$$\nabla u_\mu(\mathbf{y}) = \nabla u(\mathbf{x}) + \nabla \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}), \quad (2.7)$$

onde se tem uma parte homogênea (constante em \mathbf{y}) coincidente com o gradiente de temperatura macroscópica, e um gradiente da flutuação microscópica da temperatura, que geralmente varia com \mathbf{y} . Cabe mencionar que, baseado na definição do operador gradiente, a aplicação $\nabla u_\mu(\mathbf{y})$ é da seguinte forma

$$\nabla u_\mu(\mathbf{y}) := \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} u_\mu(\mathbf{y}). \quad (2.8)$$

Utilizando o teorema da divergência, a homogeneização do gradiente de temperatura microscópico mostrado na eq.(2.4) pode ser escrita alternativamente como

$$\nabla u = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} u_\mu \mathbf{n} dS \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (2.9)$$

Empregando o processo de homogeneização definido ao início da seção, tem-se que a temperatura macroscópica associada ao ponto material \mathbf{x} satisfaz

$$u(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} u_\mu(\mathbf{y}) dV. \quad (2.10)$$

Introduzindo a decomposição eq.(2.5) na expressão anterior, o campo de flutuações de temperatura microscópicas deve satisfazer

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) dV = - \int_{\Omega_\mu} \nabla u(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} dV. \quad (2.11)$$

Observação 1. *Sem perda de generalidade, pode-se posicionar a origem do sistema de coordenadas no centróide do EVR (centro geométrico). Assim, a restrição sobre o campo de flutuações de temperatura \tilde{u}_μ , eq.(2.11), fica*

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) dV = 0. \quad (2.12)$$

Mínima restrição térmica no EVR. Devido ao processo de homogeneização definido anteriormente na eq.(2.4), todo campo admissível de temperatura deve satisfazer as restrições estabelecidas pelas eqs.(2.4) e (2.10). Rigorosamente, pode-se dizer que a condição necessária para que um campo de temperatura u_μ seja termicamente admissível é

$$u_\mu \in \mathcal{K}_\mu \subset \mathcal{K}_\mu^*, \quad (2.13)$$

onde \mathcal{K}_μ é o conjunto das temperaturas admissíveis no EVR e \mathcal{K}_μ^* é o conjunto da mínima restrição térmica admissível para os campos de temperaturas na micro-escala, definido como

$$\mathcal{K}_\mu^* := \left\{ v \in H^1(\Omega_\mu) : \int_{\Omega_\mu} v dV = V_\mu u, \int_{\partial\Omega_\mu} v \mathbf{n} dS = V_\mu \nabla u, \llbracket v \rrbracket = 0 \text{ sobre } \partial\Omega_\mu^i \right\}, \quad (2.14)$$

lembrando que $\llbracket v \rrbracket$ denota o salto da função v através da interface entre a matriz e a inclusão $\partial\Omega_\mu^i$:

$$\llbracket (\cdot) \rrbracket := (\cdot)|_m - (\cdot)|_i, \quad (2.15)$$

com $(\cdot)|_m$ associado à matriz Ω_μ^m e $(\cdot)|_i$ associado à inclusão Ω_μ^i . Levando em conta a decomposição mostrada na eq.(2.7), observa-se que da homogeneização do gradiente de temperatura microscópico tem-se

$$\begin{aligned} V_\mu \nabla u &= \int_{\Omega_\mu} \nabla u_\mu dV = \int_{\Omega_\mu} (\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu) dV = V_\mu \nabla u + \int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{u}_\mu dV, \\ \Rightarrow \int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{u}_\mu dV &= \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{u}_\mu \mathbf{n} dS = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Assim, a restrição imposta sobre o campo de temperatura microscópica (2.13) é equivalente a requerer que a flutuação da temperatura microscópica $\tilde{u}_\mu(\mathbf{y})$ pertença ao espaço vetorial das flutuações de temperatura termicamente admissíveis $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$, que por sua vez é um subespaço do *espaço vetorial da mínima restrição térmica admissível dos campos de flutuações de temperatura* $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$, ou seja, \tilde{u}_μ deve satisfazer

$$\tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*, \quad (2.17)$$

sendo que o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$ é definido como,

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^* := \left\{ v \in H^1(\Omega_\mu) : \int_{\Omega_\mu} v dV = -\nabla u \cdot \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV, \int_{\partial\Omega_\mu} v \mathbf{n} dS = \mathbf{0}, \llbracket v \rrbracket = 0 \text{ sobre } \partial\Omega_\mu^i \right\}. \quad (2.18)$$

Tendo, portanto, definido o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$, o conjunto da mínima restrição térmica admissível dos campos de temperatura na micro-escala, alternativamente, pode ser escrito como

$$\mathcal{K}_\mu^* := \left\{ v \in H^1(\Omega_\mu) : v = u + \nabla u \cdot \mathbf{y} + \tilde{v}, \quad \tilde{v} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \right\}. \quad (2.19)$$

Então, para uma dada temperatura macroscópica $u(\mathbf{x})$ e seu gradiente no ponto \mathbf{x} , $\nabla u(\mathbf{x})$, o conjunto \mathcal{K}_μ^* é uma translação do espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$.

2.1.2 Equilíbrio térmico do elemento de volume representativo

Assumindo que o EVR esta sujeito a fontes internas de calor $b_\mu = b_\mu(\mathbf{y})$ em Ω_μ e a um fluxo externo de calor $g_\mu = g_\mu(\mathbf{y})$ atuando sobre o contorno exterior $\partial\Omega_\mu$, em analogia com o *Princípio dos Trabalhos Virtuais* da mecânica dos sólidos, tem-se que o

EVR está em equilíbrio se e somente se o campo vetorial \mathbf{q}_μ em Ω_μ satisfaz a seguinte equação variacional clássica para o problema de difusão estacionária de calor

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \eta dV + \int_{\Omega_\mu} b_\mu \eta dV - \int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \eta dS = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu, \quad (2.20)$$

onde o espaço das variações admissíveis de temperatura sobre o EVR, denotado por \mathcal{V}_μ , é definido como,

$$\mathcal{V}_\mu := \{ \eta \in H^1(\Omega_\mu) : \eta = v_1 - v_2, \quad \forall v_1, v_2 \in \mathcal{K}_\mu \}. \quad (2.21)$$

Da definição apresentada acima e da mostrada para o conjunto \mathcal{K}_μ , é simples ver que, em forma geral, o espaço das flutuações virtuais de temperatura coincide com o espaço das flutuações admissíveis de temperatura,

$$\mathcal{V}_\mu = \tilde{\mathcal{K}}_\mu. \quad (2.22)$$

Para um campo vetorial \mathbf{q}_μ suficientemente regular no domínio Ω_μ , o problema local de equilíbrio associado à equação variacional (2.20) pode ser escrito como,

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{q}_\mu = b_\mu & \text{em } \Omega_\mu \\ \mathbf{q}_\mu \cdot \mathbf{n} = g_\mu & \text{sobre } \partial\Omega_\mu \\ \llbracket \mathbf{q}_\mu \rrbracket \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \end{cases}. \quad (2.23)$$

2.1.3 Fluxo de calor homogeneizado

De maneira similar ao mostrado inicialmente nesta seção, eqs.(2.4) e (2.10), é necessário estabelecer a relação entre o fluxo de calor na micro-escala $\mathbf{q}_\mu(\mathbf{y})$ e o fluxo de calor associado ao ponto \mathbf{x} da macro-escala $\mathbf{q}(\mathbf{x})$. Referida associação é feita pelo mesmo princípio de homogeneização mostrado na Seção 2.1.1, assim sendo o vetor fluxo de calor homogeneizado $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ é obtido como,

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) dV. \quad (2.24)$$

Da expressão anterior é importante observar que o EVR é descrito como um contínuo, então é necessário que o EVR seja suficientemente extenso para que uma representação contínua faça sentido. Agora, empregando a seguinte relação integro-tensorial,

$$\int_{\Omega} (\nabla \mathbf{r}) \mathbf{w} dV = \int_{\partial\Omega} \mathbf{r} (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}) dS - \int_{\Omega} \mathbf{r} \operatorname{div}(\mathbf{w}) dV, \quad (2.25)$$

na expressão (2.24), adotando $\mathbf{w} = \mathbf{q}_\mu$, $\mathbf{r} = \mathbf{y} \Rightarrow \nabla \mathbf{r} = \mathbf{I}$, tem-se que,

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left[\int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{q}_\mu \cdot \mathbf{n}) \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} (\operatorname{div} \mathbf{q}_\mu) \mathbf{y} dV + \int_{\partial\Omega_\mu^i} (\llbracket \mathbf{q}_\mu \rrbracket \cdot \mathbf{n}) \mathbf{y} dS \right]. \quad (2.26)$$

Utilizando a formulação forte do problema dada pela eq.(2.23) na expressão acima,

tem-se a seguinte expressão para o fluxo de calor homogeneizado

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left(\int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} b_\mu \mathbf{y} dV \right), \quad (2.27)$$

que representa o processo de *homogeneização* do fluxo de calor exclusivamente em termos das fontes internas de calor e do fluxo externo atuantes sobre o EVR.

2.1.4 Princípio de macro-homogeneidade de Hill-Mandel

Baseados em argumentos físicos Hill (1965) [53] e Mandel (1971) [75]; estabeleceram, no contexto da mecânica de sólidos, que “*a potência das tensões macroscópicas deve ser igual à média volumétrica da potência das tensões microscópicas sobre o EVR associado a esse ponto, para qualquer movimento cinematicamente admissível do EVR*”. No contexto da modelagem desenvolvida aqui, assumimos que a relação análoga

$$\mathbf{q} \cdot \nabla \delta u = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \delta u_\mu dV, \quad (2.28)$$

deve ser satisfeita para todo campo de temperatura microscópico admissível $\delta u_\mu \in \mathcal{K}_\mu$, ou seja,

$$\nabla \delta u_\mu = \nabla \delta u + \nabla \delta \tilde{u}_\mu \quad \forall \delta \tilde{u}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.29)$$

Com o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel estabelecido acima, pode-se escrever a seguinte proposição:

Proposição 1. *O Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é satisfeito se e somente se os trabalhos virtuais do fluxo externo, g_μ , e da fonte interna de calor, b_μ , do EVR são nulos. Assim, o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é equivalente às seguintes equações variacionais:*

$$\int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \eta dS = 0 \quad e \quad \int_{\Omega_\mu} b_\mu \eta dV = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.30)$$

Prova. Introduzindo a decomposição aditiva do campo de temperatura microscópica em (2.28), tem-se que

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \delta u_\mu dV &= \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot (\nabla \delta u + \nabla \delta \tilde{u}_\mu) dV \\ &= \mathbf{q} \cdot \nabla \delta u + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \delta \tilde{u}_\mu dV. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Então a identidade (2.28) é satisfeita se e somente se,

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \delta \tilde{u}_\mu dV = 0 \quad \forall \delta \tilde{u}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.32)$$

Integrando por partes a expressão acima, obtém-se

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \delta \tilde{u}_\mu dV = \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{q}_\mu \cdot \mathbf{n}) \delta \tilde{u}_\mu dS - \int_{\Omega_\mu} (\operatorname{div} \mathbf{q}_\mu) \delta \tilde{u}_\mu dV + \int_{\partial\Omega_\mu^i} (\llbracket \mathbf{q}_\mu \rrbracket \cdot \mathbf{n}) \delta \tilde{u}_\mu dS. \quad (2.33)$$

Levando em conta a forma forte do equilíbrio no EVR, dada pela eq.(2.23), a expressão acima fica

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla \delta \tilde{u}_\mu dV = \int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \delta \tilde{u}_\mu dS - \int_{\Omega_\mu} b_\mu \delta \tilde{u}_\mu dV \quad \forall \delta \tilde{u}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.34)$$

Da expressão acima segue que o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é equivalente à seguinte equação variacional,

$$\int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \delta \tilde{u}_\mu dS - \int_{\Omega_\mu} b_\mu \delta \tilde{u}_\mu dV = 0 \quad \forall \delta \tilde{u}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.35)$$

Mas, como \mathcal{V}_μ tem a estrutura de um espaço vetorial (veja as eqs.(2.19) e (2.21)), a equação variacional acima é satisfeita se e somente se cada uma das integrais é nula individualmente.

■

Observação 2. A equação (2.30) estabelece que o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é equivalente a requerer que o fluxo externo g_μ e a fonte interna de calor b_μ do EVR sejam puramente reativas. Isto é, o fluxo externo g_μ e a fonte interna de calor b_μ do EVR são reações às restrições térmicas (envolvidas na escolha do espaço \mathcal{V}_μ) impostas ao EVR e **não podem** ser prescritas independentemente. Assim, g_μ e b_μ pertencem ao complemento ortogonal do espaço \mathcal{V}_μ , ou seja

$$(g_\mu \text{ e } b_\mu) \in \mathcal{V}_\mu^\perp. \quad (2.36)$$

Então, uma vez que o espaço \mathcal{V}_μ é escolhido, de forma automática se tem definido o espaço ao qual g_μ e b_μ pertencem.

Observação 3. A equação (2.28) é uma variação do mostrado por Germain et al. (1983) [42]; que postulou a seguinte relação de equivalência de micro-macro dissipação,

$$\mathbf{q} \cdot \frac{\nabla u}{u} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \frac{\nabla u_\mu}{u_\mu} dV, \quad (2.37)$$

como a contraparte em condução de calor do Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel, originalmente desenvolvido na área de mecânica. Observa-se, no entanto, que o uso da eq.(2.28) pode ser justificado da seguinte maneira. Inicialmente, tem-se que o requisito básico de dissipação térmica positiva na macro-escala, imposta pela segunda lei da termodinâmica, é expressa como

$$-\mathbf{q} \cdot \frac{\nabla u}{u} \geq 0. \quad (2.38)$$

Analogamente, na micro-escala, a desigualdade

$$-\mathbf{q}_\mu \cdot \frac{\nabla u_\mu}{u_\mu} \geq 0, \quad (2.39)$$

deve ser satisfeita pontualmente. De fato, se (2.39) é satisfeita pontualmente no EVR, então, trivialmente, desde que u_μ é positiva²,

$$-\mathbf{q}_\mu \cdot \nabla u_\mu \geq 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (2.40)$$

O uso da eq.(2.28) e do resultado acima asseguram, por sua vez, que

$$-\mathbf{q} \cdot \nabla u \geq 0, \quad (2.41)$$

de modo que a desigualdade (2.38) é satisfeita no correspondente ponto do macro-contínuo. Em resumo, se a dissipação positiva é assegurada pontualmente no nível do EVR, então a versão (2.28) do Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel para o problema de condução de calor assegura dissipação positiva no nível macroscópico.

2.1.5 Formulação do problema de equilíbrio térmico

Outro componente essencial na definição da modelagem constitutiva multi-escala discutida nesta seção é a caracterização constitutiva dos materiais que compõem o EVR. Sendo que o objetivo principal é mostrar detalhadamente a modelagem constitutiva multi-escala utilizada na análise de sensibilidade topológica a ser desenvolvida na Seção 2.2, o foco aqui é apresentar modelos constitutivos baseados em teorias dissipativas fenomenológicas ao nível microscópico. Assim sendo e restrito a uma teoria constitutiva puramente local, os axiomas do *Determinismo Constitutivo* e *Ações Locais*, Truesdell (1969) [129]; estabelecem que em forma geral, o vetor fluxo de calor \mathbf{q} em qualquer ponto \mathbf{x} do contínuo é unicamente determinado pela temperatura u nesse ponto \mathbf{x} . Assim, existe um funcional constitutivo \mathcal{F} tal que

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathcal{F}(\nabla u(\mathbf{x})) \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}. \quad (2.42)$$

Da mesma maneira que no caso macroscópico e considerando que na micro-escala são válidas as leis da teoria do contínuo, o fluxo de calor microscópico no EVR, \mathbf{q}_μ , satisfaz a seguinte relação

$$\mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) = \mathcal{F}_\mu(\nabla u_\mu(\mathbf{y})) \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega}_\mu, \quad (2.43)$$

onde \mathcal{F}_μ é o funcional constitutivo microscópico.

Para o caso particular de um material linear, o funcional constitutivo \mathcal{F}_μ assume a forma clássica,

$$\mathcal{F}_\mu(\nabla u_\mu(\mathbf{y})) = -\mathbf{K}_\mu \nabla u_\mu(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega}_\mu, \quad (2.44)$$

²Para esta classe de modelos multi-escala, a nível microscópico é mantida a hipótese clássica de que a temperatura está suficientemente longe do zero absoluto, tal que a modelagem matemática do problema físico faça sentido.

onde o tensor de condutividade térmica (de segunda ordem) $\mathbf{K}_\mu(\mathbf{y})$ satisfaz

$$\mathbf{K}_\mu(\mathbf{y}) = \begin{cases} \mathbf{K}_\mu^m(\mathbf{y}) & \text{se } \mathbf{y} \in \Omega_\mu^m \\ \mathbf{K}_\mu^i(\mathbf{y}) & \text{se } \mathbf{y} \in \Omega_\mu^i \end{cases}, \quad (2.45)$$

sendo $\mathbf{K}_\mu^m(\mathbf{y})$ e $\mathbf{K}_\mu^i(\mathbf{y})$ os tensores de condutividade térmica que caracterizam os comportamentos constitutivos dos materiais dos domínios Ω_μ^m e Ω_μ^i , respectivamente.

Para a descrição do EVR, neste trabalho serão considerados materiais cuja resposta constitutiva microscópica satisfaça a relação constitutiva (2.44). Assim, o fluxo de calor microscópico pode ser decomposto aditivamente como

$$\mathbf{q}_\mu = \bar{\mathbf{q}}_\mu + \tilde{\mathbf{q}}_\mu, \quad (2.46)$$

sendo $\bar{\mathbf{q}}_\mu$ o fluxo de calor microscópico induzido pelo gradiente térmico macroscópico ∇u e $\tilde{\mathbf{q}}_\mu$ é a flutuação do fluxo de calor microscópico associado à flutuação de temperatura microscópica \tilde{u}_μ .

Em vista da condição estabelecida pelo Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel (2.30) e levando em conta a decomposição do fluxo de calor microscópico (2.46), a forma fraca do problema de equilíbrio térmico na variável \tilde{u}_μ pode ser escrita como: para um dado gradiente de temperatura macroscópica ∇u , encontre o campo de flutuação de temperatura microscópica $\tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu$, tal que

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{q}}_\mu \cdot \nabla \eta dV = - \int_{\Omega_\mu} \bar{\mathbf{q}}_\mu \cdot \nabla \eta dV \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu, \quad \text{com } \tilde{\mathbf{q}}_\mu = -\mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_\mu. \quad (2.47)$$

Empregando integração por partes e levando em conta que $\mathbf{n}|_m = -\mathbf{n}|_i$ sobre $\partial\Omega_\mu^i$, a forma de equilíbrio apresentada acima pode ser escrita alternativamente como

$$\int_{\partial\Omega_\mu^i} ([\tilde{\mathbf{q}}_\mu] \cdot \mathbf{n} + [\bar{\mathbf{q}}_\mu] \cdot \mathbf{n}) \eta dS - \int_{\Omega_\mu} (\text{div} \tilde{\mathbf{q}}_\mu) \eta dV = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.48)$$

Finalmente a equação de Euler-Lagrange associada ao problema variacional (2.47) resulta no problema de valor no contorno de achar o campo de flutuações de temperatura \tilde{u}_μ , tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\text{div} \tilde{\mathbf{q}}_\mu = 0 & \text{em } \Omega_\mu \\ \tilde{\mathbf{q}}_\mu = -\mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_\mu & \text{em } \Omega_\mu \\ \int_{\Omega_\mu} \tilde{u}_\mu dV = -\nabla u \cdot \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV & \\ \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{u}_\mu \mathbf{n} dS = \mathbf{0} & \\ [\tilde{u}_\mu] = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \\ [\tilde{\mathbf{q}}_\mu] \cdot \mathbf{n} = -[\bar{\mathbf{q}}_\mu] \cdot \mathbf{n} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \end{array} \right. \quad (2.49)$$

Observação 4. Se o domínio Ω_μ tiver mais de uma inclusão, o domínio Ω_μ^i é definido como,

$$\Omega_\mu^i = \bigcup_{j=1}^M \Omega_{\mu_j}^i, \quad (2.50)$$

onde $\Omega_{\mu_j}^i$ é o domínio da j -ésima inclusão e M é a quantidade total de inclusões no EVR.

Assim, as condições da equação diferencial (2.49) sobre o domínio Ω_μ^i devem ser satisfeitas em cada sub-domínio $\Omega_{\mu_j}^i$ e as condições impostas sobre o contorno $\partial\Omega_\mu^i$ devem ser válidas sobre cada contorno $\partial\Omega_{\mu_j}^i$.

Observação 5. Levando em conta o discutido na Observação 1, a solução do problema anterior pode ser obtida como uma soma

$$\tilde{u}_\mu = \tilde{v}_\mu + c_\mu, \quad (2.51)$$

de uma flutuação de temperatura \tilde{v}_μ , solução do problema (2.49) satisfazendo a restrição (2.12), e uma constante c_μ . Integrando no domínio Ω_μ a expressão (2.51) e levando em conta a restrição (2.11) no domínio Ω_μ , a constante c_μ é obtida como

$$c_\mu = -\frac{1}{V_\mu} \nabla u \cdot \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV. \quad (2.52)$$

Observação 6. A condição (2.49)₄ está naturalmente satisfeita devido à escolha feita para o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ de acordo com (2.18). Também observa-se que, trivialmente, o valor médio do lado direito de (2.49)₆ desaparece. Então de (2.49)₃ e do Lema de Lax-Milgram, levando em conta a observação anterior, tem-se que existe uma única solução para o problema (2.47).

2.1.6 Classes de modelos multi-escala

Como foi mostrado no início desta seção, o conjunto \mathcal{K}_μ e o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ estabelecem as mínimas restrições térmicas sobre os campos de temperatura microscópicos u_μ e \tilde{u}_μ , respectivamente, para que o conceito da macro-homogeneização seja válido. No entanto, o espaço das variações admissíveis \mathcal{V}_μ , em geral, está contido no espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$ o que permite obter diferentes modelos constitutivos multi-escala. Cabe mencionar que *cada modelo difere um do outro somente pela escolha feita para o espaço das variações admissíveis* $\mathcal{V}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$. Considerando, portanto, a estrutura variacional apresentada anteriormente, nesta seção serão obtidos quatro classes de modelos constitutivos multi-escala. Esses quatro modelos são comumente conhecidos como:

- (a) Modelo de Taylor ou de gradiente homogêneo de temperatura no EVR;
- (b) Modelo de temperatura linear no contorno do EVR;
- (c) Modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno do EVR;
- (d) Modelo de fluxo uniforme no contorno do EVR, ou da mínima restrição térmica.

2.1.6.1 Modelo de Taylor

O modelo de Taylor se baseia em adotar para o espaço das variações admissíveis, o espaço identicamente nulo, ou seja,

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^T := \{\mathbf{0}\}, \quad (2.53)$$

conseqüentemente a restrição térmica sobre o EVR é dada por,

$$\tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) = 0, \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega_\mu}. \quad (2.54)$$

Esta escolha do espaço implica que o campo de temperatura microscópica é linear na variável \mathbf{y} ,

$$u_\mu(\mathbf{y}) = u(\mathbf{x}) + \nabla u(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y}, \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega_\mu}, \quad (2.55)$$

e o gradiente térmico é *homogêneo* em todo o EVR,

$$\nabla u_\mu(\mathbf{y}) = \nabla u(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega_\mu}, \quad (2.56)$$

além disso, coincide com o gradiente de temperatura macroscópico correspondente ao ponto \mathbf{x} do corpo Ω .

Portanto, para este modelo, a fonte interna de calor b_μ e o fluxo externo de calor g_μ , são reações a serem determinadas, pois o espaço ortogonal $(\mathcal{V}_\mu^T)^\perp$ pode ser qualquer um que tenha a regularidade suficiente no domínio de análise.

Com o resultado estabelecido em (2.56), o funcional constitutivo que define o fluxo de calor na micro-escala, eq.(2.43), satisfaz

$$\mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) = -\mathbf{K}_\mu \nabla u_\mu(\mathbf{y}) = -\mathbf{K}_\mu \nabla u(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{q}}_\mu \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega_\mu}. \quad (2.57)$$

Portanto, o fluxo de calor homogeneizado (2.24) para o modelo de Taylor pode-se escrever como,

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^m} dV \bar{\mathbf{q}}_\mu|_m + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^i} dV \bar{\mathbf{q}}_\mu|_i = v_m \bar{\mathbf{q}}_\mu|_m + v_i \bar{\mathbf{q}}_\mu|_i, \quad (2.58)$$

onde $\bar{\mathbf{q}}_\mu|_m$ e $\bar{\mathbf{q}}_\mu|_i$ são os fluxos de calor (uniformes) resultantes na matriz e na inclusão do EVR, respectivamente; e a fração de volume da matriz e da inclusão são dados por

$$v_m := \frac{V_\mu^m}{V_\mu} \quad \text{e} \quad v_i := \frac{V_\mu^i}{V_\mu}. \quad (2.59)$$

Logo, considerando múltiplas inclusões, por exemplo, M inclusões disjuntas, e supondo que a resposta constitutiva de cada subdomínio j pode ser modelada por um tensor de segunda ordem da forma \mathbf{K}_{μ_j} independente de \mathbf{y} , a expressão (2.58) pode ser escrita da seguinte forma,

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = v_m \bar{\mathbf{q}}_\mu|_m + \sum_{j=1}^M v_j \bar{\mathbf{q}}_\mu|_j, \quad (2.60)$$

sendo v_j a fração de volume da j -ésima inclusão e $\bar{\mathbf{q}}_\mu|_j = -\mathbf{K}_{\mu_j} \nabla u$ o fluxo de calor microscópico induzido pelo gradiente térmico macroscópico correspondente à fase j . Isto é, o fluxo de calor macroscópico, para o modelo de Taylor dado pela eq. (2.60), é a média ponderada dos fluxos de calor atuantes nas diferentes fases sólidas do EVR. Esta regra é comumente conhecida como *regra da mistura*.

2.1.6.2 Modelo de temperatura linear no contorno do EVR

Esta classe de modelo é derivada assumindo que no contorno do EVR a flutuação de temperatura microscópica é nula. Assim, o espaço \mathcal{V}_μ é definido como,

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{L}} := \left\{ \tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) = 0, \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \right\}. \quad (2.61)$$

Com esta escolha para o espaço das variações admissíveis, observa-se que a temperatura no contorno do EVR varia *linearmente* com \mathbf{y} , ou seja,

$$u_\mu(\mathbf{y}) = u(\mathbf{x}) + \bar{u}_\mu(\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (2.62)$$

Da mesma forma que ocorre no modelo de Taylor, o fluxo de calor externo g_μ pertence ao espaço das funções suficientemente regulares no contorno $\partial\Omega_\mu$ e deve ser determinado através de um cálculo *a posteriori*. Devido à definição do espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{L}}$, as únicas fontes internas de calor que satisfazem a equação variacional (2.30)₂ são as identicamente nulas, ou seja,

$$b_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (2.63)$$

2.1.6.3 Modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno do EVR

Esta classe de modelos constitutivos é apropriada para representar o comportamento de materiais com microestrutura periódica, Michel *et al.* (1999) [81]. Para que essa representação periódica faça sentido, é necessário que o contorno do EVR esteja composto por N pares de conjuntos iguais de lados

$$\partial\Omega_\mu = \bigcup_{j=1}^N (\Gamma_j^+, \Gamma_j^-), \quad (2.64)$$

tais que, cada ponto $\mathbf{y}^+ \in \Gamma_j^+$ tenha seu correspondente $\mathbf{y}^- \in \Gamma_j^-$, e que as normais aos lados do contorno (Γ_j^+, Γ_j^-) nos pontos $(\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-)$ satisfaçam

$$\mathbf{n}_j^+ = -\mathbf{n}_j^-. \quad (2.65)$$

Os exemplos típicos de formas para os contornos de EVR periódicos são as quadradas, retangulares e hexagonais, veja Fig. 2.2.

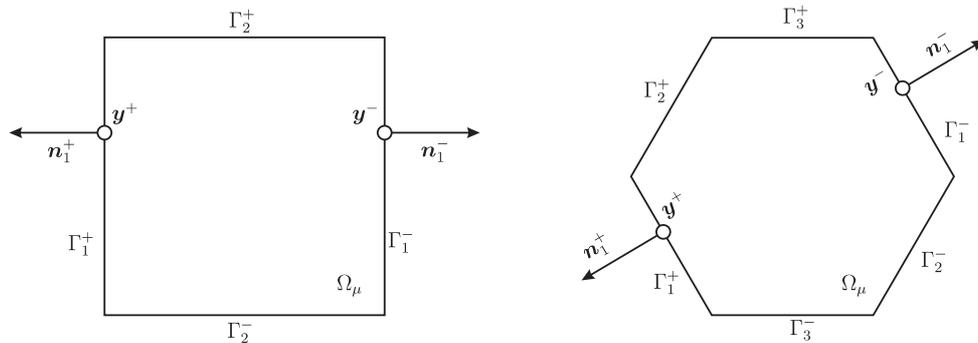


Figura 2.2: geometrias do EVR periódico - células quadradas e hexagonais.

Levando em conta as considerações geométricas estabelecidas acima, o espaço \mathcal{V}_μ para o *modelo de flutuação periódica de temperatura* no contorno do EVR é definido como,

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}} := \left\{ \tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^+) = \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ par } (\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-) \in \partial\Omega_\mu \right\}. \quad (2.66)$$

Com a definição do espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}}$ apresentada anteriormente, é simples verificar que a condição dada pela eq.(2.22) é satisfeita. De fato, basta constatar que é cumprida a condição dada pela eq.(2.18). Então, tendo assumido a partição geométrica para o contorno do EVR, a restrição para o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{u}_\mu \mathbf{n} dS &= \sum_{j=0}^N \left[\int_{\Gamma_j^+} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^+) \mathbf{n}_j^+ dS + \int_{\Gamma_j^-} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^-) \mathbf{n}_j^- dS \right] \\ &= \sum_{j=0}^N \left[\int_{\Gamma_j^+} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^+) \mathbf{n}_j^+ dS - \int_{\Gamma_j^+} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^+) \mathbf{n}_j^+ dS \right] = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Recordando que o fluxo externo de calor g_μ aplicado ao contorno do EVR é ortogonal ao espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}}$, ou seja $g_\mu \in (\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}})^\perp$, para satisfazer a equação variacional

$$\int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \eta dS = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}}, \quad (2.68)$$

é necessário que o fluxo externo de calor seja *anti-periódico* no contorno $\partial\Omega_\mu$, ou seja

$$g_\mu(\mathbf{y}^+) = -g_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ par } (\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-) \in \partial\Omega_\mu. \quad (2.69)$$

Finalmente, as fontes internas de calor ortogonais ao espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}}$ são, da mesma maneira que no caso anterior, as identicamente nulas,

$$b_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (2.70)$$

2.1.6.4 Modelo de fluxo uniforme no contorno do EVR

Para este último modelo, a escolha feita para o espaço \mathcal{V}_μ é a de mínima restrição térmica no EVR. Assim, o espaço das variações admissíveis de flutuações de temperatura é dado por

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}} := \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*. \quad (2.71)$$

Da mesma forma que nos modelos apresentados nas duas seções anteriores, as fontes internas de calor que satisfazem a equação variacional (2.30)₂ são as identicamente nulas, ou seja,

$$b_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (2.72)$$

Para um modelo constitutivo baseado na mínima restrição térmica no EVR, o fluxo externo de calor compatível é dado por

$$g_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu, \quad (2.73)$$

isto significa que o fluxo externo de calor é *uniforme* no contorno do EVR. A validade da expressão (2.73) pode ser demonstrada. De fato,

Proposição 2. *Para um modelo constitutivo multi-escala baseado na mínima restrição térmica no EVR, tem-se como consequência que o fluxo externo de calor satisfaz a seguinte igualdade*

$$g_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu, \quad (2.74)$$

onde $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ é o fluxo de calor macroscópico associado ao ponto \mathbf{x} do domínio Ω .

Prova. Em forma geral, é possível escrever o fluxo de calor no contorno como,

$$g_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu, \quad (2.75)$$

mas, segundo o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel o fluxo de calor no contorno deve satisfazer

$$\int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu(\mathbf{y}) \eta dS = \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{q}_\mu \cdot \mathbf{n}) \eta dS = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu^M. \quad (2.76)$$

Da mesma forma que o apresentado na Seção 2.1.1 (eq.(2.5)), o fluxo de calor no EVR pode ser decomposto em uma soma

$$\mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) = \bar{\mathbf{q}}_\mu(\mathbf{y}) + \tilde{\mathbf{q}}_\mu(\mathbf{y}), \quad (2.77)$$

de uma parcela constante em \mathbf{y} , por hipótese $\bar{\mathbf{q}}_\mu$, e uma flutuação no fluxo térmico microscópico, $\tilde{\mathbf{q}}_\mu(\mathbf{y})$, tal que

$$\int_{\partial\Omega_\mu} (\tilde{\mathbf{q}}_\mu \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} dS = \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{q}_\mu^n \mathbf{n} dS = \mathbf{0}, \quad (2.78)$$

onde \tilde{q}_μ^n é a componente normal da flutuação do fluxo microscópico de calor, dada por

$$\tilde{\mathbf{q}}_\mu \cdot \mathbf{n} = \tilde{q}_\mu^n. \quad (2.79)$$

Por outro lado, associado ao fluxo de calor $\mathbf{q}_\mu(\mathbf{y})$, é possível definir o vetor $\boldsymbol{\psi}$ como

$$\boldsymbol{\psi} := \int_{\partial\Omega_\mu} q_\mu^n \mathbf{n} dS, \quad (2.80)$$

onde q_μ^n é a componente normal do fluxo de calor microscópico, ou seja $q_\mu^n = g_\mu$. Introduzindo a decomposição aditiva para o fluxo de calor na definição dada acima para o vetor $\boldsymbol{\psi}$, tem-se que

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\psi} &= \int_{\partial\Omega_\mu} [(\bar{\mathbf{q}}_\mu + \tilde{\mathbf{q}}_\mu) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} dS \\ &= \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) dS \bar{q}_\mu + \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{q}_\mu^n \mathbf{n} dS. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Lembrando a definição do escalar \tilde{q}_μ^n , a expressão acima pode ser escrita como

$$\boldsymbol{\psi} = \mathbf{R}\bar{\mathbf{q}}_\mu, \quad (2.82)$$

onde o tensor de segunda ordem \mathbf{R} é definido da seguinte forma

$$\mathbf{R} := \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} dS, \quad (2.83)$$

e depende exclusivamente da geometria do contorno do EVR. Sendo que o tensor \mathbf{R} é invertível para todo contorno fechado $\partial\Omega_\mu$, a decomposição aditiva apresentada na eq.(2.77) é de fato possível com

$$\bar{\mathbf{q}}_\mu = \mathbf{R}^{-1}\boldsymbol{\psi} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\mathbf{q}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) - \bar{\mathbf{q}}_\mu. \quad (2.84)$$

Considere agora o campo escalar

$$\eta^* := \tilde{q}_\mu^n, \quad (2.85)$$

com a definição acima, é simples observar que $\eta^* \in \mathcal{V}_\mu^M$. Então introduzindo a decomposição aditiva do fluxo de calor e o campo escalar η^* na condição de ortogonalidade dada pela eq.(2.76), tem-se

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{q}_\mu \cdot \mathbf{n}) \eta^* dS &= \bar{\mathbf{q}}_\mu \cdot \int_{\partial\Omega_\mu} \eta^* \mathbf{n} dS + \int_{\partial\Omega_\mu} (\tilde{\mathbf{q}}_\mu \cdot \mathbf{n}) \eta^* dS \\ &= \int_{\partial\Omega_\mu} (\tilde{q}_\mu^n)^2 dS = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{q}_\mu^n = 0. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Do resultado obtido acima, segue que

$$\tilde{\mathbf{q}}_\mu(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (2.87)$$

Finalmente, fica demonstrado que o fluxo de calor no contorno do EVR, para o modelo que está sendo estudado, é constante

$$g_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{q}_\mu(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) = \bar{\mathbf{q}}_\mu \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (2.88)$$

Para completar a prova, considere a definição da homogeneização feita na Seção 2.1.1 para o fluxo de calor em termo das fontes internas e do fluxo externo no contorno, dada pela seguinte expressão

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left[\int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} b_\mu \mathbf{y} dV \right]. \quad (2.89)$$

Levando em conta que a fonte interna de calor b_μ é nula e o resultado (2.88), o fluxo de calor macroscópico é dado por

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left[\int_{\partial\Omega_\mu} (\bar{\mathbf{q}}_\mu \cdot \mathbf{n}) \mathbf{y} dS \right] = \frac{1}{V_\mu} \left[\int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{y} \otimes \mathbf{n}) dS \right] \bar{\mathbf{q}}_\mu = \mathbf{I} \bar{\mathbf{q}}_\mu = \bar{\mathbf{q}}_\mu, \quad (2.90)$$

o que encerra a prova da proposição. ■

Note que com a presente construção variacional do *modelo da mínima restrição térmica*, a condição de fluxo externo dada pela eq.(2.73) é uma **conseqüência** da escolha feita para o espaço das variações admissíveis \mathcal{V}_μ^M e não pode ser imposta a priori. Devido à condição estabelecida em (2.73) este modelo é conhecido como *de fluxo uniforme no contorno*.

Observação 7. *Os espaços que definem os modelos desenvolvidos nas seções anteriores são apresentados de maneira resumida no quadro abaixo*

<p>(a) <i>Modelo de Taylor</i></p> $\mathcal{V}_\mu^T := \{\mathbf{0}\}.$
<p>(b) <i>Modelo de temperatura linear no contorno</i></p> $\mathcal{V}_\mu^L := \left\{ \tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \right\}.$
<p>(c) <i>Modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno</i></p> $\mathcal{V}_\mu^P := \left\{ \tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^+) = \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{par } (\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-) \in \partial\Omega_\mu \right\}.$
<p>(d) <i>Modelo de fluxo uniforme no contorno</i></p> $\mathcal{V}_\mu^M := \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*.$

Um fato importante que deve ser notado é que os modelos ora apresentados diferem entre eles somente pela escolha feita para o espaço das variações admissíveis $\mathcal{V}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$. Do quadro acima é simples ver a seguinte relação entre os espaços propostos para os modelos obtidos,

$$\mathcal{V}_\mu^T \subset \mathcal{V}_\mu^L \subset \mathcal{V}_\mu^P \subset \mathcal{V}_\mu^M. \quad (2.91)$$

Daí segue que o modelo de Taylor e do fluxo exterior uniforme no contorno fornecem os limites superiores e inferiores, respectivamente, para todas as possíveis escolhas das restrições térmicas para o espaço das variações admissíveis.

Observação 8. *Nos modelos constitutivos multi-escala apresentados anteriormente, foi provado que, exceto no modelo de Taylor, as fontes internas de calor compatíveis com a modelagem proposta são necessariamente nula, $b_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega}_\mu$. Então, introduzindo esse resultado em (2.27), tem-se que o fluxo térmico homogeneizado pode ser obtido a partir do fluxo externo de calor g_μ como*

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} g_\mu \mathbf{y} dS. \quad (2.92)$$

A expressão mostrada anteriormente possui a vantagem de ser muito simples, o que torna fácil sua implementação computacional. No caso de modelo de Taylor, o fluxo de calor macroscópico é calculado diretamente com a eq.(2.58).

2.1.7 Tensor de condutividade térmica homogeneizado

No desenvolvimento dos modelos constitutivos multi-escala, baseados na média volumétrica de campos definidos ao nível microscópicos, uns dos principais objetivos é obter a resposta constitutiva do EVR considerado. Portanto, o propósito principal desta seção é apresentar a derivação do tensor de condutividade térmica macroscópico, empregando as técnicas multi-escala apresentadas nas seções anteriores.

Repetindo, por conveniência, a forma fraca do problema de equilíbrio térmico mostrado anteriormente, tem-se o seguinte problema variacional: dado o gradiente de temperatura macroscópica ∇u , encontre o campo de flutuação de temperatura microscópica $\tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu$, tal que

$$-\int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_\mu \cdot \nabla \eta dV = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla u \cdot \nabla \eta dV \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu. \quad (2.93)$$

Como o problema em estudo é linear, o tensor de condutividade térmica macroscópico pode ser obtido através de uma superposição linear de problemas associados com as componentes cartesianas do gradiente de temperatura macroscópico. Este procedimento é completamente análogo ao proposto por Michel *et al.* (1999) [81], no contexto da mecânica dos sólidos. Deste modo, o gradiente da temperatura macroscópica é escrito em termos de suas componentes cartesianas da forma

$$\nabla u = (\nabla u)_i \mathbf{e}_i, \quad (2.94)$$

onde os escalares $(\nabla u)_i$ são as componentes do gradiente da temperatura macroscópica na base definida pelos vetores \mathbf{e}_i , dadas por $(\nabla u)_i = \nabla u \cdot \mathbf{e}_i$. Devido à linearidade do problema (2.93) a flutuação da temperatura microscópica \tilde{u}_μ pode-ser construída como uma combinação linear das componentes do gradiente da temperatura macroscópica da seguinte forma

$$\tilde{u}_\mu = (\nabla u)_i \tilde{u}_{\mu_i}, \quad (2.95)$$

sendo os campos escalares \tilde{u}_{μ_i} chamados de flutuações tangenciais de temperatura. Cada \tilde{u}_{μ_i} representa a derivada do campo de flutuação de temperatura do EVR em relação à componente do gradiente de temperatura macroscópica na direção do elemento da base \mathbf{e}_i . Então, substituindo a expressão acima no funcional (2.93) tem-se

$$\begin{aligned} -\int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu (\nabla u)_i \nabla \tilde{u}_{\mu_i} \cdot \nabla \eta dV &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu (\nabla u)_i \mathbf{e}_i \cdot \nabla \eta dV \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu, \\ -\int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_{\mu_i} \cdot \nabla \eta dV &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \mathbf{e}_i \cdot \nabla \eta dV \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu. \end{aligned} \quad (2.96)$$

com $i = 1, 2$ para o caso bidimensional. Assim, os escalares \tilde{u}_{μ_i} que geram a base da combinação linear (2.95) são obtidos da resolução do sistema canônico de equações variacionais (2.96).

Ao nível macroscópico, a lei de Fourier estipula que o fluxo de temperatura associado

ao ponto \mathbf{x} satisfaz

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -\mathbf{K}\nabla u(\mathbf{x}), \quad (2.97)$$

onde \mathbf{K} é o tensor de condutividade térmica homogeneizado que caracteriza a resposta constitutiva correspondente ao ponto material do macro-contínuo \mathbf{x} . Em vista da definição (2.24) e da lei de Fourier ao nível microscópico, eq.(2.44), a equação anterior é equivalente a

$$\mathbf{K}\nabla u = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla u_\mu dV. \quad (2.98)$$

Empregando a decomposição aditiva para o campo de temperatura u_μ e a expressão (2.95), o funcional mostrado acima pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \mathbf{K}\nabla u &= \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla u dV + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_\mu dV \\ &= \mathbf{K}^T \nabla u + \left(\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_{\mu_i} dV \right) (\nabla u)_i, \end{aligned} \quad (2.99)$$

onde \mathbf{K}^T é o tensor constitutivo homogeneizado associado ao modelo de Taylor, sendo dado pela seguinte expressão,

$$\mathbf{K}^T = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu dV. \quad (2.100)$$

Agora, note que a aplicação tensorial $\mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_{\mu_i}$ pode ser escrita em termos da suas componentes como:

$$\mathbf{K}_\mu \nabla \tilde{u}_{\mu_i} = (\mathbf{K}_\mu)_{jk} (\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k) (\nabla \tilde{u}_{\mu_i})_k \mathbf{e}_k = (\mathbf{K}_\mu)_{jk} (\nabla \tilde{u}_{\mu_i})_k \mathbf{e}_j, \quad (2.101)$$

e substituindo-a na eq.(2.99) tem-se,

$$\begin{aligned} \mathbf{K}\nabla u &= \mathbf{K}^T \nabla u + \left(\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} (\mathbf{K}_\mu)_{jl} (\nabla \tilde{u}_{\mu_i})_l \mathbf{e}_j dV \right) \nabla u \cdot \mathbf{e}_i \\ &= \mathbf{K}^T \nabla u + \tilde{\mathbf{K}} \nabla u, \end{aligned} \quad (2.102)$$

onde o tensor constitutivo homogeneizado associado à parcela de flutuação $\tilde{\mathbf{K}}$ é obtido como:

$$\tilde{\mathbf{K}} = \left[\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} (\mathbf{K}_\mu)_{ik} (\nabla \tilde{u}_{\mu_j})_k dV \right] \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (2.103)$$

Finalmente, a forma fechada do tensor constitutivo homogeneizado \mathbf{K} é dada por

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}^T + \tilde{\mathbf{K}}. \quad (2.104)$$

Observação 9. O tensor de condutividade térmica homogeneizado pode ser obtido como a soma de duas contribuições: (i) a média volumétrica \mathbf{K}^T do tensor de condutividade térmica microscópico, e (ii) a contribuição da parcela de flutuação $\tilde{\mathbf{K}}$ que depende somente da flutuação tangencial \tilde{u}_{μ_i} que, por sua vez, depende da escolha do espaço \mathcal{V}_μ . Ambas as contribuições são independentes do gradiente de temperatura macroscópico. Note que para o modelo de Taylor $\tilde{u}_{\mu_i} = 0$ para qualquer direção i , então tem-se que $\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{0}$ e $\mathbf{K} = \mathbf{K}^T$.

2.1.8 Implementação computacional

Esta seção fornece uma breve descrição da implementação computacional da modelagem constitutiva multi-escala discutida nas seções anteriores, no contexto das aproximações por elementos finitos. Em particular, trata-se de forma detalhada a construção das versões discretas dos espaços das variações admissíveis para as flutuações de temperatura microscópica para os diferentes modelos apresentados na Seção 2.1.6. Encerrando a seção, discutem-se brevemente alguns aspectos computacionais.

2.1.8.1 Discretização por elementos finitos

Segundo mostrado anteriormente na Seção 2.1.5, a forma fraca do problema de equilíbrio térmico é dada pela seguinte equação variacional: encontre o campo $\tilde{u}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu$, tal que

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{K}_\mu \nabla(u + \nabla u \cdot \mathbf{y} + \tilde{u}_\mu) \cdot \nabla \eta dV = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*. \quad (2.105)$$

De maneira geral, o campo de flutuações de temperatura \tilde{u}_μ e as variações admissíveis η podem ser aproximadas, para uma malha de elementos finitos com N nós, por uma combinação lineal do tipo

$$\tilde{u}_\mu = \sum_{j=1}^N \tilde{u}_\mu^j \psi_j \quad \text{e} \quad \eta = \sum_{j=1}^N \eta^j \psi_j, \quad (2.106)$$

onde \tilde{u}_μ^j e η^j são, respectivamente, os valores nodais do campo de flutuações de temperatura e das variações admissíveis, e ψ_j são as clássicas funções de interpolação globais. Com a discretização proposta acima para os campos microscópicos \tilde{u}_μ e η , a expressão (2.105) pode ser escrita em forma discreta como

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{D}\mathbf{B}(\bar{\mathbf{u}}_{hp} + \tilde{\mathbf{u}}_{hp}) \cdot \mathbf{B}\boldsymbol{\eta}_{hp} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu, \quad (2.107)$$

onde \mathbf{D} denota a matriz da resposta constitutiva no domínio do EVR, a matriz \mathbf{B} contém as derivadas cartesianas das funções de interpolação ψ_j , $\tilde{\mathbf{u}}_{hp} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ é o vetor associado aos valores nodais da flutuação de temperatura microscópica (sendo que $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ é a versão discreta do espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ associada à aproximação adotada), o vetor $\bar{\mathbf{u}}_{hp}$ contém o produto $(\nabla u \cdot \mathbf{y})|_j$ avaliado em cada nó j da malha de elementos finitos e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ é o vetor que possui os valores nodais associados às variações admissíveis. Aqui os índices $h \in (0, 1] \subset \mathfrak{R}$ e $p \in \mathcal{N}$ denotam a dependência da aproximação com os parâmetros h , que define o tamanho característico dos elementos finitos, e p associado à ordem polinomial das funções que geram a base da aproximação (2.106). Finalmente, a solução por elementos finitos do problema (2.105) consiste em resolver o seguinte sistema algébrico de equações

$$(\mathbf{f}_{hp} + \mathbf{K}_{hp} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}) \cdot \boldsymbol{\eta}_{hp} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu, \quad (2.108)$$

para o vetor de incógnitas nodais generalizado $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$, onde \mathbf{f}_{hp} e \mathbf{K}_{hp} são, respectivamente, o vetor de carregamento nodal generalizado e a matriz de rigidez global, dados por

$$\mathbf{K}_{hp} = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dV \quad \text{e} \quad \mathbf{f}_{hp} = \mathbf{K}_{hp} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}. \quad (2.109)$$

No caso do modelo de temperatura linear no contorno do EVR, desenvolvido na Seção 2.1.6.2, a solução do problema (2.105) segue o caminho clássico dos problemas lineares de condução estacionária de calor. Basta apenas prescrever o valor zero aos graus de liberdade associados às flutuações de temperatura no contorno. No entanto, para os modelos de flutuação periódica de temperatura (Seção 2.1.6.3) e da mínima restrição térmica (Seção 2.1.6.4), as condições de contorno no EVR são não convencionais. A principal diferença reside na geração do espaço discreto para as flutuações de temperatura admissíveis e virtuais, cujas restrições não são descritas de uma forma local. Em seguida, portanto, é brevemente descrita a construção do espaço de elementos finitos, colocando em evidência as condições de contorno em termos dos graus de liberdade nodais para os modelos mencionados anteriormente.

Modelo de temperatura linear no contorno. Como mencionado anteriormente, o modelo de flutuação de temperatura nula no contorno não requer comentários adicionais, pois pode ser implementado seguindo o caminho clássico dos problemas de difusão estacionária de calor. No entanto, em seguida é apresentada uma breve discussão acerca de uma implementação computacional alternativa para esta classe de modelos, seguindo uma estrutura similar à que será empregada na implementação dos modelos de flutuação periódica de temperatura no contorno do EVR e da mínima restrição térmica. Considere, então, que o espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ das flutuações de temperatura admissíveis pode ser definido como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \left\{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^b)^T : \mathbf{v}^b = \mathbf{0} \right\}, \quad (2.110)$$

onde \mathbf{v}^i , \mathbf{v}^b denotam os vetores contendo, respectivamente, os graus de liberdade interiores e do contorno do EVR. Dividindo, portanto, a matriz \mathbf{K}_{hp} e os vetores \mathbf{f}_{hp} , $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ da mesma forma que \mathbf{v} , tem-se que a equação (2.108) pode ser escrita como

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ -\mathbf{f}_{hp}^b \end{array} \right) + \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{ib} \\ \mathbf{k}_{hp}^{bi} & \mathbf{k}_{hp}^{bb} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ -\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^b \end{array} \right) \right\} \cdot \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ -\boldsymbol{\eta}_{hp}^b \end{array} \right) = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^b. \quad (2.111)$$

Introduzindo a restrição do espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ sobre os graus de liberdade do contorno do EVR, a expressão acima se reduz a

$$(\mathbf{f}_{hp}^i + \mathbf{k}_{hp}^{ii} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i) \cdot \boldsymbol{\eta}_{hp}^i = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i. \quad (2.112)$$

Levando em conta a arbitrariedade de $\boldsymbol{\eta}_{hp}^i$, a equação discreta do equilíbrio para os graus de liberdade interiores é dada pelo seguinte sistema de equações algébricas para o vetor $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i$

$$\mathbf{k}_{hp}^{ii} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i = -\mathbf{f}_{hp}^i. \quad (2.113)$$

Como mencionado, o sistema de equações algébricas anterior fornece a solução associada aos graus de liberdade interiores do EVR. Levando em conta, portanto, a decomposição e restrição mostrada na definição do espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$, eq.(2.110), o vetor flutuação de temperatura microscópica $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ é dado por

$$\tilde{\mathbf{u}}_{hp} = (\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i | \mathbf{0})^T. \quad (2.114)$$

Modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno. Para o modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno, a geometria do EVR deve respeitar as restrições previstas na Seção 2.1.6.3. Neste caso, é conveniente assumir³ que cada nó do contorno i^+ , com coordenada \mathbf{y}_i^+ , tem um par i^- , com coordenada \mathbf{y}_i^- , como mostrado na Fig.2.3. Com as condições mencionadas anteriormente, o espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ das flutuações de temperatura admissíveis pode ser definido como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^+ | \mathbf{v}^-)^T : \mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- \}, \quad (2.115)$$

onde \mathbf{v}^i , \mathbf{v}^+ e \mathbf{v}^- denotam os vetores contendo, respectivamente, os graus de liberdade interiores do EVR e das partes Γ^+ e Γ^- do contorno do EVR, ou seja,

$$\Gamma^+ \cup \Gamma^- = \partial\Omega_\mu, \quad \Gamma^+ = \bigcup_{j=1}^N \Gamma_j^+ \quad \text{e} \quad \Gamma^- = \bigcup_{j=1}^N \Gamma_j^-. \quad (2.116)$$

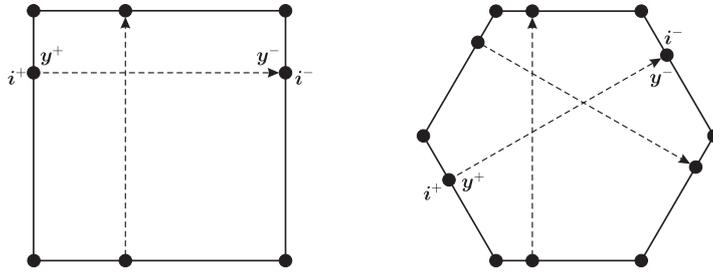


Figura 2.3: geometrias discretas para os EVR periódicos.

Ao dividir \mathbf{f}_{hp} , \mathbf{k}_{hp} , $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ na mesma forma que \mathbf{v} e levando em conta a definição (2.115), lembrando que $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ pertencem ao espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$, a expressão (2.108) assume a forma

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^+ \\ \mathbf{f}_{hp}^- \end{array} \right) + \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{i+} & \mathbf{k}_{hp}^{i-} \\ \hline \mathbf{k}_{hp}^{+i} & \mathbf{k}_{hp}^{++} & \mathbf{k}_{hp}^{+-} \\ \hline \mathbf{k}_{hp}^{-i} & \mathbf{k}_{hp}^{-+} & \mathbf{k}_{hp}^{--} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^- \end{array} \right) \right\} \cdot \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^+ \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^- \end{array} \right) = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^+. \quad (2.117)$$

Considerando a repetição de $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}^+$ nos vetores dos graus de liberdade nodais, a equação

³Esta hipótese não é necessária, mas simplifica consideravelmente a implementação computacional do modelo utilizando o método dos elementos finitos.

discreta do equilíbrio (2.117) se reduz à seguinte forma

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^+ + \mathbf{f}_{hp}^- \end{array} \right) + \left[\begin{array}{c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} \\ \mathbf{k}_{hp}^{+i} + \mathbf{k}_{hp}^{-i} \end{array} \middle| \begin{array}{c} \mathbf{k}_{hp}^{i+} + \mathbf{k}_{hp}^{i-} \\ \mathbf{k}_{hp}^{++} + \mathbf{k}_{hp}^{+-} + \mathbf{k}_{hp}^{--} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ \end{array} \right) \right\} \cdot \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^+ \end{array} \right) = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^+, \quad (2.118)$$

que, em vista da arbitrariedade de $\boldsymbol{\eta}_{hp}^i$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}^+$, tem-se o seguinte sistema linear de equações algébricas para os vetores $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i$ e $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+$,

$$\left[\begin{array}{c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} \\ \mathbf{k}_{hp}^{+i} + \mathbf{k}_{hp}^{-i} \end{array} \middle| \begin{array}{c} \mathbf{k}_{hp}^{i+} + \mathbf{k}_{hp}^{i-} \\ \mathbf{k}_{hp}^{++} + \mathbf{k}_{hp}^{+-} + \mathbf{k}_{hp}^{--} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^+ + \mathbf{f}_{hp}^- \end{array} \right). \quad (2.119)$$

Finalmente, com a solução do sistema de equações algébricas anterior e levando em conta a decomposição apresentada na definição do espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$, eq.(2.115), o vetor flutuação de temperatura microscópica $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ é dado por

$$\tilde{\mathbf{u}}_{hp} = (\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i | \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ | \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+)^T. \quad (2.120)$$

Modelo de fluxo uniforme no contorno do EVR. Para este modelo é seguido um procedimento completamente análogo ao anterior, visando obter o conjunto final de equações algébricas de elementos finitos sob a hipótese de mínima restrição térmica (fluxo uniforme no contorno do EVR). Para começar, considere a seguinte definição da contra-
parte discreta do espaço das flutuações de temperatura admissíveis e virtuais (2.18):

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \left\{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^b)^T : \int_{\partial\Omega_\mu^h} (\boldsymbol{\varphi}_b \cdot \mathbf{v}^b) \mathbf{n} d\partial\Omega_\mu = \mathbf{0} \right\}, \quad (2.121)$$

onde \mathbf{v}^i e \mathbf{v}^b são os vetores que contêm os graus de liberdade interiores e do contorno, respectivamente, e $\boldsymbol{\varphi}_b$ é o vetor das funções de interpolação globais associadas unicamente com os nós do contorno do EVR discretizado. Do espaço mostrado em (2.121), é simples ver que a restrição integral sobre \mathbf{v}^b pode ser escrita equivalentemente em forma matricial como

$$\mathbf{C} \mathbf{v}^b = \mathbf{0}, \quad (2.122)$$

sendo \mathbf{C} a *matriz de restrição* sobre os graus de liberdade do contorno do EVR. Para um EVR discretizado com k nós interiores e m nós no contorno, no caso bidimensional \mathbf{v}^b é um vetor de dimensão m e \mathbf{C} é uma matriz de dimensão $2 \times m$ dada por

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \int_{\partial\Omega_\mu^h} \varphi_{k+1} n_1 d\partial\Omega_\mu & \cdots & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \varphi_{k+m} n_1 d\partial\Omega_\mu \\ \int_{\partial\Omega_\mu^h} \varphi_{k+1} n_2 d\partial\Omega_\mu & \cdots & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \varphi_{k+m} n_2 d\partial\Omega_\mu \end{bmatrix}, \quad (2.123)$$

com n_1 e n_2 denotando as componentes do campo vetorial \mathbf{n} , normal ao contorno $\partial\Omega_\mu$, associadas à base global ortonormal $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ e φ_j , $j = 1, \dots, m$, são as funções de forma globais associadas aos nós do contorno. Neste caso, a equação (2.122) fornece duas restrições lineares sobre a quantidade total dos m graus de liberdade no contorno discreto do EVR. Para EVR tridimensionais, as dimensões do vetor \mathbf{v}^b e das matriz \mathbf{C} são, respec-

tivamente, m e $3 \times m$. No contexto usual de elementos finitos, em vez de utilizar funções de forma globais, a matriz \mathbf{C} é obtida da montagem de matrizes elementares que em duas dimensões, para um elemento e com g nós na intersecção $\Gamma^{(e)}$ do contorno do elemento com o contorno do EVR, é da forma

$$\mathbf{C}^{(e)} = \begin{bmatrix} \int_{\Gamma^{(e)}} \varphi_1^{(e)} n_1 d\partial\Omega_\mu & \cdots & \int_{\Gamma^{(e)}} \varphi_g^{(e)} n_1 d\partial\Omega_\mu \\ \int_{\Gamma^{(e)}} \varphi_1^{(e)} n_2 d\partial\Omega_\mu & \cdots & \int_{\Gamma^{(e)}} \varphi_g^{(e)} n_2 d\partial\Omega_\mu \end{bmatrix}, \quad (2.124)$$

na expressão acima foi assumido que os nós do elemento e que estão em $\Gamma^{(e)}$ são localmente numerados de 1 a g e $\varphi_j^{(e)}$, $j = 1, \dots, g$, são as funções de forma locais associadas ao nó j . Por exemplo, as matrizes para os elementos triangulares convencionais com três e seis nós, tendo um único lado reto de comprimento $l^{(e)}$ e, no caso do elemento triangular de seis nós, três nós igualmente espaçados intersectando o contorno do EVR, são dadas por

$$\mathbf{C}_{T3}^{(e)} = \frac{l^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} n_1 & n_1 \\ n_2 & n_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_{T6}^{(e)} = \frac{l^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} n_1 & 4n_1 & n_1 \\ n_2 & 4n_2 & n_2 \end{bmatrix}. \quad (2.125)$$

A fim de lidar com a restrição (2.122) sobre o espaço discreto das flutuações admissíveis e virtuais de temperatura é conveniente dividir \mathbf{v}^b como

$$\mathbf{v}^b = (\mathbf{v}^f | \mathbf{v}^d | \mathbf{v}^p)^T, \quad (2.126)$$

onde os sub-índices f , d e p denotam, respectivamente, os graus de liberdade livres, dependentes e prescritos no contorno discreto do EVR. Conseqüentemente, a matriz de restrição global é particionada como

$$\mathbf{C} = \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{C}^f & \mathbf{C}^d & \mathbf{C}^p \end{array} \right], \quad (2.127)$$

tal que a equação da restrição integral (2.122) fica

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{C}^f & \mathbf{C}^d & \mathbf{C}^p \end{array} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{v}^f \\ -\mathbf{v}^d \\ \mathbf{v}^p \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.128)$$

O problema de equilíbrio discreto (2.108) é totalmente determinado a menos de um constante. Portanto, é necessário prescrever graus de liberdade para tornar o problema (2.108) bem posto. Trivialmente, sem perda de generalidade, é prescrito

$$\mathbf{v}^p = \mathbf{0}, \quad (2.129)$$

onde \mathbf{v}^p contém um grau de liberdade convenientemente escolhido. Assim, a equação de restrição se reduz a

$$\left[\begin{array}{c|c} \mathbf{C}^f & \mathbf{C}^d \end{array} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{v}^f \\ -\mathbf{v}^d \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.130)$$

Em duas dimensões, o resultado anterior representa duas equações escalares envolvendo $m - 1$ variáveis, e no caso tridimensional são três equações escalares com $m - 1$ variáveis.

Finalmente, o vetor \mathbf{v}^d pode ser escrito em termos de \mathbf{v}^f como

$$\mathbf{v}^d = \mathbf{R}\mathbf{v}^f, \quad (2.131)$$

onde

$$\mathbf{R} = -(\mathbf{C}^d)^{-1}\mathbf{C}^f. \quad (2.132)$$

Note que os graus de liberdade dependentes (correspondentes a \mathbf{v}^d) devem ser escolhidos tal que a matriz \mathbf{C}^d seja inversível. Levando em conta as considerações anteriores, o espaço discreto (2.121) pode ser redefinido como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \left\{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^f | \mathbf{v}^d)^T : \mathbf{v}^d = \mathbf{R}\mathbf{v}^f \right\}, \quad (2.133)$$

que, por conveniência, contém apenas os graus de liberdade não prescritos. A equação de elementos finitos (2.108) para o modelo da mínima restrição térmica é obtida, analogamente a (2.117), dividindo os vetores e matrizes de acordo com a partição mostrada anteriormente e levando em conta (2.133). Assim, o sistema de equações fica

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^f \\ \mathbf{f}_{hp}^d \end{array} \right) + \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{if} & \mathbf{k}_{hp}^{id} \\ \mathbf{k}_{hp}^{fi} & \mathbf{k}_{hp}^{ff} & \mathbf{k}_{hp}^{fd} \\ \mathbf{k}_{hp}^{di} & \mathbf{k}_{hp}^{df} & \mathbf{k}_{hp}^{dd} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f \\ \mathbf{R}\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f \end{array} \right) \right\} \cdot \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^f \\ \mathbf{R}\boldsymbol{\eta}_{hp}^f \end{array} \right) = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^f. \quad (2.134)$$

Finalmente, em vista da arbitrariedade de $\boldsymbol{\eta}_{hp}^i$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}^f$, o sistema anterior pode ser reduzido, levando em conta apenas para as variáveis independentes, no seguinte sistema linear de equações algébricas para os vetores $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i$ e $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f$

$$\left[\begin{array}{c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{if} + \mathbf{k}_{hp}^{id}\mathbf{R} \\ \mathbf{k}_{hp}^{fi} + \mathbf{R}^T\mathbf{k}_{hp}^{di} & \mathbf{k}_{hp}^{ff} + \mathbf{k}_{hp}^{fd}\mathbf{R} + \mathbf{R}^T\mathbf{k}_{hp}^{df} + \mathbf{R}^T\mathbf{k}_{hp}^{dd}\mathbf{R} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^f + \mathbf{R}^T\mathbf{f}_{hp}^d \end{array} \right). \quad (2.135)$$

Com a solução associada aos graus de liberdade interiores e livres, obtidos do sistema de equações algébricas anterior, e a decomposição proposta em (2.121) e (2.133), o vetor flutuação de temperatura microscópica $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ pode ser construído, finalmente, como

$$\tilde{\mathbf{u}}_{hp} = (\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i | \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f | \mathbf{R}\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f | \mathbf{0})^T. \quad (2.136)$$

2.1.8.2 Aspectos computacionais

A resolução numérico-computacional dos modelos constitutivos multi-escala apresentados na Seção 2.1.6 não segue o caminho clássico do método dos elementos finitos, devido ao fato de ter que impor as restrições térmicas do espaço das variações admissíveis \mathcal{V}_μ em sua versão discreta \mathcal{V}_μ^{hp} (ou $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$). Portanto, não é possível utilizar os códigos de programas de elementos finitos usuais (ou comerciais, se for o caso). Este fato motivou o desenvolvimento da técnica de implementação computacional – no contexto dos elementos finitos – apresentada anteriormente na Seção 2.1.8.1.

Visando utilizar os espaços usuais para as funções de interpolação de elementos finitos, na seção anterior foi proposta uma técnica que introduz as restrições dos espaços

discretos na própria construção do sistema de equações algébricas. Com isso, é possível utilizar os espaços de elementos finitos convencionais nesta técnica de modelagem constitutiva multi-escala. No entanto, esta forma de construir os espaços discretos de elementos finitos leva um esforço computacional a mais na identificação dos graus de liberdade que permitem a separação da matriz de rigidez global \mathbf{K}_{hp} e o vetor de carregamentos nodais generalizados \mathbf{f}_{hp} , nas sub-matrizes e sub-vetores necessários para re-escrever o sistema de equações algébricas. Como os graus de liberdade que devem ser identificados variam para cada modelo multi-escala, em seguida é mostrado um breve resumo:

- Modelo de temperatura linear no contorno: interiores (i) e no contorno (b);
- Modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno: interiores (i) e nas partes Γ^+ e Γ^- do contorno ($+$ e $-$);
- Modelo de fluxo uniforme no contorno: interiores (i) e no contorno (f – livres, d – dependentes e p – prescritos).

No entanto, existem outras maneiras para colocar o problema no contexto tradicional dos elementos finitos. Estas outras possibilidades de introduzir as restrições dos espaços das variações admissíveis no problema são as seguintes:

- Uso de multiplicadores de Lagrange.
- Modificação da matriz de rigidez global introduzindo as restrições com a mesma técnica empregada na colocação de condições de contorno não locais.

Por questões que excedem o objetivo deste trabalho, as alternativas mencionadas anteriormente para a introdução das restrições dos espaços no problema não são aqui desenvolvidas. Finalmente, cabe mencionar que toda a implementação computacional do método dos elementos finitos, necessária para o desenvolvimento deste trabalho foi realizada em MatLab®.

2.1.9 Experimentos numéricos

Empregando a implementação computacional associada à modelagem constitutiva multi-escala proposta neste capítulo e discutida na seção anterior, agora são apresentados alguns exemplos numéricos acerca da aplicação desta classe de modelos. Em particular, através de exemplos simples procura-se mostrar as vantagens desta modelagem em relação aos modelos constitutivos clássicos encontrados na literatura.

2.1.9.1 Exemplo 1

A fim de testar os limites preditivos (superior e inferior) da modelagem multi-escala proposta, neste primeiro exemplo é feita uma comparação entre os resultados obtidos da modelagem mostrada na Seção 2.1 e modelos clássicos da literatura. Os modelos teóricos empregados nesta comparação são comumente conhecidos como modelo Voigt-Reuss, Voigt (1889) [132] e Reuss (1929) [103]. Esses modelos foram desenvolvidos para determinar a

condutividade térmica efetiva de um meio composto por uma matriz com inclusões em forma de camadas contínuas de material, alinhadas de forma paralela ou perpendicular à direção do fluxo de calor. Então, para os modelos mencionados anteriormente, a condutividade térmica efetiva do meio k_e é obtida analiticamente como

$$\text{Modelo de Voigt} \Rightarrow k_e = \sum_{j=1}^N f_j k_j, \quad (2.137)$$

$$\text{Modelo de Reuss} \Rightarrow \frac{1}{k_e} = \sum_{j=1}^N \frac{f_j}{k_j}, \quad (2.138)$$

onde k_j e f_j são, respectivamente, o coeficiente de condutividade térmica e a fração de volume associados ao material da fase j -ésima do domínio, tal que, na ausência de vazios, $\sum_{j=1}^N f_j = 1$.

Tomando como referência para a direção do fluxo de calor o eixo horizontal, os EVRs utilizados para o desenvolvimento deste primeiro exemplo estão caracterizados por uma micro célula quadrada de dimensões unitárias, com camadas de largura variável e de material com condutividade térmica k_i inseridos numa matriz caracterizada com uma condutividade térmica k_m , como mostrado na Fig. 2.4.

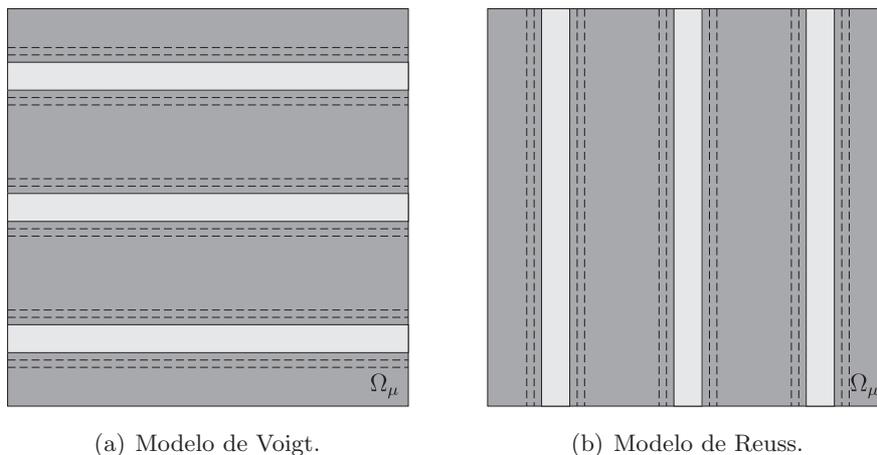
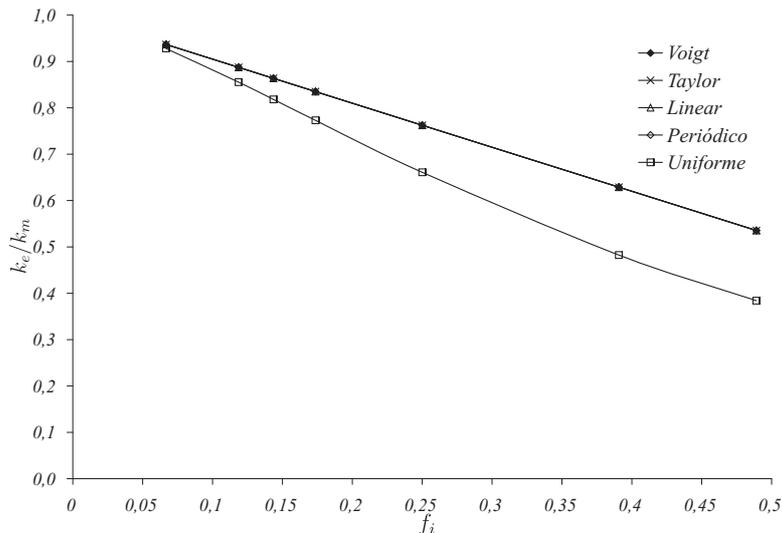
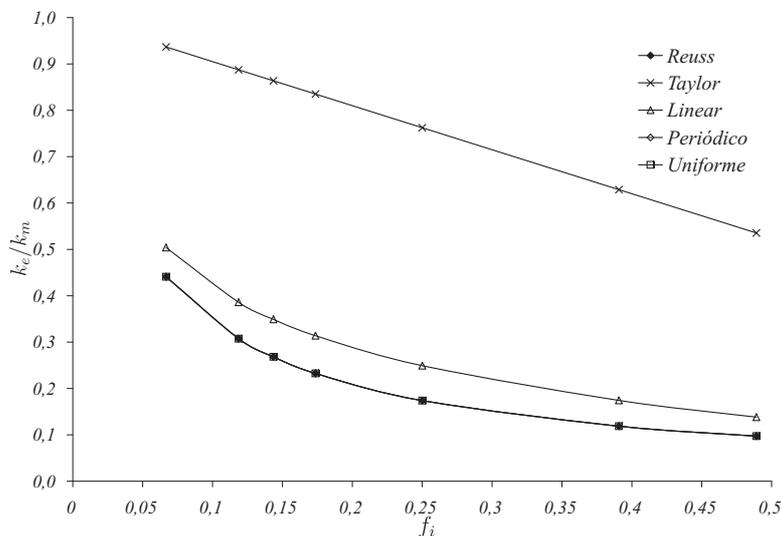


Figura 2.4: exemplo 1 - EVR estudados.

A discretização do domínio de análise é feita utilizando uma malha uniforme de elementos finitos triangulares lineares (3 nós por elemento) com uma quantidade de nós e elementos, respectivamente, da ordem de 1.17×10^4 e 2.3×10^4 . Para a caracterização dos materiais da matriz e inclusão foi empregada uma relação entre seus coeficientes de condutividade térmica de $k_m/k_i = 20.0$. Na Fig.2.5 são mostrados os resultados obtidos com a modelagem proposta para cada modelo constitutivo apresentado na Seção 2.1.6, e a comparação com os modelos teóricos mencionados anteriormente.



(a) Modelo de Voigt.



(b) Modelo de Reuss.

Figura 2.5: exemplo 1 - comparação dos resultados com os modelos teóricos.

Dos resultados mostrados na Fig.2.5, observa-se que a modelagem constitutiva multi-escala desenvolvida neste capítulo captura o comportamento dos modelos teóricos, eqs.(2.137) e (2.138), sem ter que impor *a priori*, na formulação do modelo, a forma e distribuição do material de condutividade k_i (inclusão-camada) na matriz.

Observação 10. Segundo mostrado na Fig.2.5 o modelo de Taylor (regra da mistura) estabelece o limite superior para todos os possíveis modelos constitutivos multi-escala deste tipo, verificando-se o estabelecido na Seção 2.1.6.1. No entanto, o modelo de Taylor é de pouca utilidade prática uma vez que conduz a uma sobreestimação da condutividade térmica macroscópica efetiva. Ostoja-Starzewski & Schulte (1996) [97] mostraram que os modelos associados às condições de contorno no EVR de temperatura linear e fluxo uniforme fornecem, respectivamente, melhores limites superiores e inferiores para o tensor de condutividade térmica macroscópico e, como tal, fornece uma estimativa útil da propriedade global do material. De fato, através dos resultados apresentados na Fig.2.5

- uma vez desconsiderado o modelo de Taylor - observa-se claramente que o modelo de temperatura linear e do fluxo uniforme no contorno do EVR fornecem os limites superior e inferior para a condutividade térmica efetiva do meio.

2.1.9.2 Exemplo 2

Neste segundo exemplo é obtido o coeficiente de condutividade térmica efetivo k_e para uma microestrutura quadrada de dimensões unitárias, caracterizada por uma matriz de condutividade térmica k_m na qual estão inseridas inclusões circulares de condutividade térmica k_i distribuídas de forma aleatória no domínio de análise, como mostrado na Fig. 2.6.

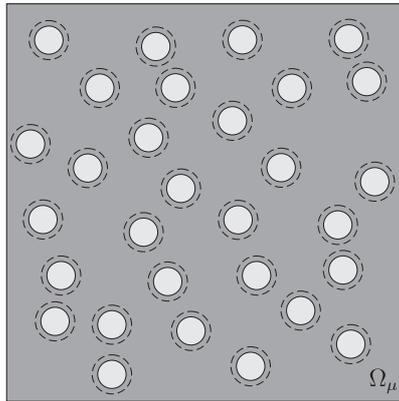


Figura 2.6: exemplo 2 - geometria do EVR

Os resultados obtidos, para as diferentes classes de modelos constitutivos multi-escala, são comparados com o modelo clássico de Maxwell-Eucken (ME1), Eucken (1940) [36], Maxwell (1954) [79], Buonanno & Carotenuto (2000) [21], Rocha & Cruz (2001) [104]. Esse modelo teórico foi desenvolvido para estimar a condutividade térmica efetiva do meio assumindo que na matriz existem pequenos discos de material k_i (diferente de k_m) que estão suficientemente longe um do outro, tal que a distorção local do campo de temperatura na vizinhança do disco não é afetada pela presença das outras inclusões. A condutividade térmica efetiva do meio é então estimada como

$$\text{Modelo ME1} \quad \Rightarrow \quad k_e = \frac{f_m k_m + f_i k_i \frac{3k_m}{2k_m + k_i}}{f_m + f_i \frac{3k_m}{2k_m + k_i}}, \quad (2.139)$$

onde, da mesma forma que no exemplo anterior, f_m e f_i representam as frações de volume do material da matriz e das inclusões, respectivamente, tal que, na ausência de vazios, devem satisfazer a relação $f_m + f_i = 1$.

Para a resolução das equações variacionais (2.96) é empregado o método de elementos finitos com a implementação discutida na Seção 2.1.8.1. Assim, o tensor de condutividade térmica homogeneizado \mathbf{K} é obtido segundo mostrado na Seção 2.1.7. Para efeito da

comparação, o coeficiente de condutividade térmica efetivo k_e é definido como

$$\text{Modelo Multi-escala} \Rightarrow k_e := \frac{1}{n} l_1(\mathbf{K}) = \frac{1}{n} \sum_{p=1}^{p=n} \lambda_p, \quad (2.140)$$

onde n é a dimensão do espaço Euclidiano ($n = 2$ para o caso bidimensional), $l_1(\cdot)$ é o primeiro invariante do tensor (\cdot) e λ_p são os autovalores do tensor \mathbf{K} . A discretização do domínio de análise é feita utilizando uma malha uniforme de elementos finitos triangulares lineares com uma quantidade de nós da ordem de 1.17×10^4 e elementos da ordem de 2.3×10^4 . Para a caracterização dos materiais da matriz e inclusão foi empregada uma relação entre seus coeficientes de condutividade térmica de $k_m/k_i = 20.0$. Finalmente, na Fig.2.7, é mostrada a comparação entre o modelo clássico de Maxwell-Euken e os modelos multi-escala desenvolvidos.

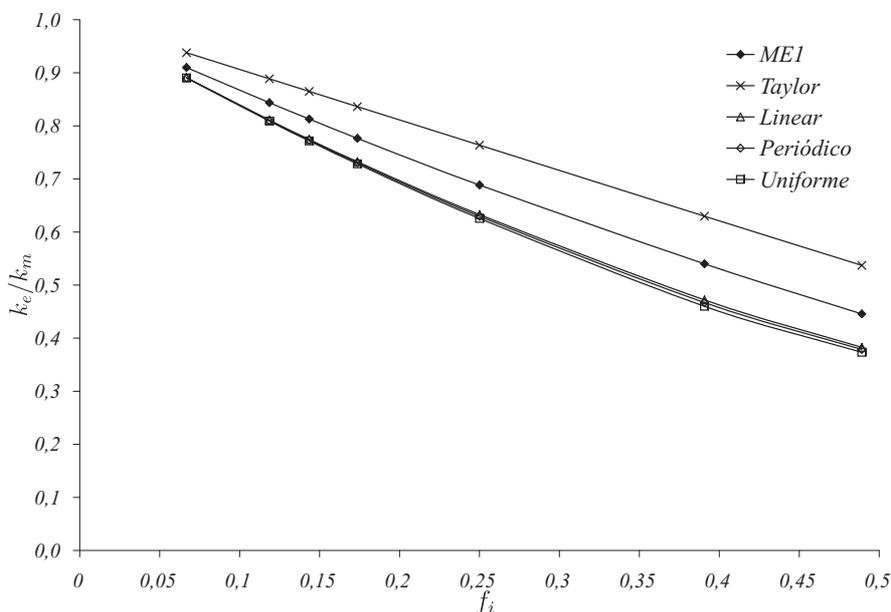


Figura 2.7: exemplo 2 - resultados e comparações.

Observação 11. A principal desvantagem do modelo de Maxwell-Euken é que não leva em conta o efeito da proximidade entre as inclusões. Como consequência, esse modelo é válido para baixas frações de volume f_i . Quando o valor de f_i aumenta, a capacidade preditiva do modelo diminui, sobreestimando a condutividade térmica do meio. Por outro lado, a modelagem multi-escala proposta leva em conta a influência entre as inclusões ao estimar a condutividade térmica efetiva, o que explica a discrepância nos resultados obtidos, como é possível observar na Fig. 2.7.

2.1.9.3 Exemplo 3

Com o intuito de testar as capacidades preditivas da modelagem constitutiva apresentada nas seções anteriores, neste exemplo propõe-se confrontar a técnica computacional apresentada nas seções anteriores com dados experimentais obtidos com experiências em laboratório. Com esse objetivo, são utilizados como referência os resultados experimentais

apresentados por Carson *et al.* (2004) [24]. Nesse trabalho os autores obtêm em laboratório o coeficiente de condutividade térmica efetivo k_e de um material análogo a um material pseudo-poroso para várias frações de vazios. Esta técnica de validação de modelos computacionais, em particular o teste dos limites preditivos (superior e inferior) obtidos, com dados experimentais é amplamente utilizada na literatura para esta classe de aplicações, como pode ser visto, por exemplo, em Carson *et al.* (2005) [25], Yin *et al.* (2005) [134] e Kumlutas & Tavman (2006) [67]. A micro-célula de análise está composta por uma matriz de gel com inclusões de *expanded polystyrene* (SPE) simulando, respectivamente, a fração sólida e os vazios do material real. As propriedades físicas dos materiais utilizados na modelagem computacional são mostrados na Tabela 2.1 (Carson *et al.* (2004) [24]). Na simulação numérica são estudados três EVRs quadrados de tamanho unitários com diferentes quantidades e distribuições das inclusões para várias frações de volume:

- Caso A: uma única inclusão centrada de raio r variável (Fig.2.8(a)) no domínio Ω_μ , discretizado com uma malha uniforme de elementos finitos triangulares lineares com um total de 11767 nós e 23132 elementos.
- Caso B: 8 inclusões de raio variável r , distribuídas de forma aleatória no domínio Ω_μ (Fig.2.8(b)), discretizado com uma malha de elementos finitos uniforme possuindo 47994 elementos triangulares lineares e 24284 nós.
- Caso C: 31 inclusões de raio r variável, distribuídas de forma aleatória no domínio Ω_μ (Fig.2.8(c)), discretizado com uma malha de elementos finitos uniforme possuindo 23722 elementos triangulares lineares e 12062 nós.

	k (W m ⁻¹ K ⁻¹)	ρ (kg m ⁻³)	c (kJ kg ⁻¹ K ⁻¹)
<i>Guar gel</i>	0.600 ± 2%	1010 ± 1%	4.15 ± 0.5%
<i>Expanded polystyrene</i>	0.035 ± 3%	35.4 ± 0.6%	1.006 ± 0.5%

Tabela 2.1: exemplo 3 - propriedades físicas.

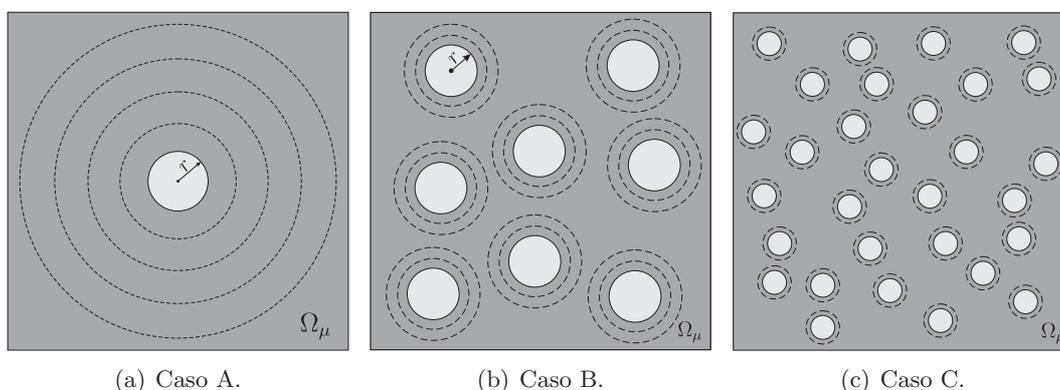


Figura 2.8: exemplo 3 - geometrias dos EVRs.

Para a obtenção do coeficiente de condutividade térmica efetivo é empregado o mesmo procedimento descrito no exemplo anterior, no qual o valor do parâmetro efetivo

k_e é obtido da expressão (2.140) utilizando o desenvolvimento apresentado na Seção 2.1.7. Na Tabela 2.2 são apresentados os tensores constitutivos homogeneizados para uma determinada fração de volume de inclusões f_i , obtido para cada um dos modelos constitutivos multi-escala identificados como: Taylor- \mathcal{T} , Linear- \mathcal{L} , Periódico- \mathcal{P} e Mínima restrição térmica- \mathcal{M} .

$$\mathbf{K}^{\mathcal{T}} = \begin{bmatrix} 9.95 & 0 \\ 0 & 9.95 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 7.48 & 0 \\ 0 & 7.48 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 7.03 & 0 \\ 0 & 7.03 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 6.77 & 0 \\ 0 & 6.77 \end{bmatrix}$$

(a) Caso A. $f_i \approx 0.50$.

$$\mathbf{K}^{\mathcal{T}} = \begin{bmatrix} 9.44 & 0 \\ 0 & 9.44 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 6.76 & 0.02 \\ 0.02 & 7.02 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 6.34 & 0.09 \\ 0.09 & 6.88 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 6.27 & 0.03 \\ 0.03 & 6.64 \end{bmatrix}$$

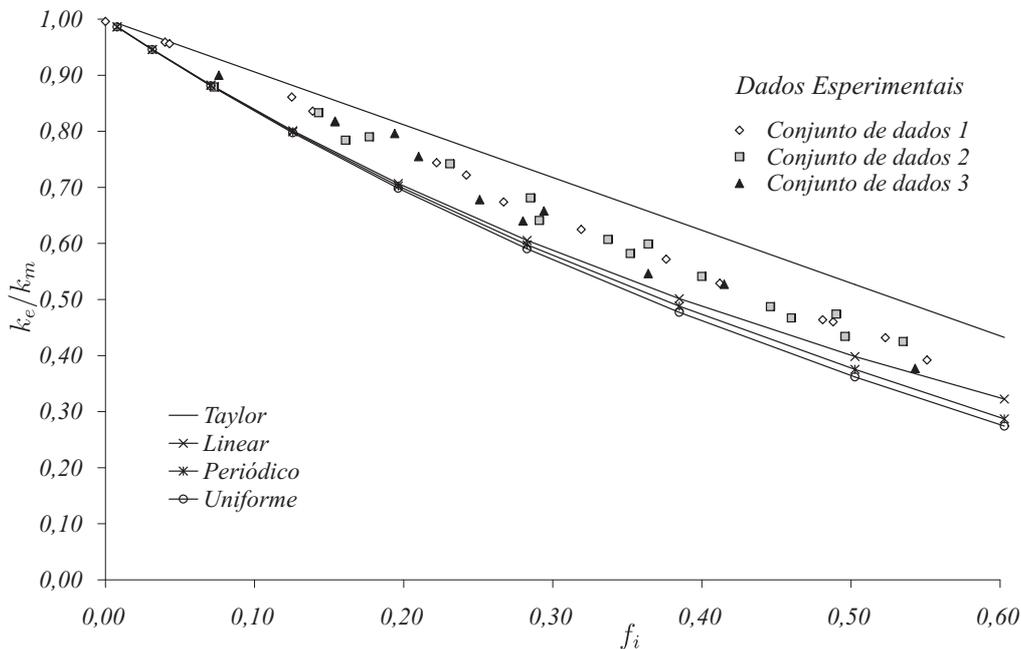
(b) Caso B. $f_i \approx 0.48$.

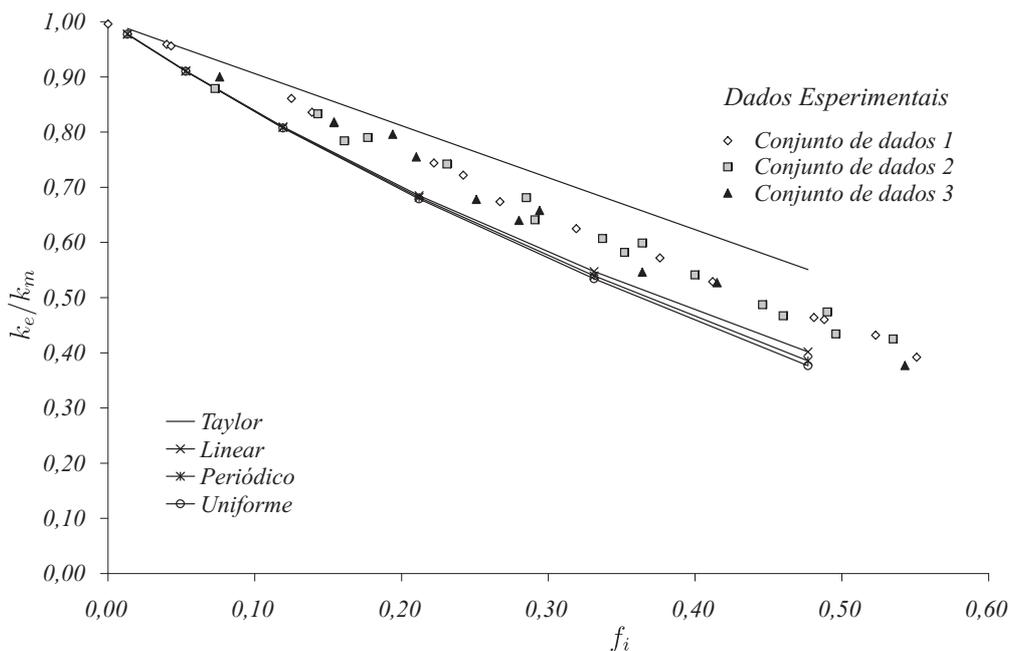
$$\mathbf{K}^{\mathcal{T}} = \begin{bmatrix} 9.28 & 0 \\ 0 & 9.28 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 6.75 & 0.01 \\ 0.01 & 6.62 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 6.67 & 0.01 \\ 0.01 & 6.57 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 6.60 & 0 \\ 0 & 6.46 \end{bmatrix}$$

(c) Caso C. $f_i \approx 0.49$.

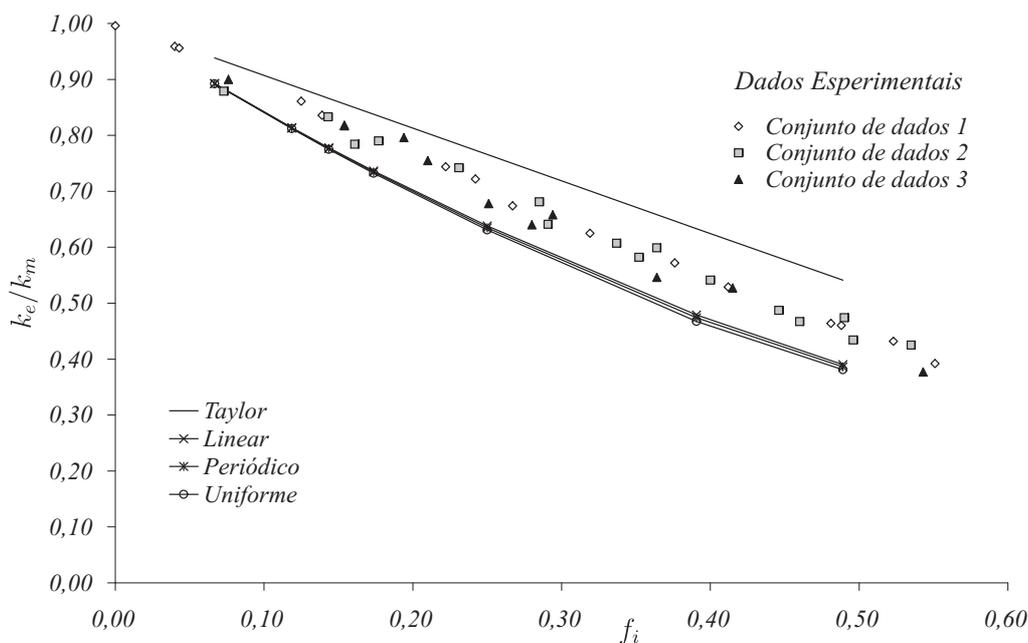
Tabela 2.2: exemplo 3 - resposta constitutiva macroscópica.

Finalmente, na Fig.2.9 são mostrados os resultados obtidos para os Casos A, B e C, e a comparação com os dados experimentais.





(b) Caso B.



(c) Caso C.

Figura 2.9: exemplo 3 - resultados e comparação com os dados experimentais.

Desta comparação (Fig.2.9), observar-se que os dados experimentais estão contidos entre os limites superior e inferior fornecidos pelos modelos constitutivos multi-escala mostrados neste trabalho. Sendo assim, é possível afirmar que esta classe de modelos fornece uma estimativa adequada e útil da resposta constitutiva efetiva (macroscópica) de um material real, evidenciando a capacidade preditiva dos modelos multi-escalas.

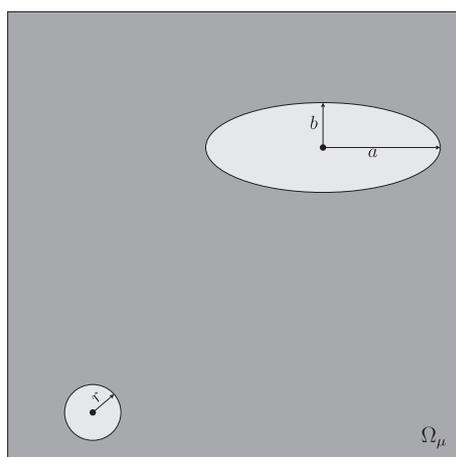
Observação 12. : Segundo mostrado na Fig.2.9, não existe uma variação relativa importante do coeficiente de condutividade térmica efetiva entre os diferentes EVRs estudados (Casos A, B e C). Portanto é possível afirmar que a resposta constitutiva efetiva k_e é

mais sensível à variação da fração de volume f_i e da relação k_m/k_i que da própria distribuição espacial das inclusões; sempre que as inclusões não estejam alinhadas numa direção preferencial, introduzindo uma ortotropia na resposta constitutiva macroscópica da micro-célula.

2.1.9.4 Exemplo 4

Em situações mais gerais que aquelas apresentadas nos exemplos anteriores, não é possível caracterizar o comportamento de um dado material através de um único parâmetro efetivo. Necessita-se, de fato, obter o tensor constitutivo macroscópico a partir da micro-estrutura que caracteriza a composição interna do material. Neste último exemplo, portanto, será mostrado que através da modelagem constitutiva multi-escala adotada é possível obter computacionalmente o tensor de condutividade térmica homogeneizado \mathbf{K} que caracteriza a resposta constitutiva macroscópica associada a uma dada micro-estrutura do EVR.

A microestrutura estudada está caracterizada por um domínio quadrado de dimensões unitárias composto por um material de condutividade térmica k_m (matriz) na qual estão inseridas uma inclusão circular, com condutividade k_i , centrada no ponto (0.19, 0.11) de raio $r = 0.12$ e uma inclusão elíptica, também com condutividade k_i , centrada no ponto de coordenadas cartesianas (0.69, 0.67), com o semi-eixo maior de comprimento $a = 0.25$ orientado na direção horizontal e o semi-eixo menor de comprimento $b = 0.10$, segundo mostrado na Fig.2.10. Para a caracterização dos materiais utilizados na simulação foi empregado uma relação $k_m/k_i = 20.0$. Na resolução numérica foi utilizada uma malha com 11816 nós e 23230 elementos finitos triangulares lineares. O tensor constitutivo é obtido empregando a metodologia mostrada na Seção 2.1.7. Os resultados são apresentados na Fig.2.10.



$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{\mathcal{T}} &= \begin{bmatrix} 18.310 & 0 \\ 0 & 18.310 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{K}^{\mathcal{L}} &= \begin{bmatrix} 17.818 & 0.038 \\ 0.038 & 15.799 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{K}^{\mathcal{P}} &= \begin{bmatrix} 17.736 & 0.001 \\ 0.001 & 15.392 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{K}^{\mathcal{M}} &= \begin{bmatrix} 17.622 & 0.054 \\ 0.054 & 14.886 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Figura 2.10: exemplo 4 - geometria do EVR.

Observação 13. *Devido à simetria do tensor constitutivo homogeneizado \mathbf{K} , a máxima anisotropia possível é uma ortotropia nas direções principais do tensor \mathbf{K} , ou seja, nas direções dos autovetores associados aos autovalores λ_i .*

2.2 Análise de sensibilidade topológica

Como mencionado no início do capítulo, para estabelecer a sensibilidade da resposta constitutiva macroscópica em relação a uma perturbação singular na micro-estrutura do EVR serão utilizados os conceitos da análise de sensibilidade topológica propostos, entre outros, por Sokołowski & Żochowski (1999) [116], Cía *et al.* (2000) [26], Novotny (2003) [90] e Novotny *et al.* (2003) [92]. Esta expansão assintótica topológica estabelece a sensibilidade de um funcional de forma em relação a uma perturbação infinitesimal na topologia do domínio de definição do problema. O principal termo dessa expansão é a chamada derivada topológica, cujo cálculo é uns dos principais objetivos deste trabalho. De fato, nesta seção é apresentado o desenvolvimento matemático e o cálculo da mencionada derivada topológica para o modelo constitutivo multi-escala de condução estacionária de calor em materiais com comportamento isotrópico ao nível microscópico. Em particular, objetiva-se obter a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico quando é introduzida uma pequena inclusão circular na micro-escala representada pelo EVR, ou seja,

$$\mathbf{q}^\varepsilon \cdot \nabla u = \mathbf{q} \cdot \nabla u + \frac{1}{V_\mu} f(\varepsilon) D_T \psi + o(f(\varepsilon)). \quad (2.141)$$

Sendo assim, lembrando que o EVR é representado por $\Omega_\mu = \Omega_\mu^m \cup \Omega_\mu^i$, primeiramente é introduzido um furo circular \mathcal{H}_ε de raio ε centrado no ponto arbitrário $\hat{\mathbf{y}} \in \Omega_\mu$ da matriz com coeficiente de condutividade térmica k ; em seguida, insere-se uma inclusão \mathcal{I}_ε com coeficiente de condutividade térmica γk , onde γ representa o contraste, de modo a ocupar o vazio ora produzido. Logo, o domínio topologicamente perturbado é definido como $\Omega_{\mu\varepsilon} = (\Omega_\mu \setminus \mathcal{H}_\varepsilon) \cup \mathcal{I}_\varepsilon$ (ver Fig.2.11). Cabe ainda definir a normal unitária ao contorno da inclusão como $\mathbf{n}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} := -\mathbf{n}$.

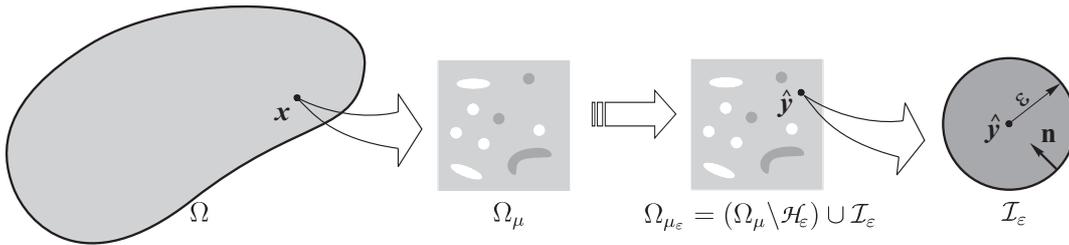


Figura 2.11: micro-estrutura perturbada com uma inclusão \mathcal{I}_ε .

Além do mais, o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel estabelece que a energia térmica específica macroscópica avaliada no ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ deve ser igual à média volumétrica da energia térmica microscópica associada ao correspondente EVR nesse ponto para toda temperatura admissível, ou seja,

$$\mathbf{q} \cdot \nabla u = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{q}_\mu \cdot \nabla u_\mu dV \quad \text{e} \quad \mathbf{q}^\varepsilon \cdot \nabla u = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mu\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu\varepsilon} \cdot \nabla u_{\mu\varepsilon} dV, \quad (2.142)$$

onde u_μ satisfaz a representação em decomposição aditiva mostrada em (2.5), ou seja, $u_\mu = u + \nabla u \cdot \mathbf{y} + \tilde{u}_\mu$, sendo \tilde{u}_μ solução do problema variacional (2.47) e, de forma análoga ao

apresentado na Seção 2.1, o fluxo de calor associado ao domínio perturbado Ω_{μ_ε} , $\mathbf{q}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})$, é definido como,

$$\mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} = -k_\mu^* \nabla u_{\mu_\varepsilon}, \quad (2.143)$$

logo, para $\gamma \in [0, \infty)$, a condutividade térmica $k_\mu^* = k_\mu^*(\mathbf{y})$ é tal que

$$k_\mu^* = \begin{cases} k_\mu & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \setminus \mathcal{H}_\varepsilon \\ \gamma k_\mu & \forall \mathbf{y} \in \mathcal{I}_\varepsilon \end{cases}. \quad (2.144)$$

Além do mais, a temperatura microscópica $u_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{K}_{\mu_\varepsilon} := \{v \in \mathcal{K}_\mu : \llbracket v \rrbracket = 0 \text{ sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon\}$, associada ao domínio perturbado Ω_{μ_ε} , admite a seguinte representação

$$u_{\mu_\varepsilon} = u + \nabla u \cdot \mathbf{y} + \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \nabla u_{\mu_\varepsilon} = \nabla u + \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}, \quad (2.145)$$

sendo $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ o campo de flutuação de temperatura microscópica associada ao domínio Ω_{μ_ε} , solução do problema variacional: encontre o campo de flutuação de temperatura microscópica $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \in \tilde{\mathcal{K}}_{\mu_\varepsilon} := \left\{v \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu : \llbracket v \rrbracket = 0 \text{ sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon\right\}$, tal que

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \eta_\varepsilon dV = - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* \nabla u \cdot \nabla \eta_\varepsilon dV \quad \forall \eta_\varepsilon \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon} := \{\xi \in \mathcal{V}_\mu : \llbracket \xi \rrbracket = 0 \text{ sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon\}. \quad (2.146)$$

A forma forte associada ao problema variacional (2.146) é obtida analogamente à eq.(2.49) considerando as condições de salto sobre a fronteira da perturbação \mathcal{I}_ε . Assim, a equação de Euler-Lagrange associada a eq.(2.146) resulta no seguinte problema de valor no contorno: encontre $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$, tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -k_\mu \Delta \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \Omega_\mu \setminus \mathcal{H}_\varepsilon \\ -\gamma k_\mu \Delta \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \mathcal{I}_\varepsilon \\ \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} dV = -\nabla u \cdot \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{y} dV & \\ \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} dS = \mathbf{0} & \\ \llbracket \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \cup \partial\mathcal{I}_\varepsilon \\ \llbracket k_\mu^* \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial \mathbf{n}} \rrbracket = -\llbracket \bar{\mathbf{q}}_\mu^* \rrbracket \cdot \mathbf{n} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \cup \partial\mathcal{I}_\varepsilon \end{array} \right., \quad (2.147)$$

sendo $\bar{\mathbf{q}}_\mu^*$ o fluxo de calor microscópico induzido pelo gradiente de temperatura macroscópico ∇u associado à micro-estrutura perturbada Ω_{μ_ε} , ou seja, $\bar{\mathbf{q}}_\mu^* = -k_\mu^* \nabla u$.

Observação 14. *Mais uma vez (veja Observação 6, pag.21), a condição (2.147)₄ está naturalmente satisfeita pela escolha feita para o espaço $\mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$, compatível com a escolha para \mathcal{V}_μ . Além disso, desde que o termo do lado direito de (2.147)₆ tem média nula, e do Lema de Lax-Milgram, tem-se que existe uma única solução para o problema (2.146). Finalmente, da coercividade do lado esquerdo de (2.47) e (2.146), tem-se que a seguinte estimativa é satisfeita para o caso bi-dimensional analisado (veja Seção B.1 do apêndice B),*

$$\|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{\mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}} = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (2.148)$$

Introduzindo a seguinte notação para a energia térmica microscópica associada ao

domínio perturbado

$$\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla u_{\mu_\varepsilon} dV, \quad (2.149)$$

observa-se que a derivada de $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}$ em relação a u_{μ_ε} na direção $\delta\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$, onde $\delta\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ é a flutuação de temperatura virtual microscópica, permite estabelecer a seguinte condição de mínima energia

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})}{\partial u_{\mu_\varepsilon}}, \delta\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \right\rangle = 0 \quad \forall \delta\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \delta\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} dV = 0 \quad \forall \delta\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}. \quad (2.150)$$

Empregando a representação da temperatura u_{μ_ε} dada pela eq.(2.145) e o conceito da homogeneização do fluxo de calor, tem-se

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} \cdot [\nabla(\delta u_{\mu_\varepsilon}) - \nabla(\delta u)] dV = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla(\delta u_{\mu_\varepsilon}) dV - V_\mu \mathbf{q}^\varepsilon \cdot \nabla(\delta u), \quad (2.151)$$

substituindo o resultado acima na expressão (2.150), chega-se a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla(\delta u_{\mu_\varepsilon}) dV - V_\mu \mathbf{q}^\varepsilon \cdot \nabla(\delta u) &= 0 \\ \Rightarrow \mathbf{q}^\varepsilon \cdot \nabla(\delta u) &= \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{q}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla(\delta u_{\mu_\varepsilon}) dV. \end{aligned} \quad (2.152)$$

Observação 15. *Do resultado anterior segue que a mínima energia do EVR, na sua configuração perturbada, está associada com a energia específica virtual avaliada no ponto material \mathbf{x} . Sendo assim, a eq.(2.152) define o operador constitutivo macroscópico perturbado representado por $\mathbf{q}^\varepsilon(\mathbf{x})$. Então, a expansão (2.141) fornece, de fato, a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando a microestrutura é perturbada de forma não suave com a introdução de uma inclusão \mathcal{I}_ε .*

2.2.1 Obtenção da derivada topológica

A derivada topológica é obtida a partir da análise assintótica de funcionais que dependem tanto explícita quanto implicitamente do domínio Ω_{μ_ε} , sendo que essa última dependência vem do fato que a flutuação de temperatura microscópica $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ é solução do problema variacional associado ao EVR perturbado, eq.(2.146). Este fato conduz a alguns problemas técnicos que vêm sendo gradativamente resolvidos. De fato, diversas metodologias de cálculo da derivada topológica têm sido apresentadas na literatura, dentre outras pode-se mencionar: *material derivative method*: Sokołowski & Żochowski (1999) [116], *domain truncation method*: Garreau et al. (2001) [40] e *topological-shape sensitivity method*: Novotny et al. (2003) [92]. Em particular, dos métodos existentes na literatura para o cálculo da derivada topológica, neste trabalho será utilizado o proposto por Novotny no seu trabalho de doutorado, Novotny (2003) [90], cuja expressão para a derivada topológica foi apresentada na seção introdutória deste trabalho na eq.(1.4). Através dessa abordagem, a análise de sensibilidade à mudança de forma deve ser desenvolvida para o caso particular em que a perturbação singular sofre uma expansão uniforme. Nesse contexto, pode-se

definir um campo de velocidade de mudança de forma suficientemente regular $\mathbf{v} \in \Omega_{\mu_\varepsilon}$, com a característica particular de ser nulo no contorno do domínio da matriz, $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sobre $\partial\Omega_\mu^m$, e possuir, no contorno da perturbação singular, uma direção contrária ao vetor normal definido nesse contorno, ou seja, $\mathbf{v} = -\mathbf{n}$ sobre $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$. Em seguida, na Proposição 1, é apresentado o cálculo da derivada do funcional de forma $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$, definido na eq.(2.149), em relação ao parâmetro ε .

Proposição 1. *Seja $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ o funcional definido em (2.149). Então a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ com relação ao parâmetro ε é escrita como*

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\partial\Omega_\mu} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \operatorname{div} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{v} dV + \int_{\partial\Omega_\mu^i} \llbracket \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS, \quad (2.153)$$

onde \mathbf{v} é o campo de velocidade de mudança de forma definido em Ω_{μ_ε} e $\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon}$ é a generalização do clássico tensor momento-energia de Eshelby (1975) [35] no EVR, que para o caso de análise é dado por

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} := -k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})]. \quad (2.154)$$

Prova. Estabelecendo uma analogia com a Mecânica do Contínuo, Gurtin (1981) [49], a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε pode ser obtida utilizando o teorema de transporte de Reynolds. Assim sendo, tem-se que

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) = - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* \left(\frac{d}{d\varepsilon} |\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 + |\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \operatorname{div} \mathbf{v} \right) dV. \quad (2.155)$$

Empregando o conceito de derivada material de campos espaciais, Gurtin (1981) [49], o primeiro termo da integral acima é dado por:

$$\frac{d}{d\varepsilon} |\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 = 2 \nabla u_{\mu_\varepsilon} \cdot (\nabla u_{\mu_\varepsilon})', \quad (2.156)$$

onde $(\cdot)'$ é a derivada material (total) do campo (\cdot) em relação ao parâmetro ε . Utilizando a decomposição aditiva do campo de temperatura u_{μ_ε} dada pela eq.(2.145), a derivada material do gradiente térmico no EVR perturbado é obtido como,

$$\nabla u_{\mu_\varepsilon} = \nabla u + \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad (\nabla u_{\mu_\varepsilon})' = (\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon})' = \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} - (\nabla \mathbf{v})^T \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}, \quad (2.157)$$

e introduzindo o resultado anterior na expressão (2.156), tem-se que

$$\frac{d}{d\varepsilon} |\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 = 2 \left[\nabla u \cdot \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} + \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} - (\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u + \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}) \cdot \nabla \mathbf{v} \right]. \quad (2.158)$$

Substituindo (2.158) em (2.155) e empregando a definição do $\operatorname{div} \mathbf{v} = \mathbf{I} \cdot \nabla \mathbf{v}$,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) &= - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} 2k_\mu^* \left[\nabla u \cdot \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} + \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} - (\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u + \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}) \cdot \nabla \mathbf{v} \right] + \\ &\quad k_\mu^* (|\nabla u|^2 + 2 \nabla u \cdot \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} + |\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}|^2) \mathbf{I} \cdot \nabla \mathbf{v} dV. \end{aligned} \quad (2.159)$$

Observa-se, no entanto, que $\dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$. Assim, os dois primeiros termos da integral acima satisfazem a equação de estado (2.146), ou seja

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* (\nabla u \cdot \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} + \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon}) dV = 0 \quad \forall \dot{\tilde{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}. \quad (2.160)$$

Portanto a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε é dada por,

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) = - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})] \cdot \nabla \mathbf{v} dV. \quad (2.161)$$

Finalmente, levando em conta a definição do vetor normal \mathbf{n} e utilizando o teorema da divergência, a expressão acima pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) &= - \int_{\partial\Omega_\mu} k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &\quad + \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \operatorname{div} (k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})]) \cdot \mathbf{v} dV \\ &\quad - \int_{\partial\Omega_\mu^i} [k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &\quad - \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} [k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS, \end{aligned} \quad (2.162)$$

onde é possível identificar o tensor Σ_{μ_ε} definido em (2.154). ■

Proposição 2. *Seja Σ_{μ_ε} o tensor momento-energia generalizado de Eshelby no EVR definido em (2.154). Então, o campo Σ_{μ_ε} possui divergência nula em Ω_{μ_ε} , ou seja*

$$\operatorname{div} \Sigma_{\mu_\varepsilon} = \mathbf{0}. \quad (2.163)$$

Prova. Considerando a definição mostrada na eq.(2.154) e as operações apresentadas no Apêndice C, a divergência do tensor Σ_{μ_ε} é obtida como

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \Sigma_{\mu_\varepsilon} &= -\operatorname{div} (k_\mu^* [|\nabla u_{\mu_\varepsilon}|^2 \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon})]) \\ &= -2k_\mu^* (\nabla \nabla u_{\mu_\varepsilon}) \nabla u_{\mu_\varepsilon} + 2k_\mu^* [\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \Delta u_{\mu_\varepsilon} + (\nabla \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}) \nabla u_{\mu_\varepsilon}] \\ &= 2k_\mu^* (\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \Delta u_{\mu_\varepsilon}). \end{aligned} \quad (2.164)$$

Levando em conta a equação de Euler-Lagrange (2.147)₁, observa-se que a divergência de Σ_{μ_ε} de fato é nula. ■

Considerando os resultados mostrados anteriormente, eq.(2.153) e eq.(2.163), a expressão da análise de sensibilidade do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ pode ser escrita em termos de integrais de contorno da seguinte maneira,

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\partial\Omega_\mu} \Sigma_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\Omega_\mu^i} [\Sigma_{\mu_\varepsilon}] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} [\Sigma_{\mu_\varepsilon}] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS. \quad (2.165)$$

Introduzindo a definição do campo de velocidade de mudança de forma \mathbf{v} em (2.165),

a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε é dada finalmente por:

$$\frac{d}{d\varepsilon}\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) = - \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.166)$$

Desse último resultado observa-se que a análise de sensibilidade à mudança de forma do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ depende apenas do salto fluxo normal do tensor de Eshelby através do contorno da perturbação $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$.

Observação 16. *No contexto da modelagem constitutiva multi-escala, tem-se que no modelo de Taylor o espaço das variações cinematicamente admissíveis \mathcal{V}_μ é o espaço nulo. Conseqüentemente, as flutuações de temperatura microscópicas são nulas, ou seja*

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^T = \{\mathbf{0}\} \quad \Rightarrow \quad \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} = 0 \quad e \quad \nabla u_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}) = \nabla u(\mathbf{x}). \quad (2.167)$$

Assim, o gradiente de temperatura microscópica é uniforme no domínio Ω_{μ_ε} . Considerando o resultado anterior na definição do tensor momento-energia generalizado de Eshelby, eq.(2.154), tem-se

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} = -k_\mu^* |\nabla u|^2 \mathbf{I}, \quad (2.168)$$

introduzindo esse resultado na derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$, eq.(2.166), tem-se que no caso particular do modelo de Taylor a sensibilidade do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon}\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) &= \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket k_\mu^* |\nabla u|^2 \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} dS \\ &= 2\pi\varepsilon k_\mu (1 - \gamma) |\nabla u|^2. \end{aligned} \quad (2.169)$$

Substituindo o resultado anterior na definição da derivada topológica e identificando a função $f(\varepsilon)$ como a medida da perturbação \mathcal{I}_ε ,

$$f(\varepsilon) = \pi\varepsilon^2 \quad \Rightarrow \quad f'(\varepsilon) = 2\pi\varepsilon, \quad (2.170)$$

a derivada topológica associada ao modelo de Taylor é obtida trivialmente como

$$D_T^{\mathcal{I}}\psi = k_\mu (1 - \gamma) |\nabla u|^2. \quad (2.171)$$

Nos outros modelos constitutivos multi-escala o espaço das variações admissíveis para as flutuações de temperatura microscópicas é não trivial. Necessita-se, portanto, levar em conta que $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ é solução do problema variacional (2.146). Assim, adotando-se um sistema de coordenadas curvilíneo definido no contorno $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ caracterizado pelos vetores ortonormais \mathbf{n} e \mathbf{t} , o fluxo do tensor de Eshelby na direção normal resulta em

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = -k_\mu^* \left[|\nabla u|^2 + 2 \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} (\nabla u \cdot \mathbf{t}) - \left(\frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} \right)^2 \right]. \quad (2.172)$$

Por outro lado, observa-se que as condições de continuidade da flutuação de tem-

peratura $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ no contorno $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ resultam nas seguintes relações,

$$\llbracket \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket |_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} \right|_m - \left. \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} \right|_i = 0, \quad (2.173)$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \right|_m - \gamma \left. \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \right|_i = -(1-\gamma) \nabla u \cdot \mathbf{n} \quad (2.174)$$

$$\Rightarrow \quad \left. \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \right|_m = -(1-\gamma) \nabla u \cdot \mathbf{n} + \gamma \left. \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \right|_i. \quad (2.175)$$

Com as relações mostradas acima e a definição do parâmetro k_μ^* , tem-se que no contorno da perturbação são satisfeitas as seguintes igualdades,

$$\llbracket k_\mu^* |\nabla u|^2 \rrbracket = k_\mu (1-\gamma) (\nabla u \otimes \nabla u) \cdot \mathbf{I}, \quad (2.176)$$

$$\left\llbracket k_\mu^* \left(\frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} \right)^2 \right\rrbracket = k_\mu (1-\gamma) (\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i \otimes \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i) \cdot (\mathbf{t} \otimes \mathbf{t}), \quad (2.177)$$

$$\begin{aligned} \left\llbracket k_\mu^* \left(\frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \right)^2 \right\rrbracket &= k_\mu (1-\gamma) [(1-\gamma) (\nabla u \otimes \nabla u) - 2\gamma (\nabla u \otimes_s \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i) \\ &\quad - \gamma (\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i \otimes \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i)] \cdot (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}), \end{aligned} \quad (2.178)$$

$$\left\llbracket k_\mu^* \frac{\partial \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} (\nabla u \cdot \mathbf{t}) \right\rrbracket = k_\mu (1-\gamma) (\nabla u \otimes_s \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i) \cdot (\mathbf{t} \otimes \mathbf{t}). \quad (2.179)$$

Utilizando os resultados anteriores e levando em conta a igualdade tensorial $\mathbf{t} \otimes \mathbf{t} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$, munido da representação (2.145)₂, o salto do fluxo do tensor de Eshelby na direção normal através do contorno da perturbação pode ser escrito em termos da solução no interior da inclusão \mathcal{I}_ε , da seguinte maneira:

$$\llbracket \Sigma_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = -k_\mu (1-\gamma) (\nabla u_{\mu_\varepsilon} |_i \otimes \nabla u_{\mu_\varepsilon} |_i) \cdot [\mathbf{I} - (1-\gamma) (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n})]. \quad (2.180)$$

Para resolver a integral no contorno da perturbação \mathcal{I}_ε dada pela eq.(2.166) é necessário conhecer o comportamento da solução interior $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} |_i$ em relação ao parâmetro ε . Então, utilizando-se a análise assintótica clássica (ver eq.(A.14), Apêndice A), o campo de flutuação de temperatura microscópica no interior da perturbação é dado por

$$\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}) |_i = \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) + \frac{1-\gamma}{1+\gamma} [\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})] \cdot (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) + o(\varepsilon) \quad \forall \mathbf{y} \in \mathcal{I}_\varepsilon, \quad (2.181)$$

sendo $\tilde{u}_\mu(\mathbf{y})$ é a solução do problema no domínio não perturbado, $\nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})$ é o gradiente da solução no domínio não perturbado avaliado no ponto $\hat{\mathbf{y}}$. Assim, tem-se a seguinte expansão para o gradiente do campo de flutuação de temperatura em \mathcal{I}_ε ,

$$\nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}) |_i = \nabla \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) + \frac{1-\gamma}{1+\gamma} [\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})] + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (2.182)$$

com $\mathcal{O}(\varepsilon)$ denotando os termos de maior ordem em ε , tal que $\mathcal{O}(\varepsilon) \rightarrow 0$ quando $\varepsilon \rightarrow 0$.

No entanto, expandindo a solução $\tilde{u}_\mu(\mathbf{y})$ em série de Taylor em torno ao ponto $\hat{\mathbf{y}}$, o gradiente $\nabla \tilde{u}_\mu(\mathbf{y})$ pode ser escrito, assumindo regularidade suficiente de \tilde{u}_μ em \mathcal{I}_ε , da

seguinte maneira,

$$\begin{aligned}\nabla \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) &= \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}}) + D(\nabla \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi}))(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) \\ &= \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}}) - \varepsilon D(\nabla \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi}))\mathbf{n},\end{aligned}\quad (2.183)$$

com $\boldsymbol{\xi} \in (\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}})$ e foi empregada a igualdade $(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) = -\varepsilon\mathbf{n} \forall \mathbf{y} \in \partial\mathcal{I}_\varepsilon$. Finalmente, introduzindo o resultado anterior em (2.182) e levando em conta (2.145)₂, a expansão assintótica para o gradiente térmico no interior da perturbação pode ser escrita em termos da solução no domínio não perturbado avaliado no ponto $\hat{\mathbf{y}}$ como

$$\nabla u_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})|_i = \frac{2}{1+\gamma} \nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}}) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (2.184)$$

Assim, considerando esse resultado no salto do fluxo normal do tensor de Eshelby no contorno da inclusão \mathcal{I}_ε , eq.(2.180), e empregando o teorema da localização, pode-se resolver intrinsecamente a integral sobre $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ que aparece na eq.(2.166), o que resulta em

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) &= 4k_\mu \frac{1-\gamma}{(1+\gamma)^2} (\nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}}) \otimes \nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}})) \cdot \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} [\mathbf{I} - (1-\gamma)(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n})] dS + o(\varepsilon) \\ &= 4k_\mu \frac{1-\gamma}{(1+\gamma)^2} (\nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}}) \otimes \nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}})) \cdot [2\pi\varepsilon\mathbf{I} - \pi\varepsilon(1-\gamma)\mathbf{I}] + o(\varepsilon) \\ &= 4\pi\varepsilon k_\mu \frac{1-\gamma}{1+\gamma} (\nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}}) \otimes \nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}})) \cdot \mathbf{I} + o(\varepsilon).\end{aligned}\quad (2.185)$$

Substituindo a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε em (1.4) pode-se identificar a função $f(\varepsilon)$ da mesma forma que em (2.170). De fato,

$$f(\varepsilon) = \pi\varepsilon^2 \quad \Rightarrow \quad f'(\varepsilon) = 2\pi\varepsilon. \quad (2.186)$$

Finalmente, tomando o limite $\varepsilon \rightarrow 0$, a derivada topológica resulta em uma função escalar que depende apenas da solução u_μ associada ao domínio original Ω_μ (não perturbado), ou seja,

$$D_T\psi(\hat{\mathbf{y}}) = 2k_\mu \frac{1-\gamma}{1+\gamma} |\nabla u_\mu(\hat{\mathbf{y}})|^2 \quad \forall \hat{\mathbf{y}} \in \Omega_\mu. \quad (2.187)$$

Observação 17. *Como era esperado, a expressão final da derivada topológica para modelos constitutivos multi-escala (2.187) coincide com o resultado clássico associado ao problema de Poisson, Novotny et al. (2003) [92], Amstutz (2006) [5] e Rocha de faria et al. (2007) [31]. No entanto, será mostrado mais adiante que através da eq.(2.187) é possível identificar um tensor de segunda ordem que representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando é introduzida uma pequena inclusão circular no EVR.*

Como mencionado no início deste trabalho, a derivada topológica fornece a sensibilidade do problema ao introduzir uma perturbação não suave no domínio de análise quando $\varepsilon \rightarrow 0$. Visando, portanto, corroborar numericamente o resultado (2.187) obtido

analiticamente, define-se a função $d_T\psi_\varepsilon$ como

$$d_T\psi_\varepsilon := \frac{\psi(\varepsilon) - \psi(0)}{f(\varepsilon)} \Rightarrow \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} d_T\psi_\varepsilon = D_T\psi. \quad (2.188)$$

Se para um dado EVR calcularam-se as funções $\psi(0)$ e $\psi(\varepsilon)$ para uma seqüência de perturbações circulares de raios ε decrescentes, a utilização da fórmula (2.188)₁ proporcionará uma aproximação assintótica para o valor analítico da derivada topológica (2.187). Os valores da função ψ são computados numericamente empregando o método dos elementos finitos para a resolução do problema de condução estacionária de calor, no contexto da modelagem constitutiva multi-escala, mostrada na Seção 2.1.8.1. O EVR utilizado para o desenvolvimento desta verificação numérica está caracterizado por uma micro-célula quadrada de dimensões unitárias, com uma inclusão circular de raio 0.1 centrada no ponto de coordenadas cartesianas (0.35, 0.75), com a origem do sistema de coordenadas posicionado no canto inferior esquerdo, ver Fig.2.12(a). O material da matriz é caracterizado pelo coeficiente de condutividade térmica $k_m = 2$ e o material da inclusão por $k_i = \gamma k_m$. O estudo é feito introduzindo uma perturbação circular de material $\gamma k_\mu(\hat{\mathbf{y}})$, para dois valores do parâmetro γ diferentes, centrada no ponto de coordenadas cartesianas $\hat{\mathbf{y}} = (0.5, 0.5)$ e de raio ε variável dado por

$$\varepsilon \in \{0.005, 0.010, 0.020, 0.040, 0.080, 0.160\}. \quad (2.189)$$

A discretização do domínio de análise é feita utilizando elementos triangulares isoparamétricos quadráticos. A malha de elementos finitos foi gerada tal que:

- Contorno exterior: 20 elementos em cada linha.
- Inclusão (centrada em (0.35, 0.75)): 30 elementos no contorno.
- Perturbações (centradas em (0.5, 0.5)): 60 elementos em cada contorno.

Gerando um total de 13353 nós e 6636 elementos, como mostrado na Fig.2.12(b).

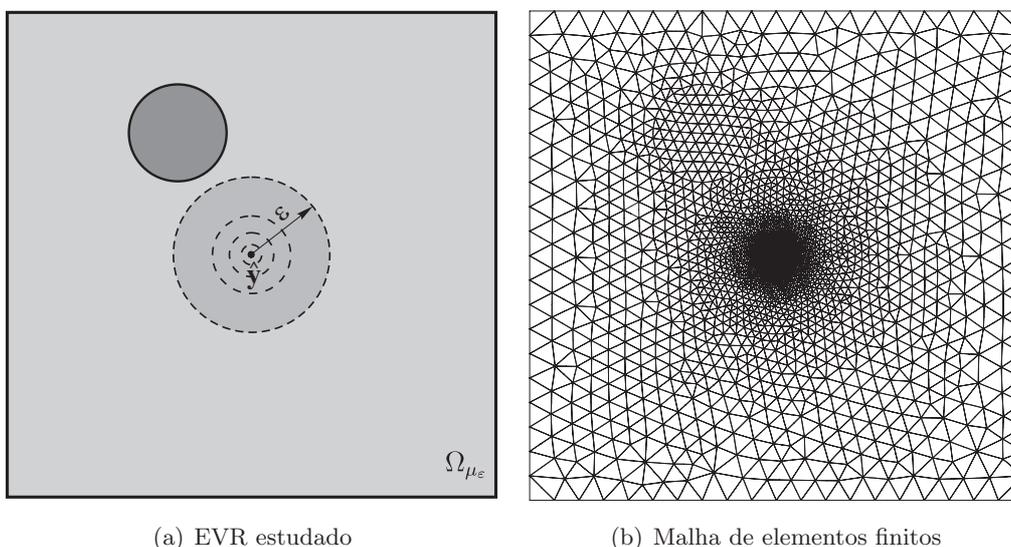


Figura 2.12: EVR de análise e malha para o estudo.

Segundo o conceito de modelagem constitutiva multi-escala, o EVR mostrado anteriormente representa a microestrutura do ponto material \boldsymbol{x} da macro-escala. Assim, para o desenvolvimento do estudo foi admitido que o mencionado ponto tem associado o seguinte gradiente de temperatura macroscópico,

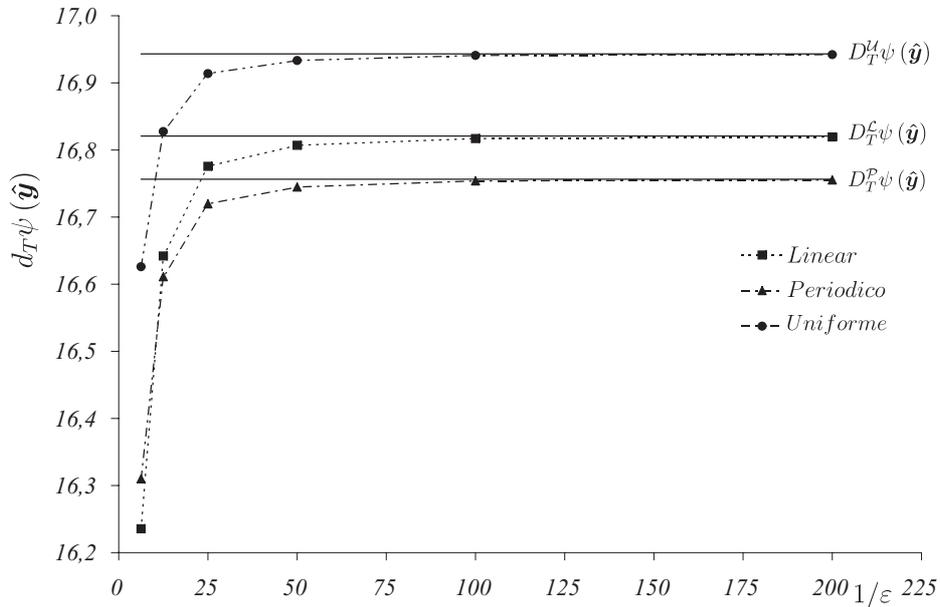
$$\nabla u(\boldsymbol{x}) = \{1, 2\}^T. \quad (2.190)$$

Na verificação numérica apresentada nas figuras seguintes, foram estudados os três modelos constitutivos multi-escala clássicos apresentados na seção 2.1.6, para diferentes valores do parâmetro γ , quais sejam:

- (a) Modelo de temperatura linear no contorno do EVR- \mathcal{L} .
- (b) Modelo de flutuação de temperatura periódica no contorno do EVR- \mathcal{P} .
- (c) Modelo da mínima restrição térmica ou fluxo uniforme no contorno do EVR- \mathcal{M} .

O modelo de Taylor (ou da regra da mistura) apresentado na Seção 2.1.6.1 possui solução trivial, não sendo, portanto, considerado na análise.

Na Fig.2.13 é mostrada a comparação entre os resultados obtidos para os diferentes modelos constitutivos multi-escala (exceto o modelo de Taylor) para cada valor do parâmetro γ estudado. Observa-se ainda que, para todos os modelos estudados, os valores calculados computacionalmente da função $d_T\psi_\varepsilon$ convergem para o resultado analítico da derivada topológica $D_T\psi$, o que corrobora o resultado (2.187).



(a) $\gamma = 0.1$

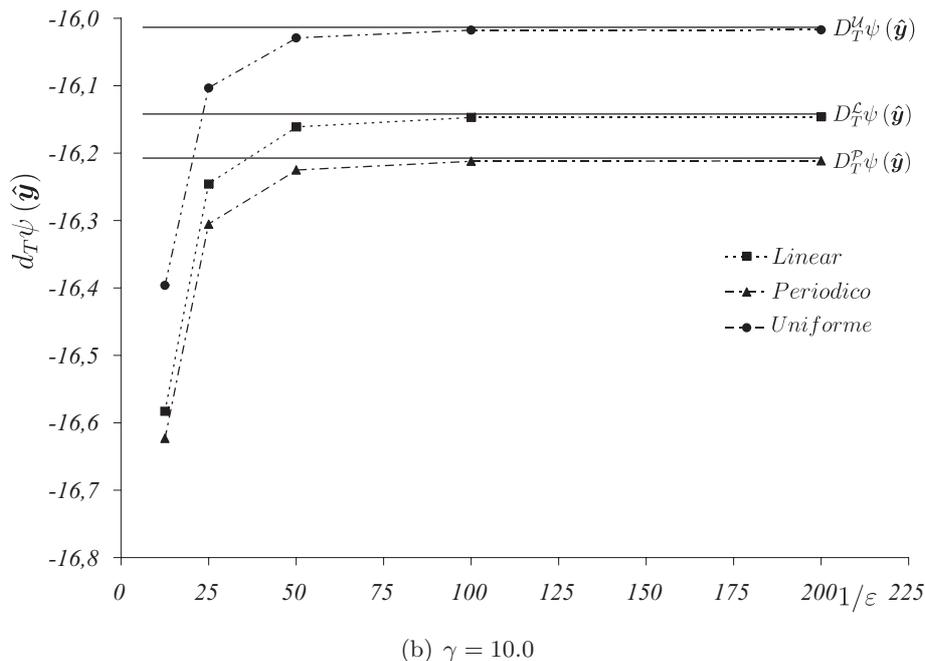


Figura 2.13: verificação de convergência da derivada topológica numérica.

Observação 18. Da Fig.2.13 observa-se claramente que cada um dos modelos constitutivos multi-escala estudados apresenta uma assíntota $D_T\psi$ própria, associada ao valor do parâmetro γ adotado.

2.2.2 Interpretação dos resultados

Esta seção é dedicada a mostrar o procedimento de análise que permite obter, a partir da forma escalar da derivada topológica calculada na seção anterior, a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico. Lembrando mais uma vez que a mencionada expansão constitui uns dos principais resultados deste trabalho.

Levando em conta o resultado da análise assintótica topológica mostrado anteriormente, eq. (2.187), a expansão (2.141) pode ser escrita explicitamente como

$$\mathbf{q}^\varepsilon \cdot \nabla u = \mathbf{q} \cdot \nabla u + 2v(\varepsilon)k_\mu \frac{1-\gamma}{1+\gamma} |\nabla u_\mu|^2 + o(v(\varepsilon)), \quad (2.191)$$

onde $v(\varepsilon) := \pi\varepsilon^2/V_\mu$ é a fração de volume da perturbação \mathcal{I}_ε .

Utilizando os mesmos argumentos apresentados na Seção 2.1.7, ou seja, a partir das eqs.(2.94) e (2.95), o gradiente térmico microscópico ∇u_μ pode ser escrito como uma combinação linear das componentes do gradiente da temperatura macroscópica da seguinte forma,

$$\nabla u_\mu = (\nabla u)_i (\mathbf{e}_i + \nabla \tilde{u}_{\mu_i}) = (\nabla u)_i \nabla u_{\mu_i} \quad \Rightarrow \quad \nabla u_{\mu_i} := \mathbf{e}_i + \nabla \tilde{u}_{\mu_i}, \quad (2.192)$$

lembrando que as funções \tilde{u}_{μ_i} são as soluções do conjunto de problemas variacionais (2.96). Sendo assim, a derivada topológica $D_T\psi$ pode ser reescrita como segue,

$$D_T\psi = \mathbf{D}_{T\mu} \nabla u \cdot \nabla u, \quad (2.193)$$

onde $\mathbf{D}_{T\mu}$ é um tensor de segunda ordem simétrico, cujas componentes são dadas por,

$$\mathbf{D}_{T\mu} = 2k_\mu \frac{1-\gamma}{1+\gamma} (\nabla u_{\mu_i} \cdot \nabla u_{\mu_j}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (2.194)$$

No entanto, levando em conta a relação constitutiva linear para o fluxo térmico macroscópico, tem-se que

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla u \quad \text{e} \quad \mathbf{q}^\varepsilon = -\mathbf{K}_\varepsilon \nabla u, \quad (2.195)$$

onde \mathbf{K} e \mathbf{K}_ε são os tensores constitutivos homogeneizados respectivamente associados aos domínios Ω_μ e $\Omega_{\mu\varepsilon}$. Substituindo a expressão da derivada topológica (2.193) em (2.191) e rearranjando os termos, tem-se que a expansão assintótica topológica do tensor constitutivo macroscópico é dada por

$$\mathbf{K}_\varepsilon = \mathbf{K} - v(\varepsilon)\mathbf{D}_{T\mu} + o(v(\varepsilon)). \quad (2.196)$$

Observação 19. *A derivada topológica $D_T\psi$, dada por um campo escalar definido no EVR não perturbado, depende do gradiente da temperatura macroscópica através da função $u_\mu = u + \nabla u \cdot \mathbf{y} + \tilde{u}_\mu$, sendo \tilde{u}_μ solução do problema variacional (2.47). Por outro lado, do resultado (2.196) observa-se que o conceito da derivada topológica no contexto de modelagem constitutiva multi-escala resulta em um campo tensorial $\mathbf{D}_{T\mu}$, da mesma ordem que o operador constitutivo macroscópico, que representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico, cujas componentes são dadas pelo gradiente das soluções do conjunto de equações variacionais (2.96) associadas ao domínio original não perturbado. Além do mais, referidos problemas variacionais não dependem do gradiente de temperatura macroscópico.*

Observação 20. *Da expressão final do tensor derivada topológica, eq.(2.194), é possível analisar os casos limites do parâmetro γ : (i) o primeiro caso é quando a inclusão torna-se um isolante térmico ideal ($\gamma \rightarrow 0$), e (ii) no outro limite ($\gamma \rightarrow \infty$) a inclusão resulta num condutor térmico ideal. As expressões da derivada topológica para os casos mencionados anteriormente são:*

- *Isolante térmico ideal ($\gamma \rightarrow 0$):*

$$\mathbf{D}_{T\mu} = 2k_\mu (\nabla u_{\mu_i} \cdot \nabla u_{\mu_j}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \quad (2.197)$$

- *Condutor térmico ideal ($\gamma \rightarrow \infty$):*

$$\mathbf{D}_{T\mu} = -2k_\mu (\nabla u_{\mu_i} \cdot \nabla u_{\mu_j}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (2.198)$$

Em resumo, a expressão (2.197) fornece a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando no EVR é introduzido um furo⁴; e a expressão (2.198) representa a sensibilidade topológica à nucleação de um condutor térmico ideal no domínio do EVR .

⁴O furo introduzido no domínio é considerado um isolante térmico ideal, desde que não sejam considerados os efeitos de transferência de calor através da sua fronteira.

Do desenvolvimento apresentado anteriormente, em particular da eq.(2.196), conclui-se que o tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ contém todas as informações *a priori* necessárias para perturbar o domínio original do EVR, representado por Ω_μ , de maneira a obter uma variação desejada no tensor constitutivo homogeneizado \mathbf{K}_ε .

2.2.3 Resultados numéricos

Segundo mencionado no início, um dos objetivos secundários deste trabalho é desenvolver uma metodologia aplicável no projeto e/ou otimização de microestruturas, baseada na informação fornecida pela derivada topológica. Portanto, nesta seção são mostrados alguns exemplos ilustrativos para demonstrar a potencialidade das ferramentas apresentadas neste capítulo no projeto e/ou otimização microestrutural. Cada um dos seguintes exemplos foi construído visando mostrar as características e/ou propriedades do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$. Nos exemplos 1 a 3 é realizado um estudo qualitativo das propriedades das componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para distintos EVR. Nos exemplos 4 e 5 é apresentado um procedimento para tornar isotrópica uma microestrutura que inicialmente possui uma resposta constitutiva anisotrópica. Nos exemplos 6 e 7, mostra-se uma técnica de análise que fornece as bases para um procedimento geral para o projeto de microestruturas especializadas. Assim, a estrutura dos exemplos é a seguinte: (i) obter o tensor constitutivo homogeneizado \mathbf{K} e o tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$, (ii) perturbar o EVR (baseando-se na informação fornecida pelo tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$) e (iii) obter o tensor constitutivo homogeneizado perturbado \mathbf{K}_ε . Cabe mencionar que o tensor constitutivo macroscópico é calculado empregando a metodologia proposta por Giusti *et al.* (2007) [44] e descrita em detalhe na Seção 2.1.7.

2.2.3.1 Exemplo 1

O EVR utilizado neste primeiro exemplo está caracterizado por uma micro célula quadrada de área unitária, com um poro circular de raio 0.15 centrado no ponto (0.5, 0.5), ver Fig.2.14. O material da matriz é caracterizado pelo coeficiente de condutividade térmica $k = 2.0$. A discretização por elementos finitos utilizada na análise numérica está constituída por uma malha uniforme de 21246 elementos triangulares lineares gerando um total de 10870 nós.

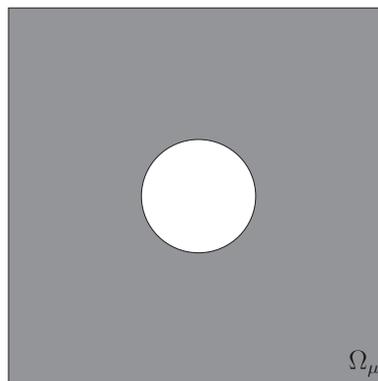


Figura 2.14: exemplo 1 - EVR utilizado no estudo.

Os tensores constitutivos homogeneizados \mathbf{K} associados ao EVR ora descrito, para cada modelo multi-escala, são os seguintes:

$$\mathbf{K}^T = \begin{bmatrix} 1.859 & 0 \\ 0 & 1.859 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.738 & 0 \\ 0 & 1.738 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.736 & 0 \\ 0 & 1.736 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.734 & 0 \\ 0 & 1.734 \end{bmatrix}.$$

Neste exemplo propõe-se estudar a sensibilidade da micro célula à introdução de uma inclusão circular cuja propriedade de condutividade térmica é definida através do parâmetro $\gamma = 0.1$ (menos condutor – Caso A) e $\gamma = 10.0$ (mais condutor – Caso B). Assim sendo, na Fig.2.15(Caso A) e 2.16(Caso B) são mostradas as componentes do tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$ para os modelos constitutivos multi-escala:

- Modelo de temperatura linear no contorno do EVR;
- Modelo de flutuação de temperatura periódica no contorno do EVR;
- Modelo da mínima restrição térmica.

No caso do modelo de Taylor (ou da regra da mistura), como as componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ são constantes, não são aqui apresentadas.

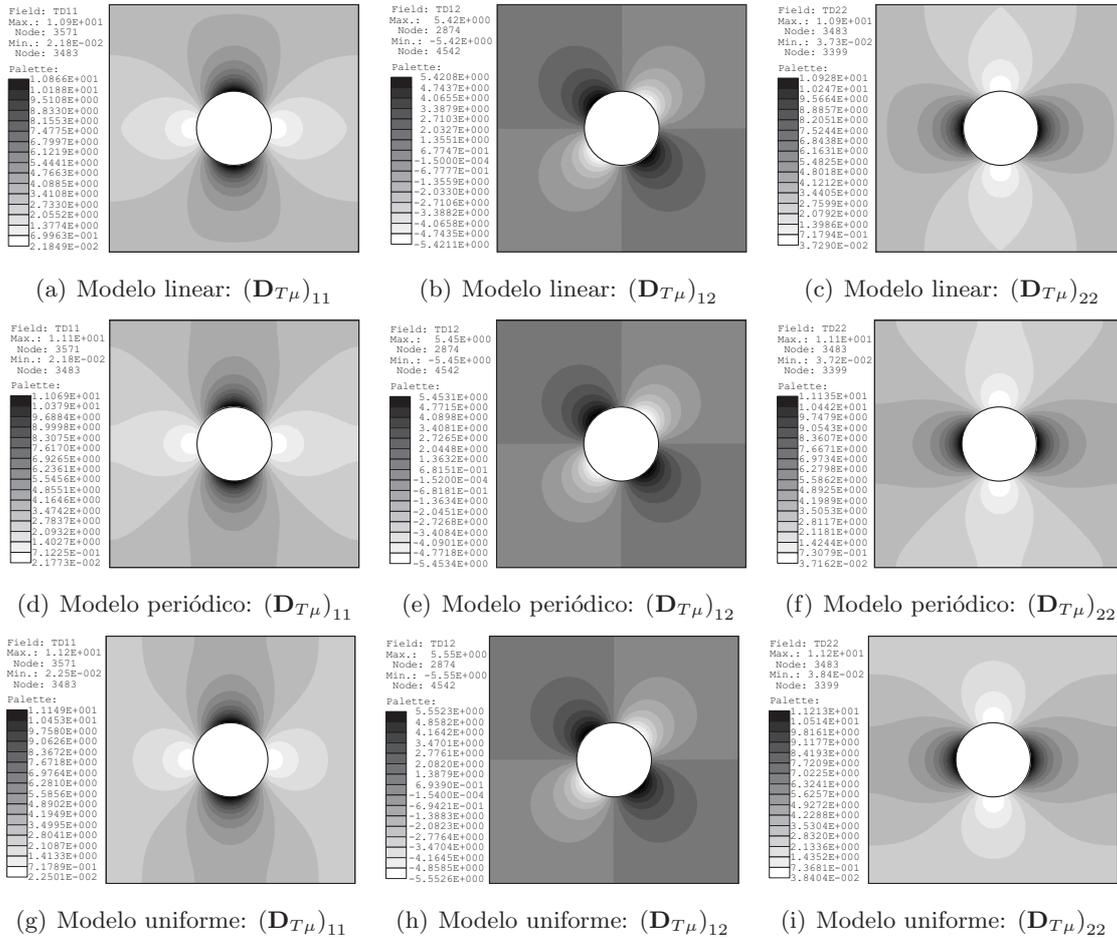
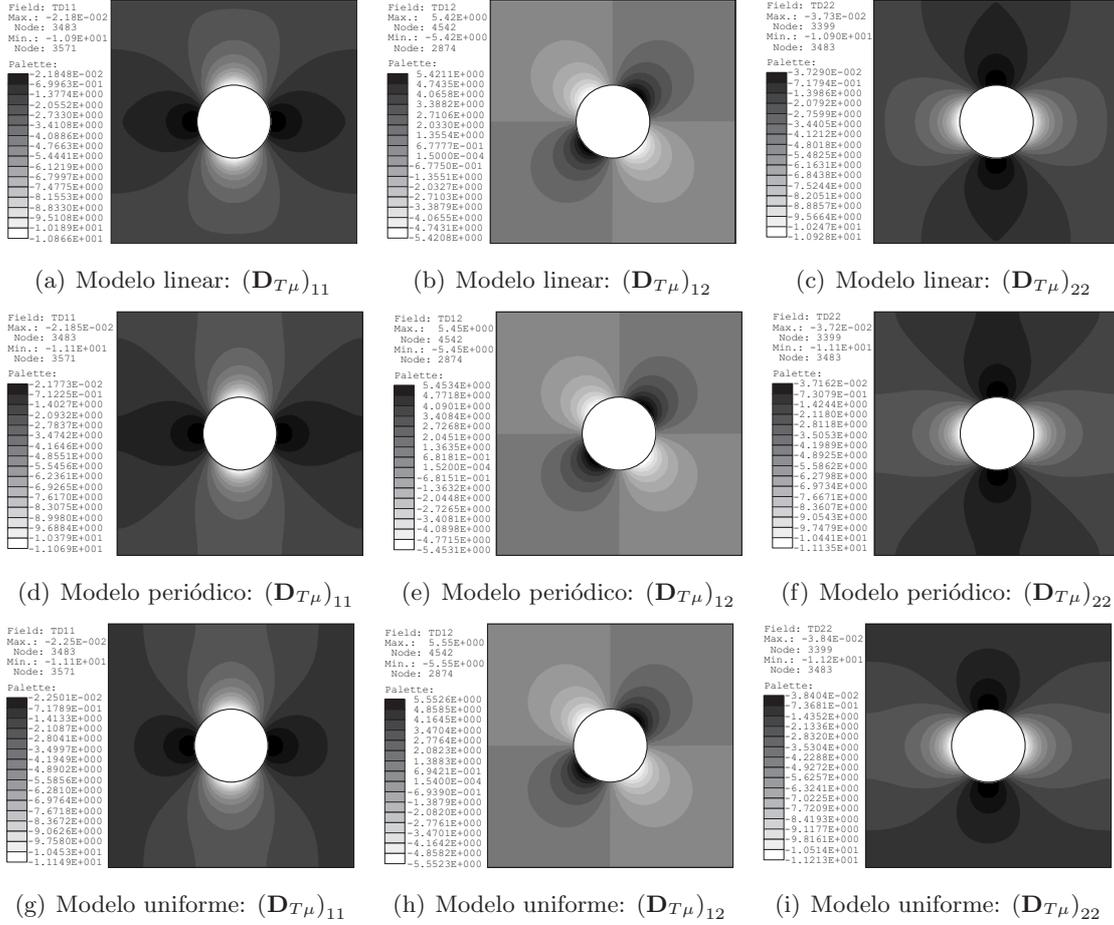


Figura 2.15: exemplo 1 - caso A: componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma = 0.1$.


 Figura 2.16: exemplo 1 - caso B: componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma = 10.0$.

Note-se que no Caso A ou Caso B, embora o valor numérico dos campos mostrados para cada modelo multi-escala sejam diferentes, qualitativamente não se observa uma diferença apreciável da sensibilidade topológica entre os diferentes modelos. Assim, nas Fig.2.15 e Fig.2.16 é possível inferir que a direção onde as componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ são mais sensíveis coincide com: (i) as direções dos vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 , que definem a base do sistema de coordenadas globais no EVR, no caso das componentes $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$ e $(\mathbf{D}_{T\mu})_{22}$; e (ii) uma inclinação aproximada de 45° em relação aos vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 , no caso da componente $(\mathbf{D}_{T\mu})_{12}$. No entanto, existe uma diferença conceitual importante entre a análise do Caso A e do Caso B, que será discutida posteriormente.

Empregando as informações fornecidas pelo tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$, o EVR será perturbado com a introdução de inclusões circulares de raio 0.045 e material γk da seguinte maneira: da expressão (2.196) tem-se que uma estimativa de primeira ordem da resposta constitutiva macroscópica associada ao domínio perturbado, pode ser escrita como

$$\mathbf{K}_\varepsilon \approx \mathbf{K} - v(\varepsilon)\mathbf{D}_{T\mu}, \quad (2.199)$$

e considerando, por exemplo, a componente $(\mathbf{K})_{11}$, observa-se que para produzir uma diminuição significativa do valor dessa componente temos que procurar os pontos onde o campo $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$ atinge o maior valor positivo. Portanto, o campo mencionado anteriormente fornece um indicador de onde as perturbações devem ser introduzidas. No caso das

outras componentes a análise é totalmente análoga. Neste ponto é conveniente retomar a discussão levantada no final do parágrafo anterior com respeito à diferença na análise dos Casos A e B. Essa diferença decorre do fato de que o valor do parâmetro γ define se o material da perturbação é mais ou menos condutor que o material da matriz. Ou seja, para valores de $\gamma < 1$ a perturbação em forma de disco circular é menos condutora que o material da matriz e, no caso contrário, para $\gamma > 1$ o material da inclusão tem uma condutividade térmica maior que a matriz. Portanto, tomando novamente o caso da componente $(\mathbf{K})_{11}$, tem-se que para produzir uma diminuição significativa do valor dessa componente, introduzindo uma inclusão de material com $\gamma < 1$, o procedimento é como mencionado anteriormente. Por outro lado, no caso $\gamma > 1$, não é possível produzir uma diminuição no valor da componente, pois o campo $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$ é negativo no domínio. Assim, nesse caso, uma inclusão com $\gamma > 1$ só pode produzir um incremento no valor da componente analisada.

Nas Fig.2.17 até Fig.2.20 são mostradas as diferentes posições das perturbações colocadas e do lado das mencionadas figuras, estão indicadas as respostas constitutivas homogeneizadas, obtidas para cada modelo constitutivo multi-escala.

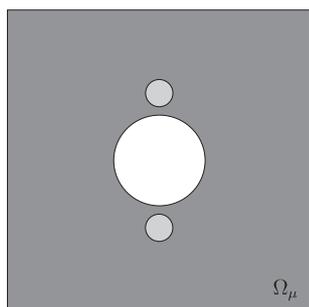


Figura 2.17: exemplo 1 - EVR perturbado

Caso A: $\gamma = 0.10$	Caso B: $\gamma = 10.0$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.659 & 0 \\ 0 & 1.726 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.810 & 0 \\ 0 & 1.749 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.656 & 0 \\ 0 & 1.725 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.810 & 0 \\ 0 & 1.747 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.654 & 0 \\ 0 & 1.722 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.809 & 0 \\ 0 & 1.746 \end{bmatrix}$
Caso A: $\gamma = 0.10$	Caso B: $\gamma = 10.0$

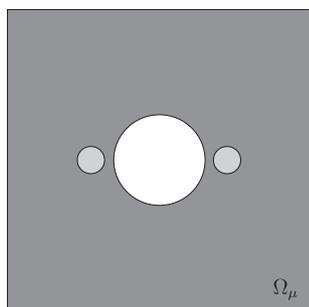


Figura 2.18: exemplo 1 - EVR perturbado

$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.726 & 0 \\ 0 & 1.659 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.749 & 0 \\ 0 & 1.810 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.725 & 0 \\ 0 & 1.656 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.747 & 0 \\ 0 & 1.810 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.723 & 0 \\ 0 & 1.654 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.746 & 0 \\ 0 & 1.809 \end{bmatrix}$

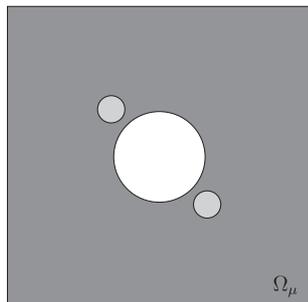


Figura 2.19: exemplo 1 - EVR perturbado

Caso A: $\gamma = 0.10$	Caso B: $\gamma = 10.0$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.693 & 0.032 \\ 0.032 & 1.693 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.779 & -0.03 \\ -0.03 & 1.779 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.691 & 0.032 \\ 0.032 & 1.691 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.778 & -0.03 \\ -0.03 & 1.778 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.689 & 0.033 \\ 0.033 & 1.689 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.777 & -0.03 \\ -0.03 & 1.777 \end{bmatrix}$

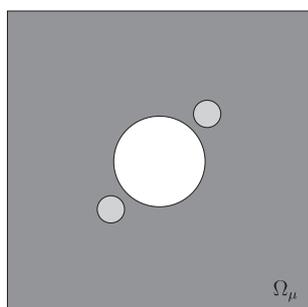


Figura 2.20: exemplo 1 - EVR perturbado

Caso A: $\gamma = 0.10$	Caso B: $\gamma = 10.0$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.693 & -0.03 \\ -0.03 & 1.693 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 1.779 & 0.030 \\ 0.030 & 1.779 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.691 & -0.03 \\ -0.03 & 1.691 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 1.778 & 0.030 \\ 0.030 & 1.778 \end{bmatrix}$
$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.689 & -0.03 \\ -0.03 & 1.689 \end{bmatrix}$	$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 1.777 & 0.031 \\ 0.031 & 1.777 \end{bmatrix}$

Levando em conta o valor da componente $(\mathbf{K}_\varepsilon)_{11}$, note-se que introduzindo perturbações segundo a direção \mathbf{e}_2 (Fig.2.17), tem-se, para o modelo de temperatura linear no contorno, uma variação aproximada do 4,54% (Caso A) e 3,98% (Caso B) com relação ao valor inicial da mesma componente, sendo que as outras componentes apresentam uma variação do 0,69% (Caso A) e 0,63% (Caso B) com relação ao seu valor original. No caso dos outros modelos multi-escala e das outras posições das perturbações, os resultados encontrados são análogos aos apresentados anteriormente. A análise prévia permite concluir que introduzindo perturbações no EVR, utilizando como indicador da posição o campo \mathbf{D}_{T_μ} , tem-se efetivamente uma variação significativa da componente estudada e as outras componentes apresentam uma variação de uma ordem de magnitude menor. Finalmente, cabe mencionar que os resultados da análise computacional mostrados acima corroboram a discussão apresentada no início do exemplo.

2.2.3.2 Exemplo 2

Neste exemplo será estudado o tensor \mathbf{D}_{T_μ} para os casos limites do parâmetro γ mostrados nas eqs.(2.197) e (2.198). Assim, o EVR utilizado na análise é dado por um domínio quadrado de dimensões unitárias com material caracterizado pelo coeficiente de condutividade térmica $k = 1.0$, no qual estão inseridos oito poros de raio variável distribuídos aleatoriamente no domínio, veja Fig.2.21. A discretização por elementos finitos utilizada na análise numérica está constituída por uma malha uniforme de 20410 elementos triangulares lineares gerando um total de 10561 nós.

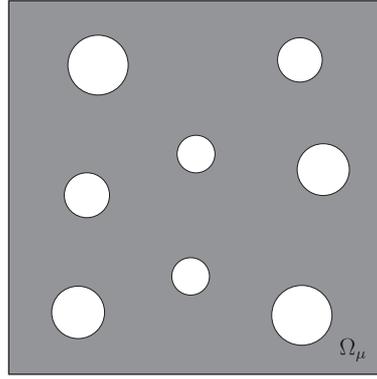


Figura 2.21: exemplo 2 - geometria do EVR de análise.

Utilizando o mesmo procedimento que no exemplo anterior, os tensores constitutivos homogeneizados \mathbf{K} para cada modelo multi-escala são os seguintes:

$$\mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 0.803 & 0 \\ 0 & 0.808 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 0.800 & 0 \\ 0 & 0.807 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 0.799 & 0 \\ 0 & 0.805 \end{bmatrix}.$$

Nas Figs.2.22 ($\gamma \rightarrow 0$) e 2.23 ($\gamma \rightarrow \infty$) são apresentados as componentes do tensor de sensibilidade topológico $\mathbf{D}_{T\mu}$ para cada modelo constitutivo multi-escala,

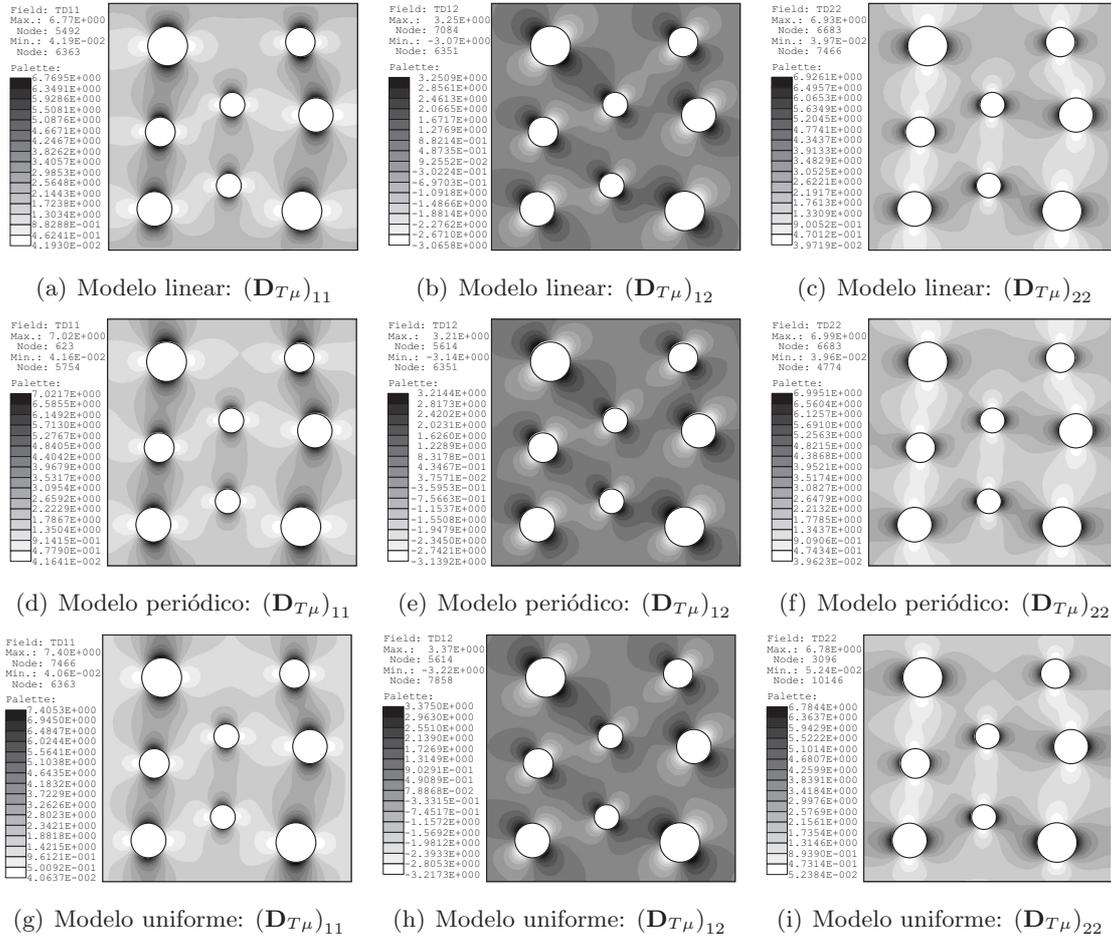
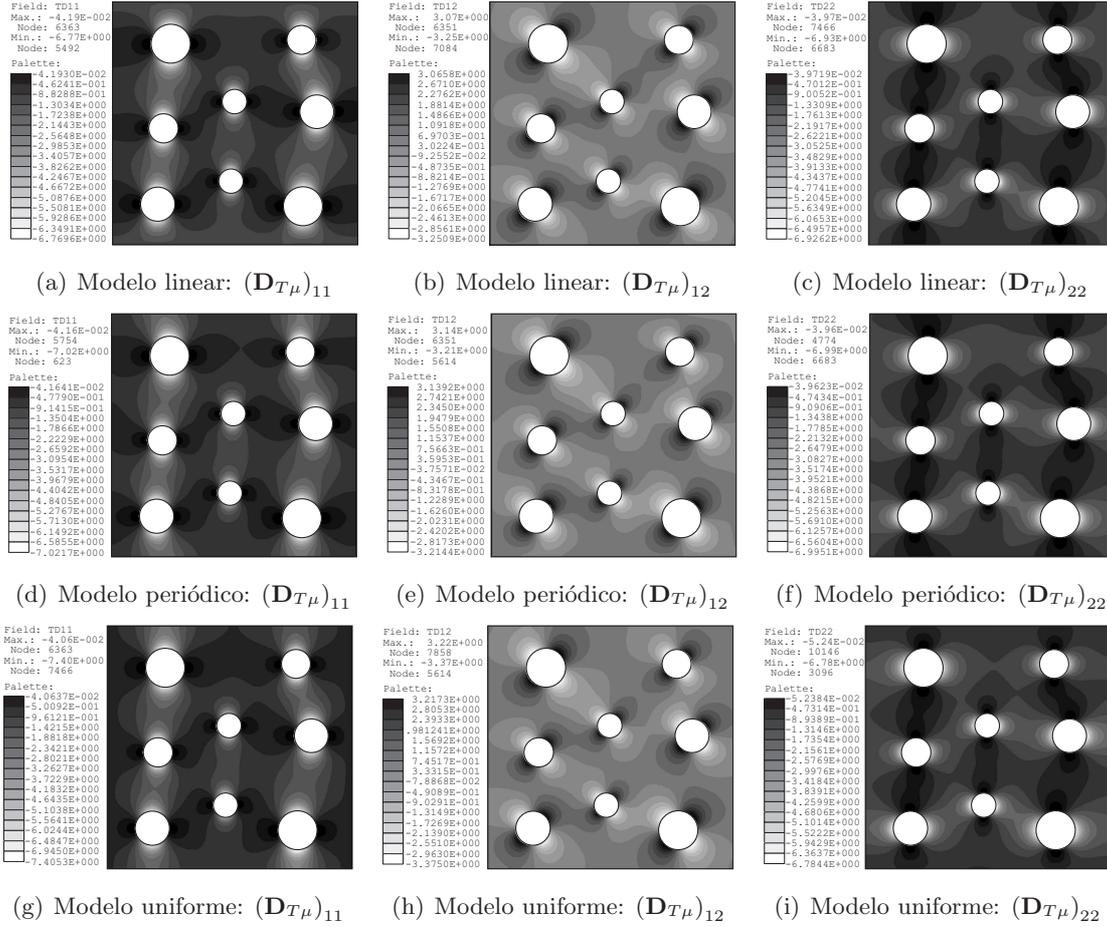


Figura 2.22: exemplo 2 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow 0$.


 Figura 2.23: exemplo 2 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow \infty$.

Empregando o mesmo procedimento de análise mostrado no exemplo anterior, é estudado o comportamento da componente $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$, e sua consequência na componente $(\mathbf{K})_{11}$ da resposta constitutiva macroscópica, para as duas situações limites do parâmetro γ apresentadas ao início, uma vez que os resultados obtidos da análise para essa componente são trivialmente estendidos para as outras. Segundo o mostrado nas Fig.2.22 e Fig.2.23, qualitativamente não existe uma diferença apreciável nos resultados obtidos para os diferentes modelos constitutivos multi-escala. Então, na análise seguinte será utilizado como referência o modelo de temperatura linear no contorno. Portanto, tomando o caso $\gamma \rightarrow 0$ (Fig.2.22) é possível perceber que o campo de sensibilidade topológica mostra uma tendência a coalescer os poros, criando canais de isolamento térmico alinhados na direção \mathbf{e}_2 (regiões mais escuras), produzindo uma queda da condutividade térmica na direção \mathbf{e}_1 (Fig.2.24(b)). No entanto, no caso $\gamma \rightarrow \infty$ (Fig.2.23) a tendência mostrada pelo campo de sensibilidade topológica é de unir os poros, na direção \mathbf{e}_2 , através de um condutor térmico ideal – regiões mais claras – a fim de aumentar o valor de $(\mathbf{K})_{11}$ (Fig.2.24(c)). Pelo contrário, as cores escuras na Fig.2.23(a) indicam regiões de baixa sensibilidade à introdução de um condutor térmico ideal em forma de disco. Uma análise similar pode ser feita com respeito às regiões de cor clara da Fig.2.22(a) quanto à introdução de furos.

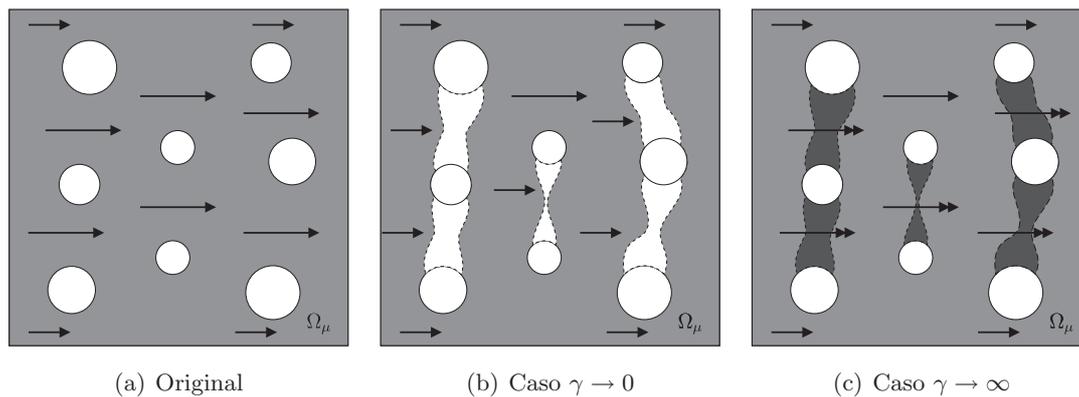


Figura 2.24: exemplo 2 - tendência do campo $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$.

Finalmente é importante destacar que, embora as regiões de maior sensibilidade para os casos $\gamma \rightarrow 0$ e $\gamma \rightarrow \infty$ sejam as mesmas, pois a diferença entre as eqs.(2.197) e (2.198) é uma troca do sinal, o conceito físico para a análise da sensibilidade topológica é muito diferente em cada caso, o que justifica plenamente a apresentação das duas situações limites para o valor de γ .

2.2.3.3 Exemplo 3

A micro-célula usada no desenvolvimento deste exemplo é caracterizada através de um domínio quadrado de área unitária na qual estão inseridas 31 inclusões de raio $r = 0.05$, distribuídas aleatoriamente no EVR, como mostrado na Fig.2.25. A matriz está constituída por um material de condutividade térmica $k_m = 1.00$ e o material que caracteriza as inclusões possui uma condutividade térmica de $k_i = 0.50$. Na análise numérica foi utilizada uma discretização por elementos finitos composta por uma malha uniforme de 23104 elementos triangulares lineares tal que a quantidade total de nós gerados foi de 11753.

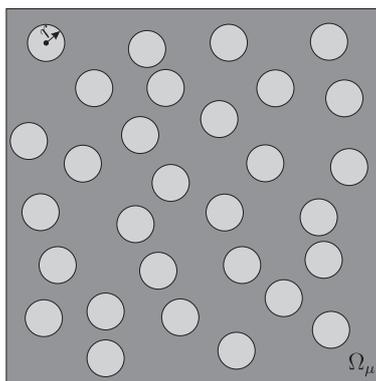


Figura 2.25: exemplo 3 - geometria do EVR de análise.

O EVR descrito anteriormente gera, para cada modelo multi-escala, a seguinte resposta constitutiva macroscópica:

$$\mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 0.8909 & 0 \\ 0 & 0.8929 \end{bmatrix}, \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 0.8906 & 0 \\ 0 & 0.8926 \end{bmatrix}, \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 0.8902 & 0 \\ 0 & 0.8922 \end{bmatrix}.$$

Neste exemplo propõe-se estudar a sensibilidade da micro-célula para os casos limites do parâmetro γ mostrados na Observação 20. Embora este exemplo seja similar ao anterior, a idéia principal aqui é mostrar como as presenças das inclusões de material k_i afetam o campo de sensibilidade topológica da micro-célula e sua posterior resposta constitutiva macroscópica, para as situações antes mencionadas. Assim sendo, nas Figs.2.26 ($\gamma \rightarrow 0$) e 2.27 ($\gamma \rightarrow \infty$) são mostradas as componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para cada modelo constitutivo multi-escala. No caso do modelo de Taylor (ou da regra da mistura) as componentes do tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$ são constantes, por isso não são aqui apresentadas.

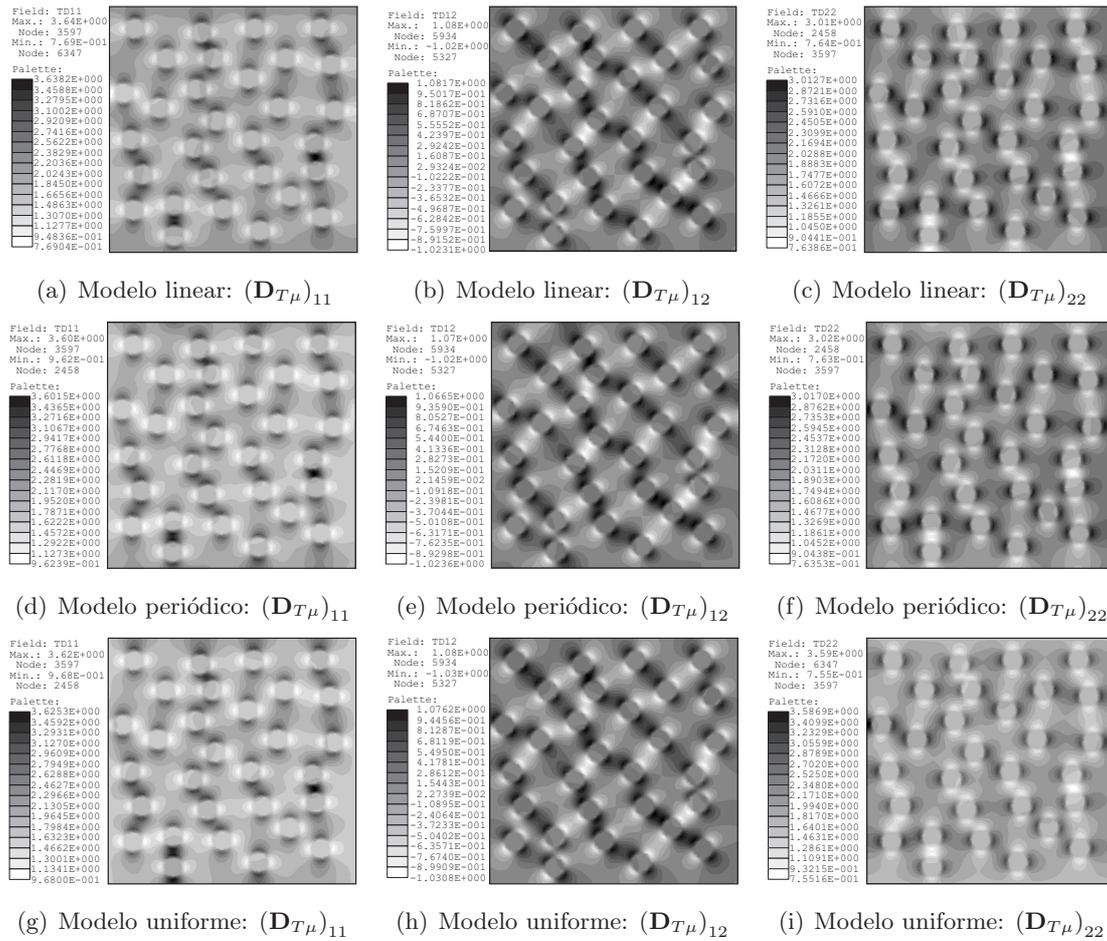


Figura 2.26: exemplo 3 - componentes do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow 0$.

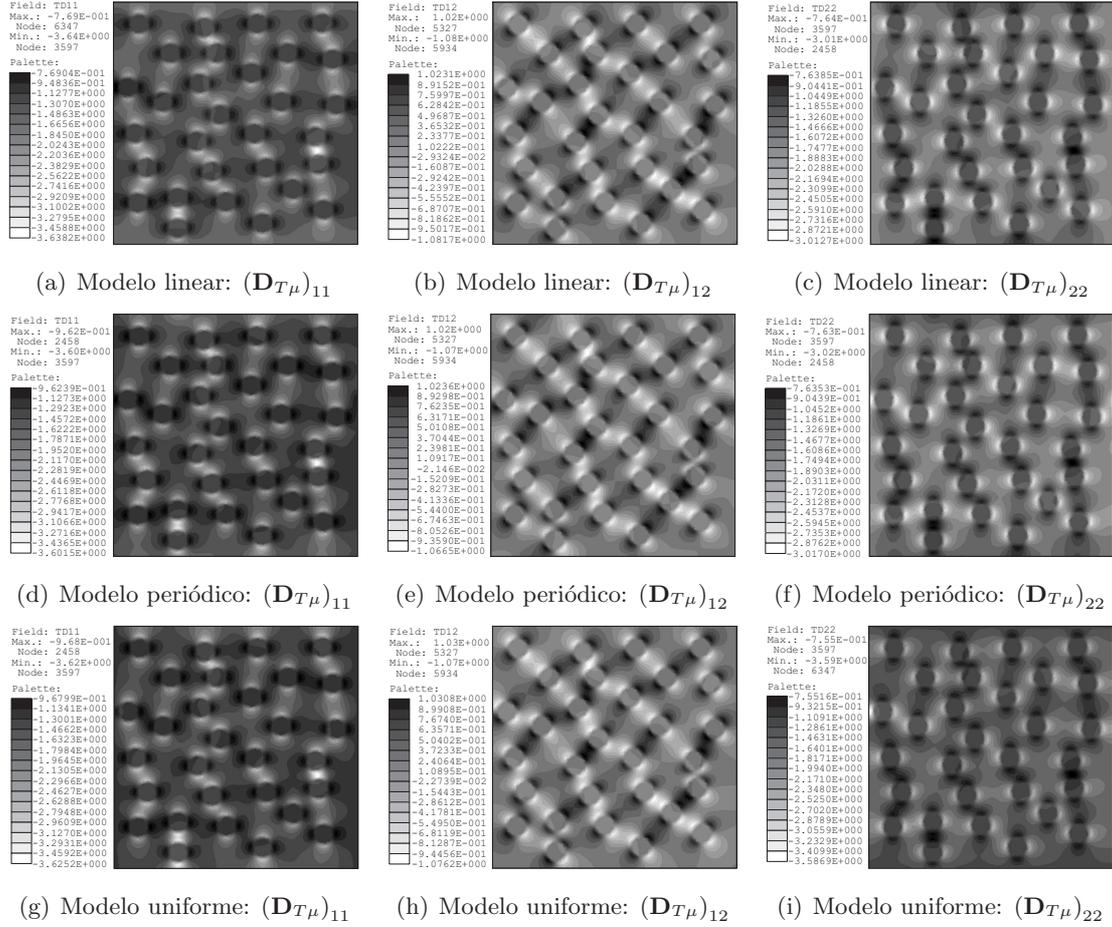
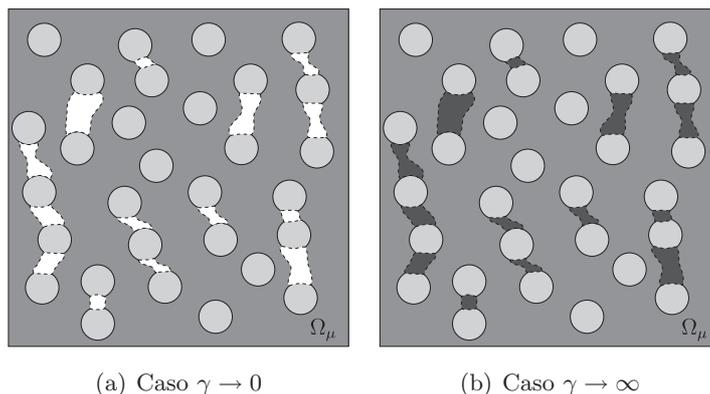


Figura 2.27: exemplo 3 - componentes do tensor $D_{T\mu}$ para $\gamma \rightarrow \infty$.

Analisando o caso $\gamma \rightarrow 0$ (Fig.2.26) é razoável inferir que o campo de sensibilidade topológica apresenta uma tendência à nucleação de furos no espaço entre duas inclusões alinhadas numa direção preferencial (regiões de cor escura). Tomando, por exemplo, a direção do vetor \mathbf{e}_2 e introduzindo furos segundo o discutido anteriormente, obter-se-ia uma queda da condutividade térmica associada à direção \mathbf{e}_1 . A análise para as outras direções é totalmente análoga à apresentada antes. No caso $\gamma \rightarrow \infty$ (Fig.2.27) a análise é semelhante ao caso da nucleação de furos, uma vez que as regiões claras mostram a tendência à introdução de um condutor ideal no lugar entre inclusões alinhadas numa direção preferencial. Novamente, tomando a direção do vetor \mathbf{e}_2 como exemplo e nucleando condutores térmicos ideais segundo o discutido anteriormente, obter-se-ia um incremento da condutividade térmica associada à direção \mathbf{e}_1 . Finalmente, na Fig.2.28 é mostrada esquematicamente a tendência apresentada pelo campo de sensibilidade topológica do tensor $D_{T\mu}$ discutida anteriormente.


 Figura 2.28: exemplo 3 - tendência da componente $(\mathbf{D}_{T\mu})_{11}$.

2.2.3.4 Exemplo 4

Seja um EVR quadrado de dimensões unitárias com dois poros circulares de raio $r = 0.05$, com centro nas coordenadas $(1/2, 1/3)$ e $(1/2, 2/3)$, veja Fig.2.29, e coeficiente de condutividade térmica $k = 20.0$. A discretização por elementos finitos utilizada na análise numérica possui uma malha uniforme com 22686 elementos triangulares isoparamétricos quadráticos gerando um total de 45833 nós.

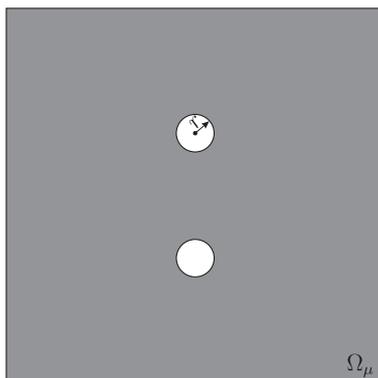


Figura 2.29: exemplo 4 - geometria do EVR de análise.

Da descrição da micro-célula mostrada anteriormente, tem-se que os tensores constitutivos homogeneizados \mathbf{K} associados a cada modelo multi-escala são os seguintes:

$$\mathbf{K}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 19.3681 & 0 \\ 0 & 19.3966 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 19.3656 & 0 \\ 0 & 19.3964 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 19.3654 & 0 \\ 0 & 19.3941 \end{bmatrix}.$$

Segundo mencionado no início da Seção 2.2.3, o intuito deste exemplo é mostrar um procedimento de análise que permite tornar isotrópica uma resposta constitutiva inicialmente anisotrópica, introduzindo perturbações circulares. Em particular, neste exemplo a resposta constitutiva inicial do EVR é ortotrópica e como perturbações serão empregados furos circulares.

Uma resposta constitutiva, no contexto do problema abordado neste capítulo, pode ser chamada de isotrópica quando os autovalores do tensor de condutividade térmica são iguais. Esta caracterização através dos autovalores será muito importante na análise desen-

volvida neste trabalho. Assim sendo, os autovalores λ_ε do tensor de condutividade térmica macroscópica \mathbf{K}_ε , associados ao domínio perturbado, são obtidos da seguinte expressão

$$\lambda_{\varepsilon_{1,2}} = \frac{1}{2} \left(\text{tr} \mathbf{K}_\varepsilon \pm \sqrt{2 \mathbf{K}_\varepsilon^D \cdot \mathbf{K}_\varepsilon^D} \right), \quad (2.200)$$

onde \mathbf{K}_ε^D é a parte desviadora do tensor \mathbf{K}_ε , dada por

$$\mathbf{K}_\varepsilon^D = \mathbf{K}_\varepsilon - \frac{1}{2} (\text{tr} \mathbf{K}_\varepsilon) \mathbf{I}. \quad (2.201)$$

Note-se da eq.(2.200) que a diferença entre os autovalores λ_{ε_1} e λ_{ε_2} será mínima quando o produto $(\mathbf{K}_\varepsilon^D \cdot \mathbf{K}_\varepsilon^D)$ seja mínimo. Visando, portanto, procurar os pontos $\mathbf{y} \in \Omega_\mu$ onde introduzir as perturbações que minimizam a distância entre λ_{ε_1} e λ_{ε_2} , define-se a função escalar $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ como

$$\chi_\varepsilon(\mathbf{y}) := \mathbf{K}_\varepsilon^D \cdot \mathbf{K}_\varepsilon^D \quad \Rightarrow \quad (\lambda_{\varepsilon_1} - \lambda_{\varepsilon_2})^2 \xrightarrow{\chi_\varepsilon(\mathbf{y}) \rightarrow 0} 0. \quad (2.202)$$

A dependência de $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ com o parâmetro ε decorre do fato da presença da função $v(\varepsilon)$ na estimativa da resposta constitutiva macroscópica associada ao domínio perturbado \mathbf{K}_ε , ou seja, para calcular a função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ é necessário fornecer a fração de volume perturbado com a qual se deseja minimizar a distância entre os autovalores λ_{ε_1} e λ_{ε_2} . No desenvolvimento do exemplo, o tensor \mathbf{K}_ε será calculado empregando a estimativa de primeira ordem na fração de volume apresentada na eq.(2.199).

Baseado no discutido anteriormente, o procedimento de análise é o seguinte: empregando as informações fornecidas pelo tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$, o EVR será perturbado com a introdução de furos circulares onde a função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ atinja seu valor mínimo. Assim sendo, neste exemplo serão exploradas as 3 situações de configurações de perturbações seguintes:

- Caso A: 4 furos de raio 0.01 $\Rightarrow v(\varepsilon) = 4\pi(0.01)^2 \approx 0.001256$;
- Caso B: 2 furos de raio $0.05/\sqrt{2}$ $\Rightarrow v(\varepsilon) = 2\pi(0.05/\sqrt{2})^2 \approx 0.007854$;
- Caso C: 2 furos de raio 0.05 $\Rightarrow v(\varepsilon) = 2\pi(0.05)^2 \approx 0.015708$.

Na Fig.2.30 são mostradas as microestruturas perturbadas, segundo o procedimento antes mencionado, sendo possível observar as posições dos furos para cada modelo constitutivo multi-escala. Em seguida, a Tabela 2.3 mostra a resposta constitutiva macroscópica associada a cada microestrutura apresentada na Fig.2.30.

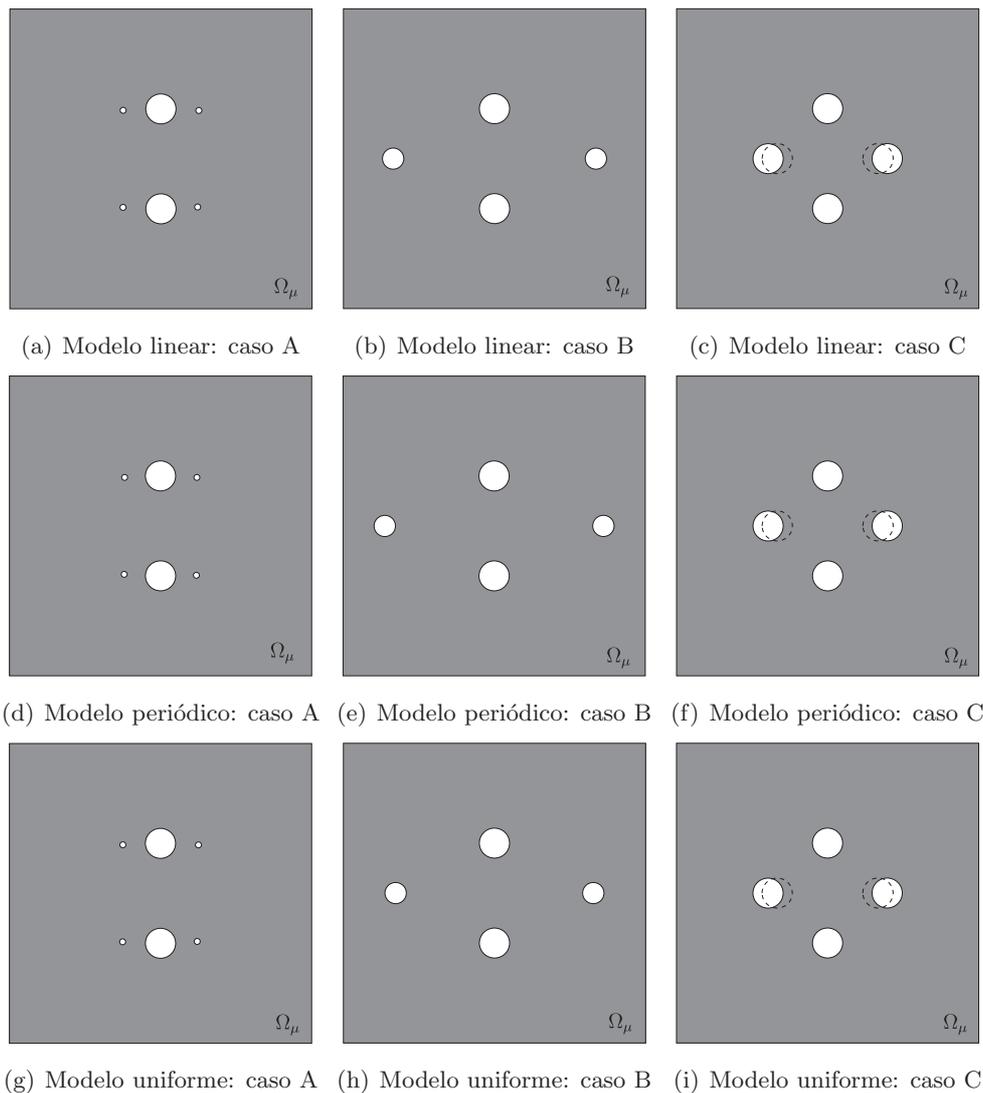


Figura 2.30: exemplo 4 - configuração das perturbações.

$$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 19.3332 & 0 \\ 0 & 19.3337 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 19.3316 & 0 \\ 0 & 19.3320 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 19.3303 & 0 \\ 0 & 19.3308 \end{bmatrix}$$

(a) Caso A.

$$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 19.0843 & 0 \\ 0 & 19.0823 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 19.0835 & 0 \\ 0 & 19.0737 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 19.0763 & 0 \\ 0 & 19.0736 \end{bmatrix}$$

(b) Caso B.

$$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 18.7963 & 0 \\ 0 & 18.7737 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 18.7930 & 0 \\ 0 & 18.7685 \end{bmatrix} \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 18.7882 & 0 \\ 0 & 18.7653 \end{bmatrix}$$

(c) Caso C.

Tabela 2.3: exemplo 4 - resposta constitutiva macroscópica.

Levando em consideração a diferença inicial entre os autovalores do tensor \mathbf{K} , tem-se, dos resultados mostrados na Tabela 2.3, para o Caso A uma queda de duas ordens de grandeza desse valor, já no Caso B a diferença dos autovalores desce somente uma ordem, e finalmente no Caso C essa diferença preserva a ordem de grandeza, mas houve uma

diminuição no seu valor.

Dos resultados mostrados anteriormente, observa-se que quanto menor o tamanho da perturbação introduzida, menor a distância entre os autovalores do tensor de condutividade térmica macroscópica associado ao domínio do EVR perturbado \mathbf{K}_ε . Acredita-se que esse comportamento decorre de dois fatos: (i) a análise de sensibilidade topológica é desenvolvida para perturbações infinitesimais, mas na prática é necessário introduzir perturbações finitas, portanto, é possível que a estimativa de primeira ordem – na fração de volume – fornecida pelo tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ não seja totalmente adequada para tamanhos de perturbações (furos) importantes; e (ii) o cálculo da resposta constitutiva macroscópica é realizado através da solução de um sistema de equações variacionais levando em conta a topologia completa do problema, portanto, quanto maior o tamanho das perturbações (furos) introduzidas, maior a interação entre elas, afetando de forma mais significativa a resposta macroscópica final. Em particular, nas figuras associadas ao Caso C (Figs.2.30(c), 2.30(f) e 2.30(i)) é mostrada em linha tracejada o que poderia ser considerado, para este caso em particular, como a posição ótima das perturbações de raio 0.05, mostrando que a estimativa de primeira ordem fornecida pela derivada topológica é suficiente para determinar com certo nível de precisão onde devem ser introduzidos os furos. Neste sentido, e retomando a discussão iniciada no parágrafo anterior, nota-se que a maior distância entre os autovalores associados ao tensor \mathbf{K}_ε corresponde ao Caso C, cujo comportamento foi anteriormente analisado, mas aqui se deseja reforçar que a resposta constitutiva homogeneizada é muito sensível à posição das perturbações.

Finalmente, observa-se ainda que, os resultados obtidos não apresentam uma diferença apreciável entre os diferentes modelos constitutivos multi-escala. Sendo assim, na Fig.2.31 são apresentadas as isofoixas da função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ associadas ao modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno do EVR, para os três casos estudados. Percebe-se claramente a posição onde devem ser colocados os furos, o que mostra a qualidade da informação obtida com o procedimento apresentado neste exemplo.

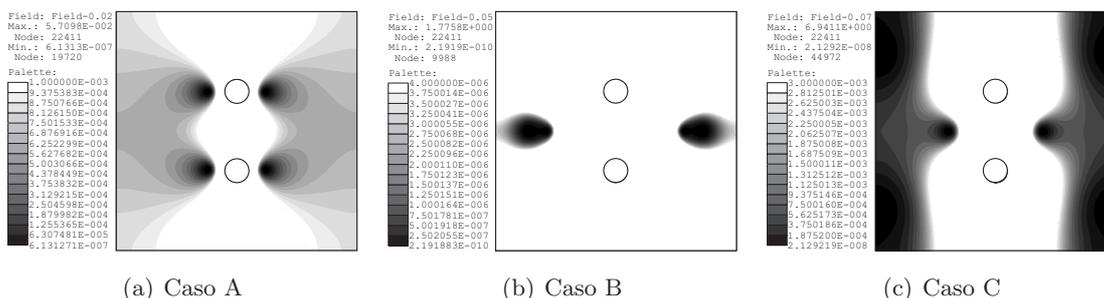


Figura 2.31: exemplo 4 - função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ para o modelo de flutuação periódica.

2.2.3.5 Exemplo 5

Como uma extensão dos conceitos introduzidos no exemplo anterior, agora será estudada uma micro-estrutura com resposta constitutiva anisotrópica e serão simulados os três primeiros passos de um processo de otimização, cujo objetivo é tornar isotrópica essa resposta constitutiva. O EVR estudado está caracterizado por um quadrado unitário

com três poros de raio $r = 0.05$, com centro nas coordenadas $(11/20, 1/5)$; $(3/4, 3/5)$ e $(9/20, 17/20)$ (considerando que a origem do sistema de coordenadas cartesianas está posicionada no canto inferior esquerdo do EVR), como mostrado na Fig.2.32, e o material da matriz possui um coeficiente de condutividade térmica $k = 20.0$. Para a solução computacional foi empregada uma discretização uniforme por elementos finitos com 22533 elementos triangulares isoparamétricos quadráticos com um total de 45557 nós.

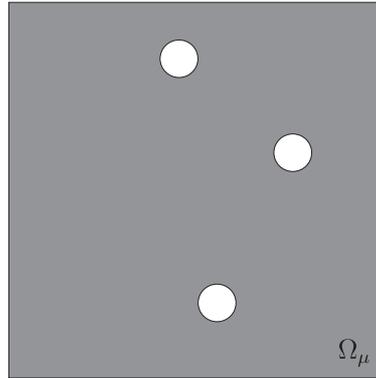


Figura 2.32: exemplo 5 - geometria do EVR de análise.

Segundo mostrado nos exemplos anteriores, os resultados obtidos para cada modelo constitutivo multi-escala não apresentam uma variação apreciável, portanto, neste exemplo somente será estudado o modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno. Contudo, o tensor constitutivo homogeneizado e os autovalores associados à micro-célula descrita anteriormente, são

$$\mathbf{K}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 19.0638 & 8.3 \times 10^{-4} \\ 8.3 \times 10^{-4} & 19.0938 \end{bmatrix}, \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \lambda_1 &= 19.06382702 \\ \lambda_2 &= 19.09382512 \end{aligned}$$

Empregando os conceitos relativos à definição da função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ estabelecida no exemplo anterior, eq.(2.202), serão simulados três passos de um processo de otimização, onde cada passo tem as seguintes etapas: (i) calcular a função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ associada ao EVR da iteração; (ii) perturbar o domínio do EVR introduzindo furos nos pontos onde a função $\chi_\varepsilon(\mathbf{y})$ atinja os mínimos valores. Adicionalmente, a fração de volume a ser retirada em cada passo será constante no valor de $v(\varepsilon) = \pi(0.02)^2 \approx 0.001256$, obtendo-se no final da simulação do processo iterativo um volume sólido de $|\Omega_{\mu\varepsilon}^m| = 0.99623$. Além do mais, serão exploradas três situações para a configuração da quantidade de material a ser retirado em cada iteração:

- Caso A: 1 furo de raio 0.02;
- Caso B: 2 furos de raio $0.02/\sqrt{2} \approx 0.014142$;
- Caso C: 4 furos de raio 0.01.

Nas figuras seguintes são mostrados os resultados obtidos em cada iteração para cada caso dos mencionados anteriormente.

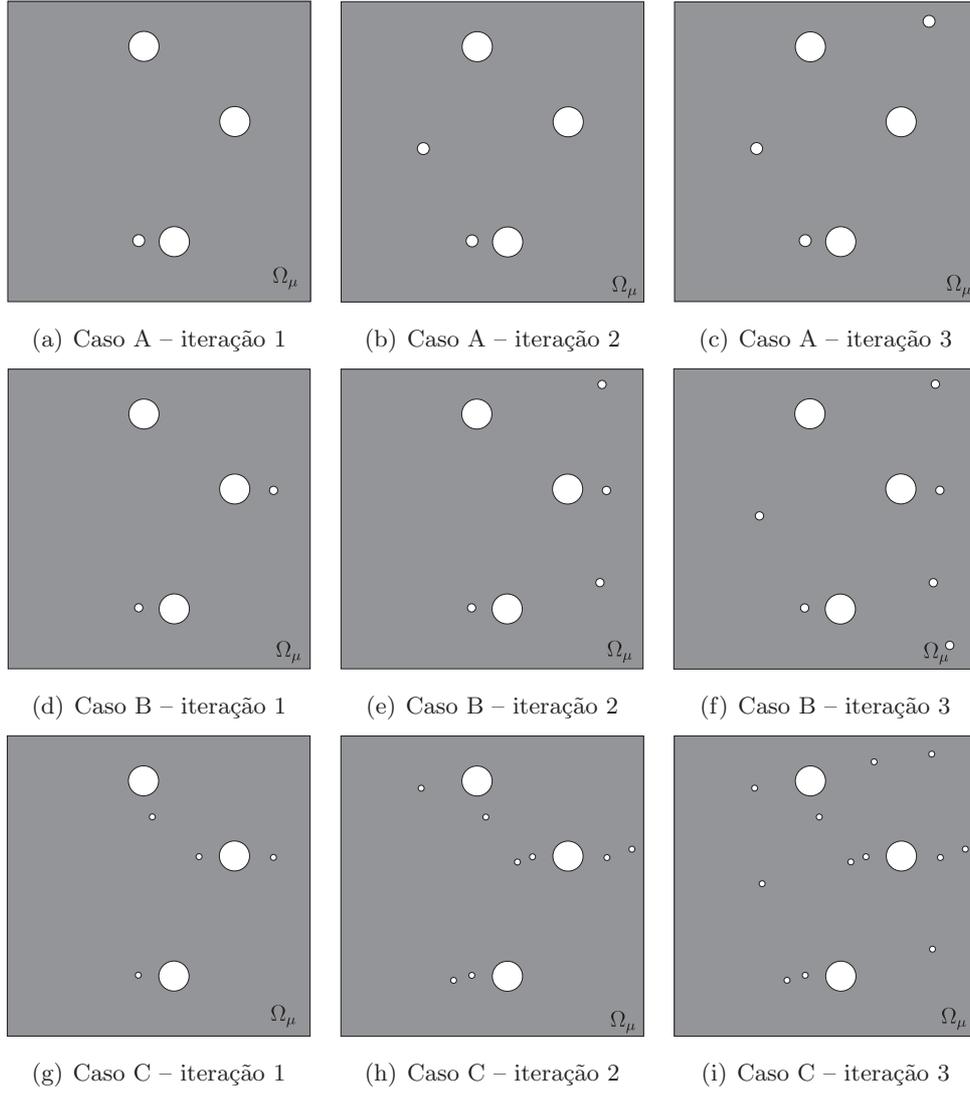


Figura 2.33: exemplo 5 - domínios topologicamente perturbado em cada iteração.

A resposta constitutiva macroscópica obtida ao final da simulação do processo iterativo é apresentada no que segue:

- Caso A:

$$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 18.934486 & -8.8 \times 10^{-6} \\ -8.8 \times 10^{-6} & 18.934500 \end{bmatrix}, \Rightarrow \begin{cases} \lambda_{\varepsilon_1} = 18.93448 \\ \lambda_{\varepsilon_2} = 18.93450 \end{cases}$$

- Caso B:

$$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 18.934700 & -2.6 \times 10^{-6} \\ -2.6 \times 10^{-6} & 18.934699 \end{bmatrix}, \Rightarrow \begin{cases} \lambda_{\varepsilon_1} = 18.934699 \\ \lambda_{\varepsilon_2} = 18.934705 \end{cases}$$

- Caso C:

$$\mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 18.934970 & 7.7 \times 10^{-6} \\ 7.7 \times 10^{-6} & 18.934930 \end{bmatrix}, \Rightarrow \begin{cases} \lambda_{\varepsilon_1} = 18.93492 \\ \lambda_{\varepsilon_2} = 18.93497 \end{cases}$$

Para avaliar o desempenho da metodologia proposta neste exemplo, defini-se a

função

$$\varkappa := \left| \frac{\lambda_{\varepsilon_1} - \lambda_{\varepsilon_2}}{\max_{i \in \{1,2\}} \lambda_{\varepsilon_i}} \right|, \quad (2.203)$$

como uma medida de distância relativa, através dos autovalores, entre a resposta constitutiva atual do EVR e a resposta desejada (isotrópica para este exemplo). Assim sendo, da definição estabelecida acima, segue que a função \varkappa possui a seguinte propriedade

$$\varkappa \rightarrow 0, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{K}_\varepsilon^{\mathcal{P}} \rightarrow k_\varepsilon^{\mathcal{P}} \mathbf{I}. \quad (2.204)$$

A avaliação da função \varkappa para cada caso estudado ao longo do processo de otimização é apresentada na Fig.2.34. Note que, aqui e no exemplo anterior, o objetivo está focado no tipo de resposta macroscópica obtida do EVR e não no valor numérico que caracteriza essa resposta, ou seja, procura-se uma microestrutura que possua uma resposta constitutiva final do tipo $k_\varepsilon^{\mathcal{P}} \mathbf{I}$, sem ser muito relevante, por enquanto, o valor de condutividade térmica $k_\varepsilon^{\mathcal{P}}$. Entretanto, dos resultados anteriores ressalta-se que o valor da condutividade térmica global é menor que a inicial, esse comportamento (estudado em detalhe nos exemplos 1 e 2, veja Seções 2.2.3.1 e 2.2.3.2) decorre do fato de ter empregado furos como perturbações. Para produzir o efeito contrário, ou seja, para obter uma condutividade térmica macroscópica maior que a inicial, poder-se-ia utilizar como perturbação inclusões com condutividade térmica maior que a da matriz.

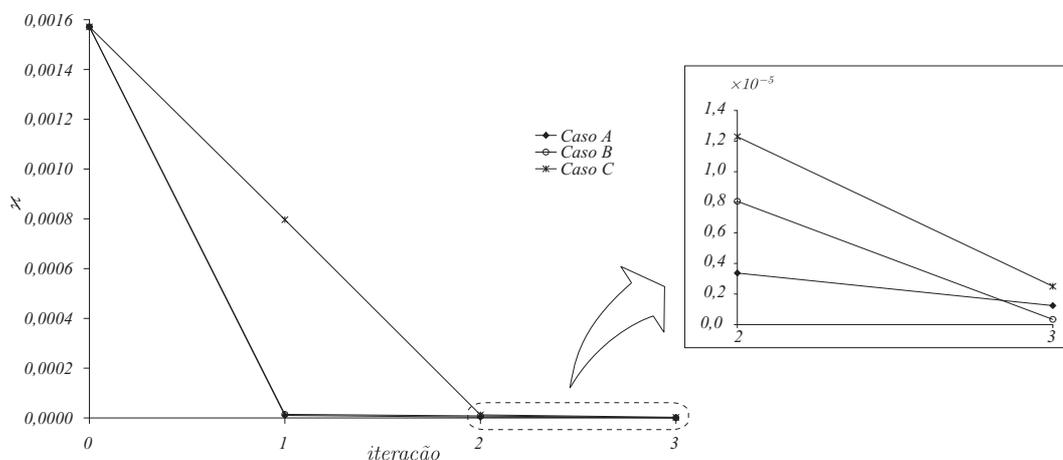


Figura 2.34: exemplo 5 - evolução da função \varkappa na simulação.

Finalmente, observa-se que, embora a quantidade de furos introduzidos no processo iterativo seja diferente para cada caso, as respostas constitutivas finais, obtidas da simulação do processo de otimização, são similares. Portanto, a quantidade e o tamanho dos furos a serem introduzidos em cada passo do processo de otimização deve ser considerada uma variável de projeto, ou seja, tem-se liberdade para escolher o tamanho e quantidade de perturbações, mas a técnica aqui apresentada fornece as posições onde elas **devem** ser colocadas no EVR.

2.2.3.6 Exemplo 6

Neste exemplo será apresentada uma metodologia de análise para ser utilizada no projeto e/ou otimização de microestruturas. Com esse objetivo e considerando uma resposta constitutiva macroscópica desejada, caracterizada através tensor de condutividade térmica \mathbf{K}^* , defini-se o funcional de forma $\psi(\varepsilon)$, associado ao domínio perturbado $\Omega_{\mu\varepsilon}$, como:

$$\psi(\varepsilon) := \|\mathbf{K}_\varepsilon - \mathbf{K}^*\|^2 \quad \Rightarrow \quad \psi(0) = \|\mathbf{K} - \mathbf{K}^*\|^2, \quad (2.205)$$

onde \mathbf{K} e \mathbf{K}_ε denotam, respectivamente, as respostas constitutivas homogeneizadas associadas aos domínios Ω_μ (não perturbado) e $\Omega_{\mu\varepsilon}$ (perturbado). Além do mais, assume-se que a norma euclidiana de um tensor é definida, através do produto escalar, como

$$\|\mathbf{A}\| := \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}, \quad (2.206)$$

sendo \mathbf{A} um tensor arbitrário de segunda ordem.

Considerando a expansão assintótica da resposta constitutiva macroscópica \mathbf{K}_ε apresentada na eq.(2.196), tem-se que a expansão assintótica topológica do funcional de forma $\psi(\varepsilon)$ pode ser escrita como

$$\|\mathbf{K}_\varepsilon - \mathbf{K}^*\|^2 = \|\mathbf{K} - \mathbf{K}^*\|^2 - 2v(\varepsilon)\mathbf{D}_{T\mu} \cdot (\mathbf{K} - \mathbf{K}^*) + o(v(\varepsilon)), \quad (2.207)$$

onde o campo escalar $2\mathbf{D}_{T\mu} \cdot (\mathbf{K} - \mathbf{K}^*)$ é reconhecido como a derivada topológica associada ao funcional ψ , ou seja,

$$D_{T\mu}\psi := 2\mathbf{D}_{T\mu} \cdot (\mathbf{K} - \mathbf{K}^*). \quad (2.208)$$

Observa-se da expressão anterior que, para obter uma resposta constitutiva \mathbf{K}^* a partir de uma resposta inicial \mathbf{K} , devem ser introduzidas perturbações singulares nos pontos onde o campo de sensibilidade topológica $D_{T\mu}\psi$ atinja seus valores máximos. Em resumo, dado inicialmente um tensor de condutividade térmica macroscópico desejado \mathbf{K}^* e uma micro-estrutura com resposta constitutiva homogeneizada \mathbf{K} , com domínio denotado por Ω_μ , o mencionado campo escalar $D_{T\mu}\psi$ mede a sensibilidade topológica à introdução de uma perturbação singular no domínio Ω_μ , que minimize (ou maximize) a diferença entre as resposta constitutivas \mathbf{K} e \mathbf{K}^* . Além do mais, observa-se que a derivada topológica $D_{T\mu}\psi$ nem sempre é positiva, pois seu sinal provém do tensor $\mathbf{D}_{T\mu}$ (através do valor do parâmetro γ) e da diferença entre \mathbf{K} e \mathbf{K}^* (atrelado à resposta constitutiva inicial do EVR).

Para exemplificar o discutido anteriormente, agora será estudado o caso particular de um EVR quadrado de dimensões unitárias com um volume de sólido de $|\Omega_\mu^m| \approx 0.9562$ e material caracterizado pelo coeficiente de condutividade térmica $k = 2.0$. Na simulação numérica são estudadas duas distribuições de vazios diferentes para o mesmo volume sólido:

- Caso A: um único poro centrado de raio $r \approx 0.118$ (Fig.2.35(a)) no domínio Ω_μ , discretizado com uma malha uniforme de elementos finitos triangulares isoparamétricos quadráticos com um total de 44478 nós e 22002 elementos.

- Caso B: 4 poros de raio $r \approx 0.059$ centrados nas coordenadas cartesianas $(1/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4)$; $(3/4, 1/4)$ e $(3/4, 3/4)$, considerando que a origem do sistema de coordenadas cartesianas está posicionada no canto inferior esquerdo do EVR (Fig.2.35(b)). Na discretização foi utilizada uma malha uniforme de elementos finitos triangulares isoparamétricos quadráticos com um total de 44693 nós e 22074 elementos.

Para as duas situações de análise mencionada anteriormente, a resposta constitutiva homogeneizada é isotrópica, cujos tensores de condutividade térmica são os seguintes:

$$\mathbf{K}_A = \begin{bmatrix} 1.8321 & 0.0 \\ 0.0 & 1.8321 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{K}_B = \begin{bmatrix} 1.8321 & 0.0 \\ 0.0 & 1.8321 \end{bmatrix}. \quad (2.209)$$

Como tensor de condutividade térmica objetivo, adota-se uma resposta constitutiva ortotrópica como a mostrada no exemplo 1 desta seção, para o modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno com $\gamma = 0.10$ (veja Fig.2.17) aqui repetida por conveniência:

$$\mathbf{K}^* = \begin{bmatrix} 1.656 & 0.0 \\ 0.0 & 1.725 \end{bmatrix}. \quad (2.210)$$

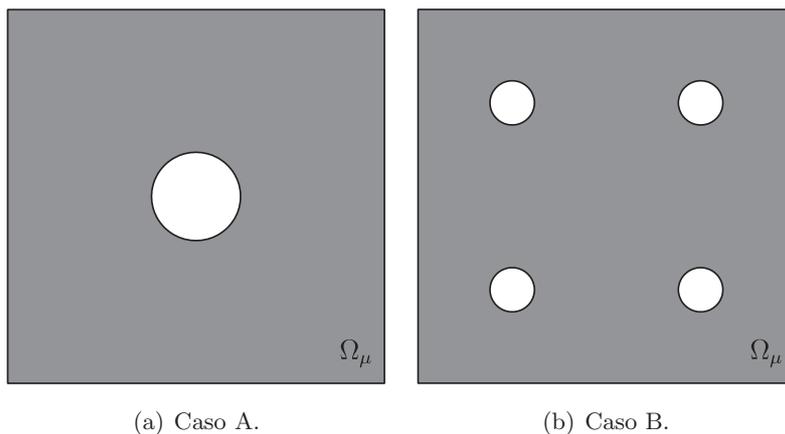


Figura 2.35: exemplo 6 - domínios de análise para os casos de estudo.

O procedimento de análise proposto neste exemplo pode ser resumido nas seguintes etapas: (i) dado um EVR, obter a resposta constitutiva homogeneizada \mathbf{K} ; (ii) cálculo do tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$, associado ao domínio Ω_μ do EVR; e (iii) construção do campo escalar $D_{T\mu}\psi$ com a expressão (2.208) e a resposta desejada \mathbf{K}^* ora apresentada. Pelas mesmas questões mencionadas no exemplo anterior, agora será estudado somente o modelo constitutivo multi-escala associado a flutuações periódicas de temperatura no contorno do EVR. Assim sendo, na Fig.2.36 são mostrados os campos de sensibilidade topológica $D_{T\mu}\psi$ para os Casos A e B, respectivamente.

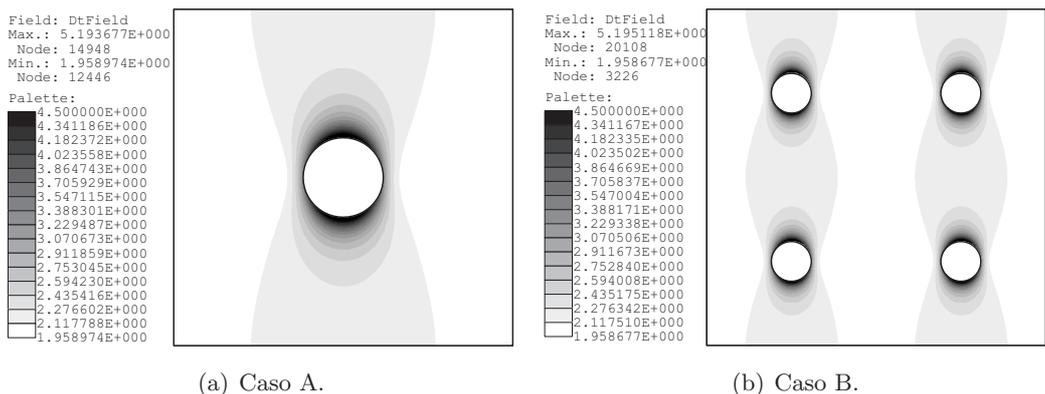


Figura 2.36: exemplo 6 - campo $D_{T_\mu}\psi$ para os casos de estudo.

Observa-se da figura anterior que, para cada caso estudado, os máximos do campo de sensibilidade topológica $D_{T_\mu}\psi$ ocorrem no contorno do poro preexistente. Indicando uma tendência a mudar de forma do furo circular para um furo elíptico, minimizando a diferença entre as resposta \mathbf{K} e \mathbf{K}^* . Essa tendência é mostrada na Fig.2.37.

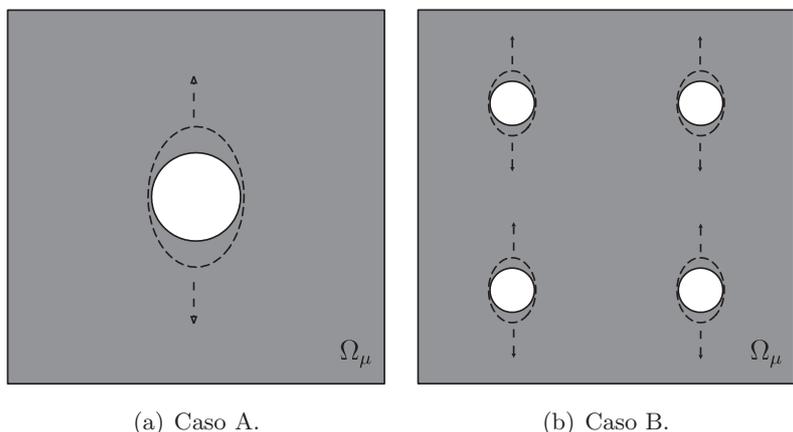


Figura 2.37: exemplo 6 - tendência mostrada pelo campo $D_{T_\mu}\psi$.

Finalmente, cabe mencionar que, a metodologia apresentada neste exemplo é factível de ser utilizada no projeto ou otimização de micro-estruturas, pois a derivada topológica do funcional ψ , mostrada na eq.(2.208), pode ser utilizada como direção de descida de um algoritmo de otimização. De fato, propõe-se a seguinte estrutura para um algoritmo que minimize a distância entre as respostas constitutivas macroscópicas \mathbf{K} e \mathbf{K}^* :

- **Descrição** completa do domínio inicial do EVR Ω_μ , a resposta constitutiva macroscópica desejada \mathbf{K}^* , o valor do parâmetro γ , o número máximo de iterações N e uma tolerância tol .
- **Calcule** os valores iniciais (iteração $j = 0$) da resposta constitutiva macroscópica \mathbf{K} , o tensor de sensibilidade topológica $\mathbf{D}_{T\mu}$ e a derivada topológica $D_{T\mu}\psi$.
- **Enquanto** $|D_{T\mu}^j\psi| > tol$ e $j \leq N$, **faça**:
 - **Calcule** \mathbf{K}^j , $\mathbf{D}_{T\mu}^j$ e $D_{T\mu}^j\psi$ no domínio Ω_μ^j .
 - **Altere** o domínio atual Ω_μ^j introduzindo perturbações, de acordo com o valor do parâmetro γ , nos pontos onde $D_{T\mu}^j\psi$ atinge os máximos valores.
 - **Atualize** $\Omega_\mu^{j+1} = \Omega_\mu^j$ e $j \leftarrow j + 1$.
- **Assegure** que $\mathbf{K}^j \approx \mathbf{K}^*$.

Algoritmo A: otimização topológica de micro-estruturas especializadas em condução estacionária de calor.

2.2.3.7 Exemplo 7

Encerrando esta série de exemplos acerca do uso da expansão assintótica do operador constitutivo macroscópico no projeto e/ou otimização de micro estruturas, agora será apresentado um exemplo de aplicação do algoritmo proposto no exemplo anterior (Algoritmo A). Levando em conta o discutido nos exemplos anteriores, agora somente será estudado o modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno do EVR.

A resposta constitutiva objetivo foi obtida de maneira sintética através da análise de uma microestrutura caracterizada por um quadrado de dimensões unitárias com condutividade térmica $k_m = 2.0$, no qual está inserida uma faixa de material menos condutor ($k_i = 1.0$) com uma largura do 10% do tamanho do lado do EVR, como mostrado na Fig.2.38. Do lado da mencionada figura é apresentado o tensor constitutivo homogeneizado, evidentemente ortotrópico.

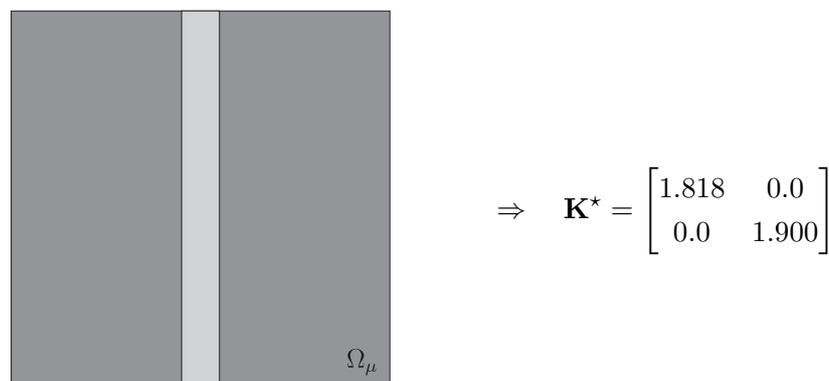


Figura 2.38: exemplo 7 - geometria do EVR objetivo.

Como ponto de partida do algoritmo, serão estudadas duas topologias iniciais constituídas por uma micro célula quadrada unitária na qual estão inseridas inclusões com a mesma fração de volume e materiais que o EVR descrito anteriormente. Em particular, o volume de inclusão utilizado nesses dois casos é distribuído no domínio da seguinte forma:

- Caso A: uma única inclusão circular centrada de raio $r \approx 0.1784$ (Fig.2.39(a)) no domínio Ω_μ , discretizado com uma malha uniforme de elementos finitos triangulares lineares com um total de 11733 nós e 23064 elementos.
- Caso B: duas inclusões circulares de raio $r \approx 0.1261$ centradas em $(1/4, 1/2)$ e $(3/4, 1/2)$, considerando que a origem do sistema de coordenadas cartesianas está posicionada no canto inferior esquerdo do EVR (Fig.2.39(b)). Na discretização foi utilizada uma malha uniforme de elementos finitos triangulares lineares com um total de 11736 nós e 23070 elementos.

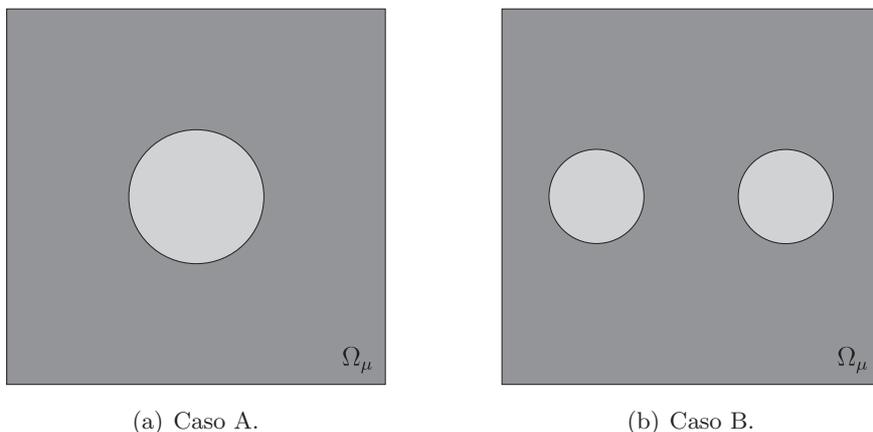
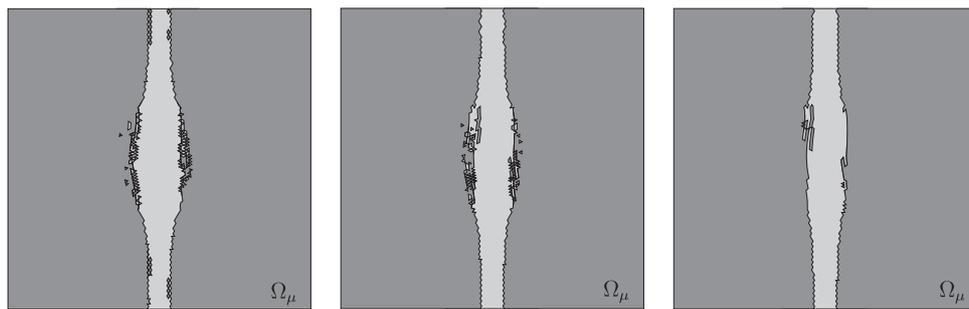


Figura 2.39: exemplo 7 - domínios de análise para os casos de estudo.

As respostas constitutivas homogeneizadas para os dois casos apresentados anteriormente são os seguintes:

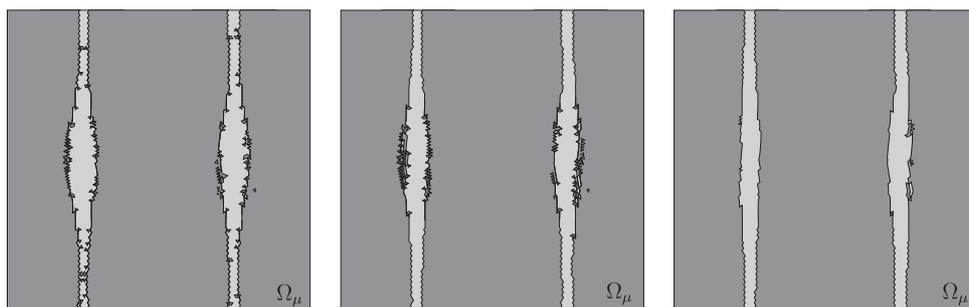
$$\mathbf{K}_A = \begin{bmatrix} 1.871 & 0.0 \\ 0.0 & 1.871 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{K}_B = \begin{bmatrix} 1.876 & 0.0 \\ 0.0 & 1.860 \end{bmatrix}. \quad (2.211)$$

Nas Fig.2.40 (Caso A) e Fig.2.41 (Caso B) são mostradas as topologias obtidas para alguns passos intermediários do algoritmo de otimização apresentado no exemplo anterior (Algoritmo A), correspondentes às iterações $j \in \{30, 60, 90\}$.



(a) Iteração 30. (b) Iteração 60. (c) Iteração 90.

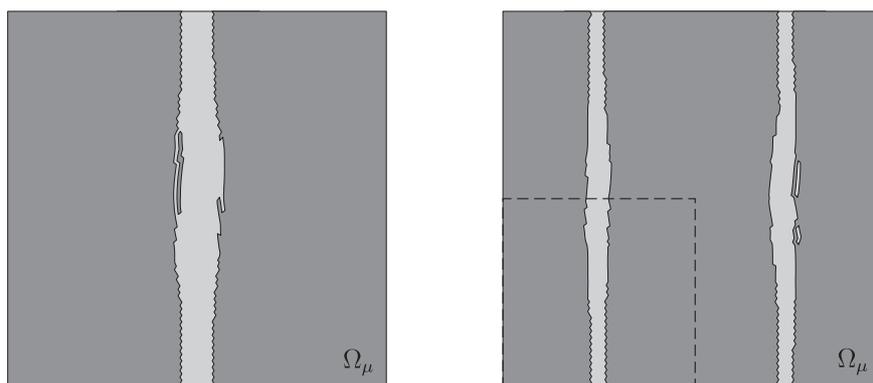
Figura 2.40: exemplo 7 - evolução da topologia no processo de otimização - caso A.



(a) Iteração 30. (b) Iteração 60. (c) Iteração 90.

Figura 2.41: exemplo 7 - evolução da topologia no processo de otimização - caso B.

As topologias obtidas no final de processo de otimização, iteração $j = 130$, são apresentadas na Fig.2.42. Observando-se que, embora o exemplo seja simples, a qualidade dos resultados obtidos são totalmente satisfatórios com a aproximação proposta e para a discretização utilizada.



(a) Caso A. (b) Caso B.

Figura 2.42: exemplo 7 - topologias obtidas na iteração $j = 130$.

A diferença nos resultados pode ser explicada pelo fato de ter utilizado na análise o modelo de flutuação periódica de temperatura no contorno. Pois com esse modelo é possível tomar como janela de referência para o EVR somente um quarto da microestrutura obtida para o caso B. Nessa situação, obter-se-ia um resultado totalmente análogo

ao conseguido para o caso A. A mudança na janela de referência discutida anteriormente é mostrada em linha tracejada na Fig.2.42(b). Cabe mencionar ainda que a metodologia proposta foi capaz de recuperar a microestrutura cuja resposta constitutiva macroscópica associada é dada pelo tensor \mathbf{K}^* , partindo de uma resposta isotrópica (Caso A) e ortotrópica na direção contrária (Caso B). Para finalizar, na Fig.2.43 é mostrada a evolução do valor relativo da função $\psi(\varepsilon)$, eq.(2.205), ao longo do processo de projeto microestrutural para as duas condições iniciais estudadas.

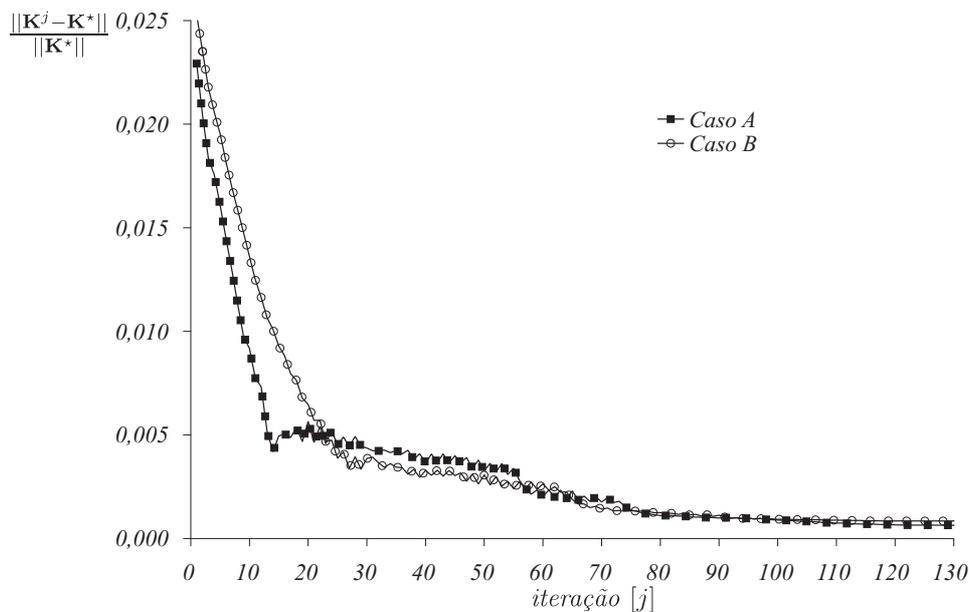


Figura 2.43: exemplo 7 - evolução do valor relativo da função custo.

2.3 Comentários adicionais

Neste Capítulo foram apresentadas as equações e estrutura variacional da modelagem constitutiva multi-escala para o fenômeno de condução estacionária de calor. Partindo de um princípio de equilíbrio e assumindo que o gradiente de temperatura macroscópico e o fluxo de calor são definidos como a média volumétrica de suas contrapartes microscópicas sobre um Elemento de Volume Representativo do material, foi possível derivar de maneira axiomática uma família de modelos constitutivos multi-escala. A estrutura variacional desta modelagem permite distinguir claramente as hipóteses básicas das suas conseqüências. Adicionalmente, foi apresentada de forma detalhada a discretização e implementação computacional pelo método dos elementos finitos da modelagem proposta neste trabalho.

Em seguida, foi utilizada a análise de sensibilidade topológica no cálculo da derivada topológica para os modelos constitutivos multi-escala mencionados anteriormente. Esta modelagem multi-escala é particularmente apropriada porque permite uma clara identificação dos espaços envolvidos. Sendo possível calcular de forma explícita a derivada topológica associada à energia específica macroscópica. Como resultado fundamental deste trabalho foi identificado um tensor simétrico de segunda ordem, cujas componentes

dependem dos gradientes das soluções dos problemas variacionais canônicos associados ao domínio original não perturbado. O mencionado tensor representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando é introduzida uma pequena inclusão circular na micro-escala.

Visando mostrar as características e propriedades contidas no tensor de sensibilidade topológica, os resultados teóricos foram aplicados no desenvolvimento de exemplos computacionais. Cada um deles foi concebido para mostrar diferentes características da informação fornecida pelo tensor ora mencionado. Os resultados numéricos apresentados na Seção 2.2.3 são bastante satisfatórios, evidenciando assim as potencialidades de aplicação do resultado obtido no desenvolvimento de novos métodos de síntese de microestruturas.

Por último, cabe ainda observar que o resultado apresentado neste capítulo pode ser estendido, tal como está, para aplicações no contexto de problemas de escoamento, desde que as equações clássicas associadas a esses problemas possuem a mesma estrutura matemática que o problema estudado aqui.

Capítulo 3

Elasticidade linear

Materiais composto tornaram-se uma das classes mais importantes de materiais da engenharia. O comportamento mecânico macroscópico deles é de suma importância no projeto de componentes estruturais para um vasto número de aplicações nas indústrias civil, mecânica, aeroespacial, biomédica e nuclear. De forma geral, pode-se afirmar que um dos grandes desafios da ciência dos materiais é como melhorar as propriedades macroscópicas dos materiais por meio de mudanças de forma e/ou topologia ao nível micro-estrutural. Por exemplo, mudanças na forma das inclusões de grafite em uma matriz de fundição férrea podem produzir mudanças importantes nas propriedades macroscópicas deste material. Assim sendo, a habilidade de prever com precisão o comportamento mecânico macroscópico, como também sua sensibilidade a mudanças micro-estruturais, torna-se essencial na análise, projeto e otimização de materiais heterogêneos. Neste contexto, cabe citar os trabalhos de, por exemplo, Almgreen (1985) [1] e Lakes (1987a) [68], nos quais foi utilizada com êxito uma técnica baseada em métodos relaxados no projeto topológico de uma micro-estrutura que reproduz a nível macroscópico um coeficiente de Poisson negativo. Este tipo de abordagem baseia-se na utilização de um material descrito através de um campo de densidade fictício e imita, em um sentido regularizado, a introdução de mudanças topológica micro-estruturais localizadas (furos) onde a densidade artificial esteja suficientemente perto de zero (por exemplo, veja os trabalhos pioneiros de Bendsøe & Kikuchi (1988) [16] e Źochowski (1988) [136]).

Em contraste com as abordagens via métodos regularizados, este capítulo propõe uma expressão analítica geral para a sensibilidade do tensor bi-dimensional de elasticidade macroscópico quando mudanças topológicas são introduzidas na micro-estrutura do material subjacente. A resposta elástica macroscópica é estimada por meio de uma teoria constitutiva multi-escala baseada na técnica de homogeneização para o problema de elasticidade. Seguindo as idéias apresentadas por Germain *et al.* (1983) [42] e Michel *et al.* (1999) [81], os tensores tensão e deformação macroscópica em cada ponto do macro-contínuo estão definidos como as médias volumétricas das contrapartes microscópicas sobre o Elemento de Volume Representativo (EVR) do material associado com aquele ponto. Assim, a resposta elástica efetiva estimada para uma determinada micro-estrutura depende da escolha das restrições cinemáticas impostas sobre os campos de deslocamentos cinematicamente admissíveis no EVR. Cabe mencionar que o tamanho mínimo do EVR considerado deve ser

tal que as leis da teoria do contínuo forneçam uma descrição adequada do comportamento elástico do corpo microscópico. A sensibilidade proposta é um campo tensorial simétrico de quarta ordem sobre o EVR que mede como a resposta constitutiva elástica macroscópica muda quando uma pequena inclusão circular é introduzida na micro-escala. Destaca-se que a sensibilidade topológica obtida depende apenas da solução de um conjunto de equações variacionais sobre o domínio original (não perturbado). Esta fórmula analítica é derivada usando os conceitos de *expansão assintótica topológica* e *derivada topológica* (Sokolowski & Źochowski (1999) [116] e Cécia *et al.* (2000) [26]) no contexto da formulação variacional da teoria multi-escala adotada. As noções matemáticas de expansão assintótica topológica e da derivada topológica permitem o cálculo da sensibilidade de um determinado funcional de forma com relação a perturbações infinitesimais no domínio, como aqueles produzidos pela inserção de furos, inclusões ou termos fontes. O uso de tais conceitos no contexto da mecânica dos sólidos, otimização topológica de estruturas e problemas inversos podem ser encontrados na breve resenha histórica apresentada na Seção 1.2.

Este capítulo está dividido fundamentalmente em três partes. A Seção 3.1 descreve detalhadamente a modelagem constitutiva multi-escala adotada na estimação do tensor bi-dimensional de elasticidade macroscópico. O principal resultado teórico deste capítulo é obtido na Seção 3.2, onde é apresentado o desenvolvimento da análise de sensibilidade topológica para o problema multi-escala de elasticidade linear com o EVR constituído por materiais isotrópicos. Como resultado da análise, obter-se-á a forma fechada da sensibilidade da resposta constitutiva macroscópica (resposta elástica) para perturbações topológicas micro-estruturais. As aplicações dos resultados obtidos são apresentadas no final da Seção 3.2, por meio de exemplos numéricos de interesse aos objetivos deste trabalho. Encerrando o capítulo, na Seção 3.3 são apresentadas algumas considerações finais.

3.1 Modelagem multi-escala

Esta seção descreve a formulação variacional multi-escala para o problema clássico de elasticidade linear, que permite estimar o tensor de elasticidade macroscópica através da descrição da geometria e propriedades elásticas de um Elemento de Volume Representativo local do material. Esta modelagem constitutiva multi-escala segue a metodologia proposta por Germain *et al.* (1983) [42], e a teoria desenvolvida, entre outros, por Suquet (1987) [123], Michel *et al.* (1999) [81] e Miehe *et al.* (1999)[84], e cuja estrutura variacional é descrita detalhadamente em de Souza Neto & Feijóo (2006) [32].

A célula microscópica, representada por $\Omega_\mu \subset \mathbb{R}^N$, é definida baseando-se no conceito de Elemento de Volume Representativo (EVR). Assim, cada ponto material \boldsymbol{x} do macro-contínuo, representado por Ω , tem associado um EVR (caracterizado pela coordenada \boldsymbol{y}). Além do mais, para que o modelo multi-escala esteja bem definido é necessário que o comprimento característico do EVR, l_μ , seja muito menor que o comprimento característico da macro-escala, l . Em forma geral, pode-se considerar que o EVR é constituído por uma parte denominada matriz, representada por Ω_μ^m , na qual estão inseridas inclusões de

diferentes materiais¹, representadas por Ω_μ^i . Baseado no exposto anteriormente, tem-se as seguintes definições para os domínios de análise:

$$\Omega_\mu = \Omega_\mu^m \cup \overline{\Omega_\mu^i}; \quad \partial\Omega_\mu^m = \partial\Omega_\mu \cup \partial\Omega_\mu^i, \quad (3.1)$$

onde $\overline{\Omega_\mu^i}$ denota o fecho do conjunto Ω_μ^i . Por simplicidade, somente serão consideradas micro-células nas quais as inclusões não interceptam o contorno do EVR, ou seja

$$\partial\Omega_\mu \cap \overline{\Omega_\mu^i} = \emptyset. \quad (3.2)$$

As características geométricas da modelagem multi-escala, descritas anteriormente, são apresentadas na Fig.3.1. Cabe ainda definir as normais unitárias a cada contorno $\partial\Omega_\mu^m$ e $\partial\Omega_\mu^i$ da seguinte forma

$$\mathbf{n} := \mathbf{n}|_{\partial\Omega_\mu^m} \quad \text{e} \quad \mathbf{n}|_{\partial\Omega_\mu^i} := -\mathbf{n}. \quad (3.3)$$

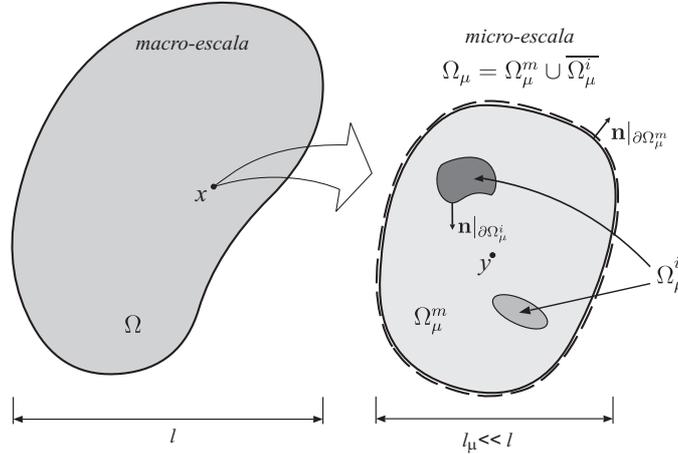


Figura 3.1: macro-escala contínua com micro-escala local.

3.1.1 Homogeneização e campos de deslocamentos microscópicos

A modelagem constitutiva multi-escala empregada neste trabalho baseia-se no conceito da *homogeneização* de campos definidos na micro escala. Assim, os campos microscópicos associados ao ponto material \mathbf{x} são obtidos como a média volumétrica sobre o EVR de suas contrapartes a nível microscópico. Portanto, a deformação macroscópica \mathbf{E} satisfaz

$$\mathbf{E} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{E}_\mu dV, \quad (3.4)$$

onde \mathbf{E}_μ denota o tensor deformação microscópica associado a cada ponto \mathbf{y} do EVR. O processo definido pela eq.(3.4), que toma um campo definido sobre o EVR, neste caso \mathbf{E}_μ , e o mapeia numa quantidade definida na macro-escala, neste caso \mathbf{E} , é chamado de *homogeneização*.

¹No caso que o EVR possua vazios (Ω_μ^v) a análise é totalmente análoga ao apresentado nesta seção.

Decomposição aditiva do campo de deslocamento microscópico. Sem perda de generalidade, o campo de deslocamento microscópico \mathbf{u}_μ pode ser decomposto numa soma

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \bar{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) + \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}), \quad (3.5)$$

de um deslocamento constante (rígido) coincidente com o deslocamento macroscópico $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ associado ao ponto \mathbf{x} , um campo associado à deformação macroscópica \mathbf{E}

$$\bar{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) := \mathbf{E}\mathbf{y}, \quad (3.6)$$

que varia linearmente com a coordenada \mathbf{y} , e num campo de *flutuação de deslocamento* $\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y})$. Uma representação geométrica da decomposição apresentada anteriormente pode ser observada na Fig.3.2. Assumindo para o EVR uma cinemática de pequenas de-

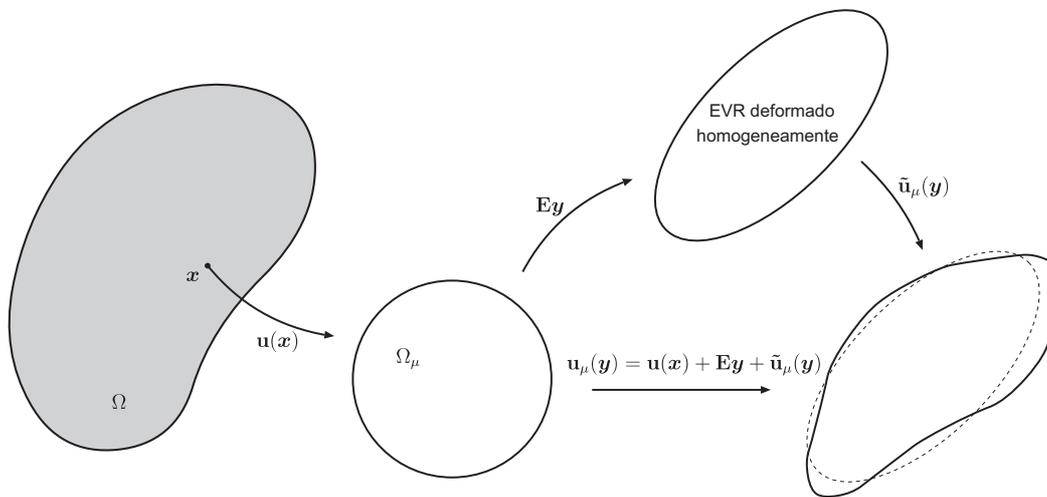


Figura 3.2: separação aditiva do campo de deslocamento microscópico.

formações e pequenos deslocamentos, a deformação microscópica \mathbf{E}_μ do EVR satisfaz

$$\mathbf{E}_\mu = \nabla^s \mathbf{u}_\mu. \quad (3.7)$$

Levando em conta a decomposição (3.5), a deformação microscópica pode ser escrita como:

$$\nabla^s \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{E} + \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}_\mu = \mathbf{E} + \tilde{\mathbf{E}}_\mu, \quad (3.8)$$

onde se tem uma parte homogênea (uniforme no EVR) dada pela deformação macroscópica \mathbf{E} , e um campo $\tilde{\mathbf{E}}_\mu$ correspondente a uma flutuação de deformação microscópica sobre o valor homogeneizado (médio):

$$\tilde{\mathbf{E}}_\mu = \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu. \quad (3.9)$$

Cabe mencionar que, baseado na definição do operador gradiente, a aplicação $\nabla^s \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y})$ corresponde à parte simétrica do gradiente do campo de deslocamento microscópico $\nabla \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y})$, dado por

$$\nabla \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) := \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}). \quad (3.10)$$

Empregando a hipótese cinemática associada ao campo \mathbf{E}_μ , eq. (3.7), e o teorema da divergência, a homogeneização do campo de deformação microscópica apresentada na eq.(3.4) pode ser escrita, equivalentemente, como

$$\mathbf{E} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \otimes_s \mathbf{n} dS \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.11)$$

De maneira semelhante à mostrada anteriormente, o deslocamento macroscópico é obtido, através da homogeneização, como sendo

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) dV. \quad (3.12)$$

Note que, introduzindo a decomposição dada pela eq.(3.5) na expressão anterior, para que a homogeneização do campo de deslocamento permaneça válida, o campo de flutuações de deslocamento deve satisfazer

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) dV = -\mathbf{E} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV. \quad (3.13)$$

Observação 21. *Sem perda de generalidade, pode-se posicionar a origem do sistema de coordenadas no centróide do EVR (centro geométrico). Assim, a restrição sobre o campo de flutuações de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, eq.(3.13), fica*

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) dV = \mathbf{0}. \quad (3.14)$$

Mínima restrição cinemática no EVR. Os conceitos de homogeneização discutidos anteriormente junto com a decomposição aditiva dos campos microscópicos, eqs. (3.5) e (3.8), naturalmente estabelecem restrições sobre os possíveis campos de deslocamentos $\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y})$ no EVR. Portanto, a condição necessária para que o campo de deslocamento seja cinematicamente admissível na modelagem proposta é

$$\mathbf{u}_\mu \in \mathcal{K}_\mu \subset \mathcal{K}_\mu^*, \quad (3.15)$$

sendo que \mathcal{K}_μ^* é denominado de *conjunto da mínima restrição cinematicamente admissível para os campos de deslocamentos no EVR*, ou seja, é o conjunto mais geral dos possíveis campos de deslocamento microscópicos compatíveis com a homogeneização dos campos de deformação e deslocamento. Assim, o conjunto \mathcal{K}_μ^* pode ser definido como

$$\mathcal{K}_\mu^* := \left\{ \mathbf{v} \in [H^1(\Omega_\mu)]^2 : \int_{\Omega_\mu} \mathbf{v} dV = V_\mu \mathbf{u}, \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{v} \otimes_s \mathbf{n} dS = V_\mu \mathbf{E}, \llbracket \mathbf{v} \rrbracket = \mathbf{0} \text{ sobre } \partial\Omega_\mu^i \right\}, \quad (3.16)$$

sendo \mathbf{n} o vetor normal unitário saliente ao contorno $\partial\Omega_\mu$ e lembrando que a operação $\llbracket \mathbf{v} \rrbracket$ denota o salto da função \mathbf{v} através da interface entre a matriz e a inclusão $\partial\Omega_\mu^i$:

$$\llbracket (\cdot) \rrbracket := (\cdot)|_m - (\cdot)|_i, \quad (3.17)$$

com $(\cdot)|_m$ associado à matriz Ω_μ^m e $(\cdot)|_i$ associado à inclusão Ω_μ^i . Levando em conta a decomposição dada pela eq.(3.8), observa-se que da homogeneização da deformação, eq.(3.4), tem-se

$$\begin{aligned} V_\mu \mathbf{E} &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{E}_\mu dV = \int_{\Omega_\mu} (\mathbf{E} + \tilde{\mathbf{E}}_\mu) dV = V_\mu \mathbf{E} + \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{E}}_\mu dV \\ \Rightarrow \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{E}}_\mu dV &= \int_{\Omega_\mu} \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV = \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes_s \mathbf{n} dS = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Em vista da decomposição (3.5), a restrição (3.15) pode ser equivalentemente escrita requerendo que o campo de flutuação de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y})$ pertença ao espaço vetorial das flutuações de deslocamento cinematicamente admissíveis $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$, que por sua vez é um sub-espaço do *espaço vetorial da mínima restrição cinematicamente admissível das flutuações de deslocamento* $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$, ou seja

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*, \quad (3.19)$$

onde o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$ é definido, analogamente a (3.16), como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^* := \left\{ \mathbf{v} \in [H^1(\Omega_\mu)]^2 : \int_{\Omega_\mu} \mathbf{v} dV = -\mathbf{E} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV, \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{v} \otimes_s \mathbf{n} dS = \mathbf{0}, [\mathbf{v}] = \mathbf{0} \text{ sobre } \partial\Omega_\mu^i \right\}. \quad (3.20)$$

Assim, levando em conta as definições apresentadas anteriormente, tem-se que o conjunto \mathcal{K}_μ^* pode ser escrito equivalentemente da seguinte forma,

$$\mathcal{K}_\mu^* := \left\{ \mathbf{v} \in [H^1(\Omega_\mu)]^2 : \mathbf{v} = \mathbf{u} + \mathbf{E}\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* \right\}. \quad (3.21)$$

Então, dado um deslocamento macroscópico $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ e deformação macroscópica \mathbf{E} , ambos associados ao ponto \mathbf{x} do macro-contínuo, o conjunto \mathcal{K}_μ^* é uma translação do espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$.

3.1.2 Equilíbrio mecânico do elemento de volume representativo

Considerando que o EVR está sujeito a forças de corpo $\mathbf{b}_\mu = \mathbf{b}_\mu(\mathbf{y})$ em Ω_μ e a uma tração externa $\mathbf{g}_\mu = \mathbf{g}_\mu(\mathbf{y})$ atuando sobre o contorno exterior $\partial\Omega_\mu$, o *Princípio dos Trabalhos Virtuais* estabelece que o EVR esteja em equilíbrio se e somente se o campo de tensão \mathbf{T}_μ em Ω_μ satisfaz a equação variacional clássica do problema de elasticidade:

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV + \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \cdot \boldsymbol{\eta} dV - \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \cdot \boldsymbol{\eta} dS = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu, \quad (3.22)$$

onde o *espaço dos deslocamentos virtuais cinematicamente admissíveis* no EVR, denotado por \mathcal{V}_μ , é definido como,

$$\mathcal{V}_\mu := \left\{ \boldsymbol{\eta} \in [H^1(\Omega_\mu)]^2 : \boldsymbol{\eta} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2; \forall \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in \mathcal{K}_\mu \right\}. \quad (3.23)$$

Trivialmente, com a definição estabelecida acima e levando em conta o conjunto \mathcal{K}_μ , tem-se, em forma geral, que o espaço dos deslocamentos virtuais cinematicamente

admissíveis coincide com o espaço das flutuações de deslocamento cinematicamente admissíveis,

$$\mathcal{V}_\mu = \tilde{\mathcal{K}}_\mu. \quad (3.24)$$

Finalmente, para um campo tensorial \mathbf{T}_μ suficientemente regular no domínio Ω_μ , o problema local de equilíbrio associado à equação variacional (3.22) é dado por

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{T}_\mu = \mathbf{b}_\mu & \text{em } \Omega_\mu \\ \mathbf{T}_\mu \mathbf{n} = \mathbf{g}_\mu & \text{sobre } \partial\Omega_\mu \\ \llbracket \mathbf{T}_\mu \rrbracket \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \end{cases}. \quad (3.25)$$

3.1.3 Tensão homogeneizada

Uma das hipóteses mais importantes da teoria constitutiva multi-escala discutida nesta seção é que, de maneira semelhante à eq.(3.4), o tensor tensão macroscópico associado ao ponto \mathbf{x} do macro-contínuo é definido através do conceito da homogeneização do campo tensorial de tensão microscópica \mathbf{T}_μ que atua no EVR. Assim sendo, a tensão macroscópica \mathbf{T} é obtida como,

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu(\mathbf{y}) dV. \quad (3.26)$$

Note-se que na expressão anterior o EVR é descrito como um contínuo, então é necessário que o EVR seja suficientemente grande para que esta representação seja consistente. Em seguida, usando a relação integro - tensorial

$$\int_{\Omega} \mathbf{S}(\nabla \mathbf{r})^T dV = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{S} \mathbf{n}) \otimes \mathbf{r} dS - \int_{\Omega} (\operatorname{div} \mathbf{S}) \otimes \mathbf{r} dV, \quad (3.27)$$

na expressão (3.26), adotando $\mathbf{S} = \mathbf{T}_\mu$, $\mathbf{r} = \mathbf{y} \Rightarrow \nabla \mathbf{r} = \mathbf{I}$, tem-se que,

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left[\int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{T}_\mu \mathbf{n}) \otimes \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} (\operatorname{div} \mathbf{T}_\mu) \otimes \mathbf{y} dV + \int_{\partial\Omega_\mu^i} (\llbracket \mathbf{T}_\mu \rrbracket \mathbf{n}) \otimes \mathbf{y} dS \right], \quad (3.28)$$

ou equivalentemente, em vista da simetria do tensor \mathbf{T} , como

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left[\int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{T}_\mu \mathbf{n}) \otimes_s \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} (\operatorname{div} \mathbf{T}_\mu) \otimes_s \mathbf{y} dV + \int_{\partial\Omega_\mu^i} (\llbracket \mathbf{T}_\mu \rrbracket \mathbf{n}) \otimes_s \mathbf{y} dS \right]. \quad (3.29)$$

Empregando a eq.(3.25), tem-se que a tensão homogeneizada pode ser escrita como

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \left(\int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \otimes_s \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \otimes_s \mathbf{y} dV \right). \quad (3.30)$$

Finalmente, cabe mencionar que a expressão anterior representa o processo de *homogeneização* da tensão exclusivamente em termos das forças de corpo e tração externa atuantes sobre o EVR.

3.1.4 Princípio de macro-homogeneidade de Hill-Mandel

Baseados em argumentos físicos Hill (1965) [53] e Mandel (1971) [75]; estabeleceram que “a potência das tensões macroscópicas em qualquer ponto arbitrário do macro-contínuo deve ser igual à média volumétrica da potência das tensões microscópicas sobre o EVR associado a esse ponto para qualquer movimento cinematicamente admissível do EVR”. Em outras palavras, no contexto do problema estudado aqui, tem-se que para qualquer estado do EVR caracterizado por meio do campo de tensão microscópica \mathbf{T}_μ em equilíbrio, a identidade

$$\mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{E} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \delta \mathbf{E}_\mu dV, \quad (3.31)$$

deve ser satisfeita para qualquer campo de deformação microscópica cinematicamente admissível. Dentro do presente contexto, um campo de deformação microscópica é chamado de cinematicamente admissível se, veja eq.(3.8),

$$\delta \mathbf{E}_\mu = \delta \mathbf{E} + \nabla^s \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.32)$$

Com o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel apresentado acima, pode-se escrever a seguinte proposição:

Proposição 3. *O Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é satisfeito se e somente se o trabalho virtual das trações externas \mathbf{g}_μ e do campo das forças de corpo \mathbf{b}_μ no EVR são nulos. Assim, o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é equivalente às seguintes equações variacionais:*

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \cdot \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad e \quad \int_{\partial \Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \cdot \boldsymbol{\eta} dS = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.33)$$

Prova. Introduzindo a decomposição aditiva do campo de deformação microscópica, eq.(3.8), em (3.31), tem-se que

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \delta \mathbf{E}_\mu dV &= \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot (\delta \mathbf{E} + \nabla^s \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV \\ &= \mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{E} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \nabla^s \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Então, comparando o resultado acima com (3.31), observa-se que o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é satisfeito se e somente se,

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \nabla^s \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV = 0 \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.35)$$

Empregando integração por partes na expressão acima, obtém-se

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \nabla^s \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV = \int_{\partial \Omega_\mu} (\mathbf{T}_\mu \mathbf{n}) \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dS - \int_{\Omega_\mu} (\text{div} \mathbf{T}_\mu) \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV + \int_{\partial \Omega_\mu^i} [[\mathbf{T}_\mu]] \mathbf{n} \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dS. \quad (3.36)$$

Levando em consideração a eq.(3.25) a expressão anterior fica da forma,

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \nabla^s \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV = \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dS - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.37)$$

Da expressão acima segue que o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel é equivalente à seguinte equação variacional

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dS - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \cdot \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV = 0 \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.38)$$

No entanto, desde que \mathcal{V}_μ possui a estrutura de um espaço vetorial (veja eqs. (3.20) e (3.23)), a equação variacional mostrada acima é satisfeita se e somente se cada uma das integrais é nula individualmente. ■

Observação 22. *O Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel desempenha, portanto, um papel fundamental no desenvolvimento de modelos constitutivos multiescala, estabelecendo que a tração externa \mathbf{g}_μ e as forças de corpo \mathbf{b}_μ são reações às restrições cinemáticas impostas sobre o campo de deslocamento do EVR, associadas à escolha do espaço \mathcal{V}_μ . Conseqüentemente, \mathbf{g}_μ e \mathbf{b}_μ **não podem** ser prescritas independentemente, pois pertencem ao complemento ortogonal do espaço \mathcal{V}_μ , ou seja*

$$(\mathbf{g}_\mu \text{ e } \mathbf{b}_\mu) \in \mathcal{V}_\mu^\perp. \quad (3.39)$$

Portanto, uma vez que o espaço \mathcal{V}_μ é escolhido, tem-se definido de forma automática o espaço ao qual \mathbf{g}_μ e \mathbf{b}_μ pertencem.

3.1.5 Formulação do problema de equilíbrio mecânico

Outro componente essencial na definição da modelagem constitutiva multi-escala discutida nesta seção é a caracterização constitutiva dos materiais que compõem o EVR. Sendo que o objetivo principal é mostrar detalhadamente a modelagem constitutiva multi-escala utilizada na análise de sensibilidade topológica a ser desenvolvida na Seção 3.2, o foco aqui é estudar modelos constitutivos baseados em teorias fenomenológicas ao nível microscópico. Assim sendo e restrito a uma teoria constitutiva puramente local, os axiomas do *Determinismo Constitutivo e Ações Locais*, Truesdell (1969) [129]; estabelecem que o tensor tensão \mathbf{T} em qualquer ponto \mathbf{x} do contínuo é unicamente determinado pelo tensor deformação \mathbf{E} nesse ponto \mathbf{x} . Quer dizer que existe um funcional constitutivo simétrico \mathcal{F} tal que

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \mathcal{F}(\mathbf{E}(\mathbf{x})) \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}. \quad (3.40)$$

Da mesma maneira que no caso macroscópico e considerando que na micro-escala são válidas as leis da teoria do contínuo, a tensão microscópica no EVR \mathbf{T}_μ , em forma geral, satisfaz a seguinte relação

$$\mathbf{T}_\mu(\mathbf{y}) = \mathcal{F}_\mu(\mathbf{E}_\mu(\mathbf{y})) \quad \forall \mathbf{y} \in \bar{\Omega}_\mu, \quad (3.41)$$

onde \mathcal{F}_μ é o funcional constitutivo microscópico associado ao domínio Ω_μ .

Para o caso particular de um material elástico linear, o funcional constitutivo \mathcal{F}_μ assume a forma clássica,

$$\mathcal{F}_\mu(\mathbf{E}_\mu) = \mathbb{C}_\mu \mathbf{E}_\mu \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega_\mu}, \quad (3.42)$$

onde o tensor de elasticidade (de quarta ordem) $\mathbb{C}_\mu = \mathbb{C}_\mu^T$ satisfaz

$$\mathbb{C}_\mu = \mathbb{C}_\mu(\mathbf{y}) = \begin{cases} \mathbb{C}_\mu^m & \text{se } \mathbf{y} \in \Omega_\mu^m \\ \mathbb{C}_\mu^i & \text{se } \mathbf{y} \in \Omega_\mu^i \end{cases}, \quad (3.43)$$

com \mathbb{C}_μ^m e \mathbb{C}_μ^i denotando os tensores constitutivos elásticos associados à matriz e inclusão, respectivamente, tal que no caso, mais particular ainda, de um material isotrópico e homogêneo são representados por:

$$\mathbb{C}_\mu^m = \frac{E_m}{1 - \nu_m^2} [(1 - \nu_m) \mathbb{I} + \nu_m (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})], \quad \mathbb{C}_\mu^i = \frac{E_i}{1 - \nu_i^2} [(1 - \nu_i) \mathbb{I} + \nu_i (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})], \quad (3.44)$$

sendo E_m e E_i os módulos de Young da matriz e inclusão, respectivamente, e ν_m e ν_i os correspondentes coeficientes de Poisson.

Para o desenvolvimento deste trabalho, serão considerados apenas materiais com resposta constitutiva como a mostrada na equação (3.42). Em vista da linearidade de (3.42) e da decomposição aditiva do campo de deformação microscópica (3.8), o campo de tensão microscópica \mathbf{T}_μ pode ser escrito como uma soma

$$\mathbf{T}_\mu = \bar{\mathbf{T}}_\mu + \tilde{\mathbf{T}}_\mu, \quad (3.45)$$

de um tensor $\bar{\mathbf{T}}_\mu$ que representa a tensão microscópica induzida pela deformação macroscópica \mathbf{E} – associada ao campo de deslocamento $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{y})$ – e um tensor $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ que caracteriza as flutuações de tensão microscópicas associadas ao campo de flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y})$.

Introduzindo a decomposição aditiva do campo de tensão microscópica (3.45) no funcional (3.22) e levando em conta o estabelecido pelo Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel, eq. (3.33), tem-se que a forma fraca do problema de equilíbrio na variável $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ pode ser escrito como: dada uma deformação macroscópica \mathbf{E} , encontre o campo de flutuação de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu$, tal que

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = - \int_{\Omega_\mu} \bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu, \quad \text{com } \tilde{\mathbf{T}}_\mu = \mathbb{C}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu. \quad (3.46)$$

Empregando integração por partes e levando em conta que $\mathbf{n}|_m = -\mathbf{n}|_i$ sobre $\partial\Omega_\mu^i$, tem-se que a expressão acima é escrita equivalentemente como,

$$\int_{\partial\Omega_\mu^i} \left(\llbracket \tilde{\mathbf{T}}_\mu \rrbracket \mathbf{n} + \llbracket \bar{\mathbf{T}}_\mu \rrbracket \mathbf{n} \right) \cdot \boldsymbol{\eta} dS - \int_{\Omega_\mu} \text{div} \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.47)$$

Finalmente a equação de Euler-Lagrange associada ao problema variacional (3.46) resulta no seguinte problema de valor no contorno: encontre o campo de flutuação de

deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div} \tilde{\mathbf{T}}_\mu = \mathbf{0} & \text{em } \Omega_\mu \\ \tilde{\mathbf{T}}_\mu = \mathbb{C}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu & \text{em } \Omega_\mu \\ \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes_s \mathbf{n} dS = \mathbf{0} & \\ \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu dV = -\mathbf{E} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV & \\ [[\tilde{\mathbf{u}}_\mu]] = \mathbf{0} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \\ [[\tilde{\mathbf{T}}_\mu]] \mathbf{n} = -[[\tilde{\mathbf{T}}_\mu]] \mathbf{n} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \end{array} \right. . \quad (3.48)$$

Observação 23. Se o EVR, representado por Ω_μ , tiver M inclusões, o domínio Ω_μ^i é definido como,

$$\Omega_\mu^i = \bigcup_{j=1}^M \Omega_{\mu_j}^i, \quad (3.49)$$

onde $\Omega_{\mu_j}^i$ é o domínio da j -ésima inclusão no EVR. Nesse caso, as condições impostas pela equação diferencial (3.48) devem ser satisfeitas em cada subdomínio $\Omega_{\mu_j}^i$ e as condições (3.48)_{5,6} devem ser válidas sobre cada contorno $\partial\Omega_{\mu_j}^i$.

Observação 24. Levando em conta o discutido na Observação 21 (pag. 87), a solução do problema de valor de contorno anterior pode ser construída como uma soma

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu = \tilde{\mathbf{v}}_\mu + \mathbf{c}_\mu, \quad (3.50)$$

de uma flutuação de deslocamento $\tilde{\mathbf{v}}_\mu$, solução do problema (3.48) satisfazendo a restrição (3.14), e um vetor constante \mathbf{c}_μ . Integrando no domínio Ω_μ a decomposição anterior e em vista de (3.13), o vetor constante \mathbf{c}_μ é obtido como

$$\mathbf{c}_\mu = -\frac{1}{V_\mu} \mathbf{E} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} dV. \quad (3.51)$$

Observação 25. A condição (3.48)₃ está naturalmente atendida como consequência da escolha do espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ de acordo com (3.20). Também observa-se que, trivialmente, o valor médio do lado direito de (3.48)₆ é nulo. Portanto, levando em conta a observação anterior, de (3.48)₄ e do Lema de Lax-Milgram, tem-se que existe uma solução única para o problema (3.46).

3.1.6 Classes de modelos multi-escala

Como foi mostrado no início desta seção, o conjunto \mathcal{K}_μ e o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ estabelecem as mínimas restrições cinemáticas sobre os campos de deslocamentos microscópicos \mathbf{u}_μ e $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, respectivamente, para que o conceito da macro-homogeneização seja válido. No entanto, o espaço das variações cinematicamente admissíveis \mathcal{V}_μ , em geral, está contido no espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$ o que permite obter diferentes modelos constitutivos multi-escala. Cabe mencionar que cada modelo difere um do outro somente pela escolha feita para o espaço das variações cinematicamente admissíveis $\mathcal{V}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$. Assim, no que segue são mostrados os quatro modelos constitutivos multi-escala clássicos, comumente conhecidos como:

- (a) Modelo de Taylor ou de deformação homogênea no EVR;
- (b) Modelo de deslocamento linear no contorno do EVR;
- (c) Modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR;
- (d) Modelo de tração uniforme no contorno do EVR, ou da mínima restrição cinemática.

3.1.6.1 Modelo de Taylor ou de deformação homogênea no EVR

Esta classe de modelo é obtida escolhendo como espaço das variações cinematicamente admissíveis o espaço identicamente nulo, ou seja,

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^T := \{\mathbf{0}\}. \quad (3.52)$$

Conseqüentemente, a solução do problema variacional (3.46) é a trivial, $\tilde{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{0}$. A deformação microscópica, portanto, é homogênea no EVR e coincide com a deformação macroscópica correspondente ao ponto material \mathbf{x} do macro-contínuo Ω ,

$$\mathbf{E}_\mu = \mathbf{E} \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega}_\mu. \quad (3.53)$$

Além disso, com a escolha feita para o espaço \mathcal{V}_μ , o campo de deslocamento microscópico no domínio do EVR é linear na variável \mathbf{y} , ou seja

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \bar{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega}_\mu. \quad (3.54)$$

Levando em conta a cinemática do modelo, eq.(3.52), as forças de corpo e trações externas reativas no EVR, $(\mathbf{g}_\mu, \mathbf{b}_\mu) \in (\mathcal{V}_\mu^T)^\perp$, podem ser funções arbitrárias com a regularidade suficiente no domínio de análise. Assim, as forças de corpo e trações externas podem ser determinadas num cálculo a posteriori.

Introduzindo o resultado (3.53) em (3.42), a resposta constitutiva microscópica que caracteriza o campo de tensão microscópica \mathbf{T}_μ satisfaz

$$\mathbf{T}_\mu = \mathbb{C}_\mu \mathbf{E}_\mu = \mathbb{C}_\mu \mathbf{E} = \bar{\mathbf{T}}_\mu \quad \forall \mathbf{y} \in \overline{\Omega}_\mu.$$

Como mostrado acima, para este modelo a resposta constitutiva microscópica é independente da coordenada \mathbf{y} . Então, a tensão homogeneizada (3.26) pode ser escrita como

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^m} dV \bar{\mathbf{T}}_\mu|_m + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu^i} dV \bar{\mathbf{T}}_\mu|_i = \frac{V_\mu^m}{V_\mu} \bar{\mathbf{T}}_\mu|_m + \frac{V_\mu^i}{V_\mu} \bar{\mathbf{T}}_\mu|_i, \quad (3.55)$$

onde $\bar{\mathbf{T}}_\mu|_m$ e $\bar{\mathbf{T}}_\mu|_i$ são os tensores tensão microscópicas induzidas (uniformes) na matriz e inclusão, respectivamente. Da mesma forma que em (3.49), se o EVR tiver M inclusões disjuntas e supondo que cada subdomínio $\Omega_{\mu_j}^i$ possui uma resposta constitutiva caracterizada através de um tensor de quarta ordem \mathbb{C}_{μ_j} independente da coordenada \mathbf{y} , a

expressão acima é reescrita da seguinte forma

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = v_m \bar{\mathbf{T}}_\mu|_m + \sum_{j=1}^M v_j \bar{\mathbf{T}}_\mu|_j, \quad (3.56)$$

com $\bar{\mathbf{T}}_\mu|_j = \mathbb{C}_{\mu_j} \mathbf{E}$ denotando a tensão microscópica induzida correspondente à fase j ; e v_m e v_j as frações de volume da matriz e da j -ésima inclusão, respectivamente, definidas como

$$v_m := \frac{V_\mu^m}{V_\mu} \quad \text{e} \quad v_j := \frac{V_\mu^j}{V_\mu}. \quad (3.57)$$

Então, nesta classe de modelo, a tensão macroscópica associada ao ponto \mathbf{x} nada mais é que a média ponderada da tensão induzida atuando nas diferentes fases sólidas do EVR. Este resultado é comumente conhecido na literatura como a *regra da mistura*.

3.1.6.2 Modelo de deslocamento linear no contorno do EVR

Para este modelo propõe-se que o deslocamento microscópico \mathbf{u}_μ no contorno do EVR varie linearmente na variável \mathbf{y} , ou seja,

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \bar{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.58)$$

Assim, o espaço \mathcal{V}_μ para o *modelo de flutuação de temperatura nula no contorno* do EVR, que satisfaz a proposta mostrada previamente, é definido como

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^\mathcal{L} := \left\{ \bar{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \bar{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \right\}. \quad (3.59)$$

Neste modelo, a única possível força de corpo reativa em Ω_μ – ortogonal a $\mathcal{V}_\mu^\mathcal{L}$ – é a identicamente nula,

$$\mathbf{b}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (3.60)$$

Quer dizer que só um campo de força de corpo microscópica igual a zero é compatível com esta classe de modelo, ou seja, que satisfaz a equação variacional (3.33)₁. No entanto, a tração externa reativa resultante da condição de ortogonalidade (3.33)₂, $\mathbf{g}_\mu \in (\mathcal{V}_\mu^\mathcal{L})^\perp$, pode ser qualquer função com a regularidade suficiente no contorno $\partial\Omega_\mu$, plausível de ser obtida através de um cálculo a posteriori.

3.1.6.3 Modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR

Esta classe de modelo constitutivo baseia-se em considerar uma distribuição periódica do EVR na micro-escala, Michel *et al.* (1999) [81], tornando-o apropriado na modelagem de muitos materiais da engenharia. Assim, para que essa representação periódica seja consistente, é necessário que o contorno do EVR esteja composto por N pares de conjuntos iguais de lados

$$\partial\Omega_\mu = \bigcup_{j=1}^N (\Gamma_j^+, \Gamma_j^-), \quad (3.61)$$

tais que, cada ponto $\mathbf{y}^+ \in \Gamma_j^+$ possua seu correspondente $\mathbf{y}^- \in \Gamma_j^-$, e que as normais aos lados do contorno (Γ_j^+, Γ_j^-) nos pontos $(\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-)$ satisfaçam

$$\mathbf{n}_j^+ = -\mathbf{n}_j^-. \quad (3.62)$$

Os exemplos mais comuns de formas para os EVR periódicos são as quadradas, retangulares e hexagonais, veja Fig. 3.3.

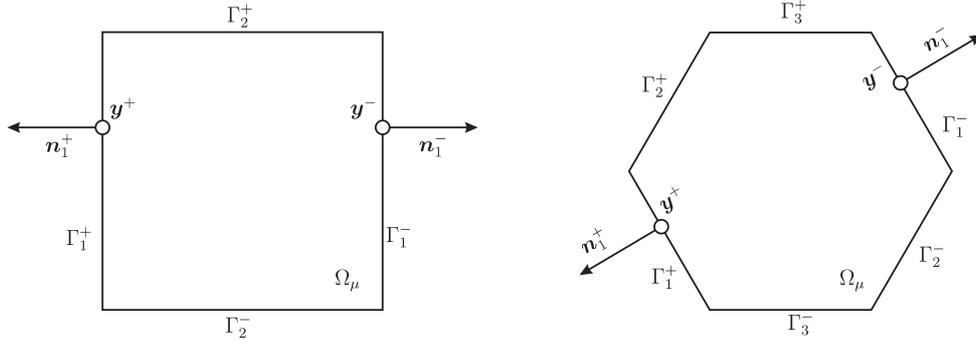


Figura 3.3: geometrias do EVR periódico - células quadradas e hexagonais.

Então, com as considerações geométricas estabelecidas acima, o espaço \mathcal{V}_μ para o modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR é definido por

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}} := \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ par } (\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-) \in \partial\Omega_\mu \right\}. \quad (3.63)$$

Levando em conta a definição do espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}}$ apresentada anteriormente, é simples verificar que a condição dada pela eq.(3.24) é satisfeita. De fato, basta constatar que é cumprida a condição dada pela eq.(3.20). Então, tendo assumido a partição geométrica para o contorno do EVR, a restrição para o espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes_s \mathbf{n} dS &= \sum_{j=0}^N \left[\int_{\Gamma_j^+} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) \otimes_s \mathbf{n}_j^+ dS + \int_{\Gamma_j^-} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \otimes_s \mathbf{n}_j^- dS \right] \\ &= \sum_{j=0}^N \left[\int_{\Gamma_j^+} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) \otimes_s \mathbf{n}_j^+ dS - \int_{\Gamma_j^+} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \otimes_s \mathbf{n}_j^+ dS \right] = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Da mesma maneira que no modelo anterior, observa-se que somente o campo de forças de corpo nulo é ortogonal ao espaço escolhido para as flutuações virtuais de deslocamento, ou seja,

$$\mathbf{b}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (3.65)$$

Por outro lado, o campo de trações externas aplicado ao contorno $\partial\Omega_\mu$ e ortogonal a $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{P}}$ (a fim de satisfazer a restrição (3.33)₂) deve necessariamente ser um campo de tração anti-periódica em $\partial\Omega_\mu$, ou seja, \mathbf{g}_μ satisfaz

$$\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y}^+) = -\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ par } (\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-) \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.66)$$

3.1.6.4 Modelo de tração uniforme no contorno do EVR

Esta classe de modelo é construída sob a hipótese da mínima restrição cinemática no EVR. Portanto, a escolha feita para o espaço das variações cinematicamente admissíveis é definida como

$$\mathcal{V}_\mu = \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}} := \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*. \quad (3.67)$$

Mais uma vez, apenas o campo de forças de corpo nulo satisfazem a condição de ortogonalidade (3.33) com o espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}}$, ou seja,

$$\mathbf{b}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu. \quad (3.68)$$

No caso da tração externa ortogonal ao espaço das flutuações de deslocamentos virtuais cinematicamente admissíveis, pode-se mostrar que satisfaz a condição de tração uniforme no contorno do EVR:

$$\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{T}_\mu \mathbf{n}(\mathbf{y}) = \mathbf{T} \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu, \quad (3.69)$$

onde \mathbf{T} é o tensor tensão macroscópica (3.26) associado ao ponto \mathbf{x} do macro-contínuo. Isto quer dizer que a tração externa compatível com o modelo aqui apresentado é *uniforme* no contorno do EVR. A validade da expressão anterior pode ser demonstrada. De fato:

Proposição 4. *Sob a hipótese da mínima restrição cinemática no EVR, tem-se como consequência neste modelo constitutivo multi-escala que a tração externa satisfaz a seguinte identidade*

$$\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{T} \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu, \quad (3.70)$$

onde \mathbf{T} é o tensor tensão macroscópica associado ao ponto \mathbf{x} do macro-contínuo.

Prova. Inicialmente observa-se que a tração externa pode ser escrita, como

$$\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{T}_\mu \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu, \quad (3.71)$$

mas, de forma que qualquer $\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y})$ pertença ao espaço ortogonal $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}}$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \cdot \boldsymbol{\eta} dS &= \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta} dS \\ &= \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot (\boldsymbol{\eta} \otimes_s \mathbf{n}) dS = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Empregando a técnica de decomposição de campos microscópicos, a tensão microscópica no EVR pode ser escrita, em hipótese, como uma soma

$$\mathbf{T}_\mu = \bar{\mathbf{T}}_\mu + \tilde{\mathbf{T}}_\mu, \quad (3.73)$$

de uma parcela constante em \mathbf{y} , $\bar{\mathbf{T}}_\mu$, e uma flutuação de tensão microscópica $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ tal que,

no caso bi-dimensional²,

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \left[\tilde{T}_{\mu_n}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \tilde{T}_{\mu_s}(\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) \right] dS = \mathbf{0}, \quad (3.74)$$

onde \tilde{T}_{μ_n} e \tilde{T}_{μ_s} são, respectivamente, a componente normal e cisalhante do tensor $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ na base local ortonormal orientada nas direções dos vetores normal e tangencial (\mathbf{n}, \mathbf{t}) definida no contorno $\partial\Omega_\mu$,

$$\tilde{T}_{\mu_n} := \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}), \quad \tilde{T}_{\mu_s} := \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot (\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}). \quad (3.75)$$

Por outro lado, associado ao campo de tensão arbitrário \mathbf{T}_μ , é possível definir o tensor de segunda ordem Ψ como

$$\Psi := \int_{\partial\Omega_\mu} [T_{\mu_n}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + T_{\mu_s}(\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n})] dS, \quad (3.76)$$

onde T_{μ_n} e T_{μ_s} são, respectivamente, a componente normal e cisalhante do tensor \mathbf{T}_μ relativa à base (\mathbf{n}, \mathbf{t}) . Introduzindo a decomposição aditiva do campo de tensão microscópica na definição estabelecida anteriormente para o tensor Ψ , tem-se

$$\begin{aligned} \Psi &= \int_{\partial\Omega_\mu} \left[(\bar{T}_{\mu_n} + \tilde{T}_{\mu_n})(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + (\bar{T}_{\mu_s} + \tilde{T}_{\mu_s})(\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) \right] dS \\ &= \int_{\partial\Omega_\mu} \left\{ [\bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n})](\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + [\bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot (\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n})](\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) \right\} dS \\ &\quad + \int_{\partial\Omega_\mu} \left[\tilde{T}_{\mu_n}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \tilde{T}_{\mu_s}(\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) \right] dS \\ &= \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n} \otimes \mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) dS \bar{\mathbf{T}}_\mu \\ &\quad + \int_{\partial\Omega_\mu} \left[\tilde{T}_{\mu_n}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \tilde{T}_{\mu_s}(\mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) \right] dS. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Lembrando a definição dos escalares \tilde{T}_{μ_n} e \tilde{T}_{μ_s} , a expressão anterior pode ser escrita como

$$\Psi = \mathbb{R} \bar{\mathbf{T}}_\mu, \quad (3.78)$$

onde o tensor de quarta ordem \mathbb{R} é definido como

$$\mathbb{R} := \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n} \otimes \mathbf{t} \otimes_s \mathbf{n}) dS, \quad (3.79)$$

e depende exclusivamente da geometria do contorno do EVR. Sendo que o tensor \mathbb{R} é invertível para qualquer contorno fechado $\partial\Omega_\mu$, a decomposição aditiva apresentada na eq.(3.73) é de fato possível pois

$$\bar{\mathbf{T}}_\mu = \mathbb{R}^{-1} \Psi, \quad \Rightarrow \quad \tilde{\mathbf{T}}_\mu = \mathbf{T}_\mu - \bar{\mathbf{T}}_\mu. \quad (3.80)$$

²Por simplicidade, a prova é focada no caso bi-dimensional. Para o caso tri-dimensional o procedimento é totalmente análogo.

Considere agora o campo vetorial

$$\boldsymbol{\eta}^* := \tilde{T}_{\mu_n} \mathbf{n} + \tilde{T}_{\mu_s} \mathbf{t}, \quad (3.81)$$

da definição anterior é simples observar que $\boldsymbol{\eta}^* \in \mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}}$. Então, levando em conta a decomposição aditiva do campo de tensão e o campo $\boldsymbol{\eta}^*$ na condição de ortogonalidade dada pela eq.(3.33), tem-se

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot (\boldsymbol{\eta}^* \otimes_s \mathbf{n}) dS &= \bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot \int_{\partial\Omega_\mu} \boldsymbol{\eta}^* \otimes_s \mathbf{n} dS + \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot (\boldsymbol{\eta}^* \otimes_s \mathbf{n}) dS \\ &= \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{T}_{\mu_n}^2 dS + \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{T}_{\mu_s}^2 dS = 0. \end{aligned} \quad (3.82)$$

A identidade anterior implica em

$$\tilde{T}_{\mu_n} = \tilde{T}_{\mu_s} = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.83)$$

Finalmente, foi provado que a tração externa no contorno do EVR para o presente modelo é constante e dada por

$$\mathbf{g}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{T}_\mu \mathbf{n}(\mathbf{y}) = \bar{\mathbf{T}}_\mu \mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu. \quad (3.84)$$

Para completar a prova, considere a definição da homogeneização mostrada em (3.30) em termos da tração externa e das forças de corpo,

$$\mathbf{T} = \frac{1}{V_\mu} \left(\int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \otimes_s \mathbf{y} dS - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \otimes_s \mathbf{y} dV \right), \quad (3.85)$$

levando em conta que as forças de corpo são nulas e em vista do resultado (3.84) a tensão macroscópica pode ser escrita como

$$\mathbf{T} = \frac{1}{V_\mu} \left(\int_{\partial\Omega_\mu} \bar{\mathbf{T}}_\mu \mathbf{n} \otimes_s \mathbf{y} dS \right) = \frac{1}{V_\mu} \bar{\mathbf{T}}_\mu \left(\int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{n} \otimes_s \mathbf{y} dS \right) = \bar{\mathbf{T}}_\mu \mathbf{I} = \bar{\mathbf{T}}_\mu, \quad (3.86)$$

o que encerra a demonstração da proposição. ■

Note que na presente formulação variacional do modelo de mínima restrição cinemática, a restrição sobre a tração externa mostrada na eq.(3.69) é uma **conseqüência** da escolha feita para o espaço $\mathcal{V}_\mu^{\mathcal{M}}$ e não pode ser imposta a priori. Devido à condição estabelecida na eq.(3.69) esta classe de modelo é conhecido como *modelo de tração uniforme no contorno*.

Observação 26. *Os modelos desenvolvidos nas seções anteriores são apresentados de maneira resumida no quadro abaixo:*

(a) *Modelo de Taylor*

$$\mathcal{V}_\mu^T := \{\mathbf{0}\}.$$

(b) *Modelo de deslocamento linear no contorno*

$$\mathcal{V}_\mu^L := \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0}, \forall \mathbf{y} \in \partial\Omega_\mu \right\}.$$

(c) *Modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno*

$$\mathcal{V}_\mu^P := \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^* : \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-), \forall \text{par } (\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-) \in \partial\Omega_\mu \right\}.$$

(d) *Modelo de tração externa uniforme no contorno*

$$\mathcal{V}_\mu^M := \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*.$$

Um fato importante que deve ser notado é que os modelos ora apresentados diferem entre si pela escolha feita para o espaço das variações admissíveis $\mathcal{V}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*$. Do quadro acima é simples ver a seguinte relação entre os espaços propostos para os modelos obtidos,

$$\mathcal{V}_\mu^T \subset \mathcal{V}_\mu^L \subset \mathcal{V}_\mu^P \subset \mathcal{V}_\mu^M. \quad (3.87)$$

Daí segue que o modelo de Taylor e da tração externa uniforme no contorno fornecem os limites superior e inferior, respectivamente, para todas as possíveis escolhas das restrições cinemáticas para o espaço das variações admissíveis.

Observação 27. Nos modelos constitutivos multi-escala apresentados anteriormente, foi provado que, exceto no modelo de Taylor, as forças de corpo no EVR, compatíveis com a modelagem proposta, são necessariamente nula, ou seja, $\mathbf{b}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0}$. Portanto, a tensão homogeneizada (3.30) é obtida a partir da tração externa \mathbf{g}_μ como

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\partial\Omega_\mu} \mathbf{g}_\mu \otimes_s \mathbf{y} dS. \quad (3.88)$$

Note-se a simplicidade da expressão final para a tensão homogeneizada, o que torna fácil sua implementação computacional. No caso do modelo de Taylor, a tensão macroscópica é calculada diretamente empregando a eq.(3.56).

3.1.7 Tensor de elasticidade homogeneizado

Na modelagem multi-escala proposta nas seções anteriores foi mostrado como utilizar a informação da macro-escala, neste caso a deformação macroscópica \mathbf{E} , para obter o campo de deslocamento microscópico \mathbf{u}_μ – utilizando o que foi chamado de campo de flutuações de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, solução do problema (3.46) ou (3.48). No entanto, esta metodologia não fica restrita ao cálculo do campo de deslocamento microscópico e pode ser estendida visando obter a resposta constitutiva macroscópica do EVR, independentemente da deformação macroscópica associada ao ponto material \mathbf{x} . Portanto,

nesta seção é apresentada uma formulação que permite obter o tensor de elasticidade macroscópico empregando os mesmos conceitos da técnica de modelagem multi-escala discutida anteriormente.

Introduzindo a cinemática do modelo de elasticidade linear (3.7) e levando em conta a relação constitutiva (3.42), a equação variacional (3.46) pode ser escrita equivalentemente como

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = - \int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \mathbf{E} \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.89)$$

Devido à linearidade do problema (3.89) a flutuação do deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ pode ser construída a partir de uma combinação linear das componentes cartesianas da deformação macroscópica, como sugerido por Michel *et al.* (1999) [81], da seguinte forma

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu = (\mathbf{E})_{ij} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}, \quad (3.90)$$

sendo $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}$, com $i, j = 1..2$, os campos vetoriais conhecidos como flutuações tangenciais de deslocamento e os escalares $(\mathbf{E})_{ij}$ são as componentes cartesianas da deformação macroscópica, dadas por $(\mathbf{E})_{ij} = \mathbf{E} \cdot (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j)$. Cada $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}$ representa a derivada do campo de flutuações de deslocamento do EVR em relação à componente da deformação macroscópica na direção do elemento da base \mathbf{e}_i . Por outro lado, a deformação macroscópica pode ser escrita em suas componentes cartesianas da seguinte forma

$$\mathbf{E} = (\mathbf{E})_{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j). \quad (3.91)$$

Então, substituindo a expressão anterior e a decomposição (3.90) no funcional (3.89) tem-se

$$(\mathbf{E})_{ij} \left(\int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij} \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV \right) = - (\mathbf{E})_{ij} \left(\int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV \right) \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu, \quad (3.92)$$

o que resulta no seguinte conjunto de problemas variacionais: encontre $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu$ (para $i, j = 1, 2$ no caso bidimensional), tal que

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij} \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = - \int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu. \quad (3.93)$$

Assim, as funções vetoriais $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}$ que geram a base da combinação linear (3.90) são obtidas da resolução do sistema canônico de equações variacionais (3.93).

Por outro lado, levando em conta a separação aditiva do campo de tensão microscópica (3.45) e a relação constitutiva (3.42), o tensor tensão macroscópico pode ser escrito como

$$\mathbf{T} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \mathbf{E} dV + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \tilde{\mathbf{E}}_\mu dV. \quad (3.94)$$

Empregando a expressão (3.90), o funcional mostrado acima fica da seguinte maneira,

$$\mathbf{T} = \mathbb{C}^\mathcal{T} \mathbf{E} + \left(\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \tilde{\mathbf{E}}_{\mu ij} dV \right) (\mathbf{E})_{ij}, \quad (3.95)$$

sendo $\tilde{\mathbf{E}}_{\mu_{ij}}$ a flutuação de deformação associada às flutuações tangenciais de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_{ij}}$ e \mathbb{C}^T denota o tensor constitutivo homogeneizado associado ao modelo de Taylor definido da seguinte forma,

$$\mathbb{C}^T := \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu dV. \quad (3.96)$$

Mas, note que a aplicação tensorial $\mathbb{C}_\mu \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_{ij}}$ pode ser escrita como

$$\mathbb{C}_\mu \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_{ij}} = (\mathbb{C}_\mu)_{klpq} (\tilde{\mathbf{E}}_{\mu_{ij}})_{pq} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l), \quad (3.97)$$

e substituindo em (3.95) tem-se que o tensor tensão macroscópica pode ser re-escrito como uma soma da forma,

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbb{C}^T \mathbf{E} + \left(\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} (\mathbb{C}_\mu)_{klpq} (\tilde{\mathbf{E}}_{\mu_{ij}})_{pq} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) dV \right) \mathbf{E} \cdot (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \\ &= \mathbb{C}^T \mathbf{E} + \tilde{\mathbb{C}} \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (3.98)$$

onde o tensor constitutivo homogeneizado associado à parcela de flutuação $\tilde{\mathbb{C}}$ é definido como

$$\tilde{\mathbb{C}} = \left[\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} (\mathbb{C}_\mu)_{ijpq} (\tilde{\mathbf{E}}_{\mu_{kl}})_{pq} dV \right] (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) \quad (3.99)$$

$$= \left[\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_{kl}})_{ij} dV \right] (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l). \quad (3.100)$$

Finalmente, como o problema em estudo é linear, a tensão macroscópica \mathbf{T} pode ser representada através de uma relação constitutiva linear similar à mostrada em (3.42) e caracterizada pelo tensor constitutivo homogeneizado de quarta ordem \mathbb{C} , ou seja,

$$\mathbf{T} = \mathbb{C} \mathbf{E}. \quad (3.101)$$

Da comparação dos resultados anteriores, tem-se que o mencionado tensor constitutivo macroscópico \mathbb{C} está representado pela soma das contribuições da parcela associada à média volumétrica do tensor de elasticidade microscópico \mathbb{C}_μ e da parcela associada à flutuação de deformação microscópica $\tilde{\mathbb{C}}$, ou seja,

$$\mathbb{C} = \mathbb{C}^T + \tilde{\mathbb{C}}. \quad (3.102)$$

Note que somente a contribuição de $\tilde{\mathbb{C}}$ depende da escolha para o espaço \mathcal{V}_μ , através das flutuações tangenciais de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_{ij}}$. Cabe mencionar ainda que ambas as contribuições são independentes da deformação macroscópica. Obviamente, no caso do modelo de Taylor (onde $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_{ij}} = \mathbf{0}$ para qualquer direção ij) $\tilde{\mathbb{C}} = \mathbf{0}$ e a resposta constitutiva macroscópica é dada somente em termos da parcela associada à média volumétrica da resposta constitutiva microscópica, ou seja, $\mathbb{C} = \mathbb{C}^T$.

Observação 28. Como mencionado no início da seção, o tensor constitutivo homo-

geneizado \mathbb{C} é, portanto, completamente determinado pelas características do EVR através das soluções $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_{ij}}$ do conjunto de problemas variacionais (3.93), não dependendo da deformação macroscópica.

Observação 29. Considerando a propriedade de simetria dos tensores de deformação e tensão macroscópica, tem-se que o número de coeficientes elásticos independentes do tensor de elasticidade homogeneizado \mathbb{C} , é reduzido, no caso bidimensional, a 6. Assim, a equação constitutiva (3.101) pode ser escrita em forma matricial como

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{T})_{11} \\ (\mathbf{T})_{22} \\ (\mathbf{T})_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\mathbb{C})_{1111} & (\mathbb{C})_{1122} & (\mathbb{C})_{1112} \\ & (\mathbb{C})_{2222} & (\mathbb{C})_{2212} \\ sim. & & (\mathbb{C})_{1212} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\mathbf{E})_{11} \\ (\mathbf{E})_{22} \\ 2(\mathbf{E})_{12} \end{bmatrix}, \quad (3.103)$$

onde o fator de 2 multiplicando o termo associado ao efeito de cisalhamento no tensor deformação decorre do fato que a componente generalizada de tensão, em vista das propriedades de simetria ora mencionada, é escrita como

$$\begin{aligned} (\mathbf{T})_{ij} &= (\mathbb{C})_{ij11}(\mathbf{E})_{11} + (\mathbb{C})_{ij12}(\mathbf{E})_{12} + (\mathbb{C})_{ij21}(\mathbf{E})_{21} + (\mathbb{C})_{ij22}(\mathbf{E})_{22} \\ &= (\mathbb{C})_{ij11}(\mathbf{E})_{11} + 2(\mathbb{C})_{ij12}(\mathbf{E})_{12} + (\mathbb{C})_{ij22}(\mathbf{E})_{22}. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Cabe mencionar ainda que a forma matricial da tensão macroscópica, mostrada na eq.(3.103), permite escrever a resposta constitutiva \mathbb{C} (tensor de quarta ordem) como uma matriz simétrica de 3×3 elementos, como:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} (\mathbb{C})_{1111} & (\mathbb{C})_{1122} & (\mathbb{C})_{1112} \\ & (\mathbb{C})_{2222} & (\mathbb{C})_{2212} \\ sim. & & (\mathbb{C})_{1212} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{11} & \mathbf{C}_{12} & \mathbf{C}_{13} \\ & \mathbf{C}_{22} & \mathbf{C}_{23} \\ sim. & & \mathbf{C}_{33} \end{bmatrix}. \quad (3.105)$$

Essa representação matricial facilita consideravelmente a implementação computacional da modelagem constitutiva multi-escala adotada neste trabalho.

3.1.8 Implementação computacional

Complementando a modelagem constitutiva multi-escala discutida nas seções anteriores e descrita no contexto de um sólido contínuo, nesta seção é apresentada uma breve descrição sobre a implementação computacional dos modelos propostos. Em outras palavras, trata-se de forma detalhada a construção das versões discretas dos espaços das variações cinematicamente admissíveis para as flutuações de deslocamento microscópico para os diferentes modelos apresentados na Seção 3.1.6, no contexto das aproximações por elementos finitos. Encerrando a seção, discutem-se brevemente alguns aspectos computacionais.

3.1.8.1 Discretização por elementos finitos

Segundo mostrado anteriormente na Seção 3.1.5, a forma fraca do problema de equilíbrio é dada pela seguinte equação variacional: encontre o campo $\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu$, tal que

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbb{C}_\mu \nabla^s (\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu^*. \quad (3.106)$$

De maneira geral, as componentes do campo de flutuações de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ e das variações admissíveis $\boldsymbol{\eta}$ podem ser aproximadas, para uma malha de elementos finitos com N nós, por uma combinação lineal do tipo

$$(\tilde{\mathbf{u}}_\mu)_k = \sum_{j=1}^N (\tilde{\mathbf{u}}_\mu^j)_k \psi_j \quad \text{e} \quad (\boldsymbol{\eta})_k = \sum_{j=1}^N (\boldsymbol{\eta}^j)_k \psi_j, \quad (3.107)$$

onde $(\tilde{\mathbf{u}}_\mu^j)_k$ e $(\boldsymbol{\eta}^j)_k$, com $k = 1..2$ no caso bi-dimensional, são, respectivamente, os valores nodais das componentes do campo de flutuações de deslocamento e das variações cinematicamente admissíveis e ψ_j denota as clássicas funções de interpolação globais para cada componente k . Com a discretização proposta acima para as componentes dos campos microscópicos $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ e $\boldsymbol{\eta}$, a expressão (3.106) pode ser escrita em forma discreta como

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{D} \mathbf{B} (\tilde{\mathbf{u}}_{hp} + \tilde{\mathbf{u}}_{hp}) \cdot \mathbf{B} \boldsymbol{\eta}_{hp} dV = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu, \quad (3.108)$$

com \mathbf{D} denotando a matriz da resposta constitutiva no domínio do EVR, a matriz \mathbf{B} contém as derivadas cartesianas das funções de interpolação ψ_j para cada componente k , $\tilde{\mathbf{u}}_{hp} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ é o vetor associado aos valores nodais da flutuação de deslocamento microscópico (sendo que $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ é versão discreta do espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu$ associada à aproximação proposta), o vetor $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ contém o produto $(\mathbf{E}\mathbf{y})|_j$ avaliado em cada nó j da malha de elementos finitos e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ é o vetor que possui os valores nodais associados às variações cinematicamente admissíveis. Aqui os índices $h \in (0, 1] \subset \mathfrak{R}$ e $p \in \mathcal{N}$ denotam a dependência da aproximação com os parâmetros h , que define o tamanho característico dos elementos finitos, e p associado à ordem polinomial das funções que geram a base da aproximação (3.107). Finalmente, a solução por elementos finitos do problema (3.106) consiste em resolver o seguinte sistema algébrico de equações

$$(\mathbf{f}_{hp} + \mathbf{K}_{hp} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}) \cdot \boldsymbol{\eta}_{hp} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} \subset \tilde{\mathcal{K}}_\mu, \quad (3.109)$$

para o vetor de incógnitas nodais generalizado $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$, onde \mathbf{f}_{hp} e \mathbf{K}_{hp} são, respectivamente, o vetor de carregamento nodal generalizado e a matriz de rigidez global, dados por

$$\mathbf{K}_{hp} = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dV \quad \text{e} \quad \mathbf{f}_{hp} = \mathbf{K}_{hp} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}. \quad (3.110)$$

No caso do modelo de deslocamento linear no contorno do EVR, desenvolvido na Seção 3.1.6.2, a solução do problema (3.106) segue o caminho clássico dos problemas de elasticidade linear. Basta apenas prescrever o valor zero aos graus de liberdade associa-

dos às flutuações de deslocamento no contorno. No entanto, para os modelos de flutuação periódica de deslocamento (Seção 3.1.6.3) e da mínima restrição cinemática (Seção 3.1.6.4), as condições de contorno no EVR são não locais. A principal diferença reside na geração do espaço discreto para as flutuações de deslocamento admissíveis e virtuais, cujas restrições são descritas de forma não convencional. Em seguida, portanto, é brevemente descrita a discretização do espaço de elementos finitos, colocando em evidência as condições de contorno em termos dos graus de liberdade nodais para os modelos analisados anteriormente.

Modelo de deslocamento linear no contorno. Como mencionado anteriormente, o modelo de flutuação de deslocamento nula no contorno não requer comentários adicionais, pois pode ser implementado seguindo o caminho clássico dos problemas de elasticidade linear. Em seguida, portanto, é apresentada uma breve discussão acerca da implementação computacional alternativa para esta classe de modelos, seguindo uma estrutura similar à que será empregada na implementação dos modelos de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR e da mínima restrição cinemática. Considere, então, que o espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ das flutuações de deslocamento admissíveis pode ser definido como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \left\{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^b)^T : \mathbf{v}^b = \mathbf{0} \right\}, \quad (3.111)$$

onde \mathbf{v}^i , \mathbf{v}^b denotam os vetores contendo, respectivamente, os graus de liberdade interiores e do contorno do EVR. Dividindo, portanto, a matriz \mathbf{K}_{hp} e os vetores \mathbf{f}_{hp} , $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ da mesma forma que \mathbf{v} , tem-se que a equação (3.109) pode ser escrita como

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^b \end{array} \right) + \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{ib} \\ \hline \mathbf{k}_{hp}^{bi} & \mathbf{k}_{hp}^{bb} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^b \end{array} \right) \right\} \cdot \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^b \end{array} \right) = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^b. \quad (3.112)$$

Introduzindo a restrição do espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ sobre os graus de liberdade do contorno do EVR, a expressão acima se reduz a

$$\left\{ \mathbf{f}_{hp}^i + \mathbf{k}_{hp}^{ii} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \right\} \cdot \boldsymbol{\eta}_{hp}^i = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i. \quad (3.113)$$

Levando em conta a arbitrariedade de $\boldsymbol{\eta}_{hp}^i$, a equação discreta do equilíbrio para os graus de liberdade interiores é dada pelo seguinte sistema de equações algébricas para o vetor $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i$

$$\mathbf{k}_{hp}^{ii} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i = -\mathbf{f}_{hp}^i. \quad (3.114)$$

Como mencionado, o sistema de equações algébricas anterior fornece a solução associada aos graus de liberdade interiores do EVR. Levando em conta, portanto, a decomposição e restrição mostrada na definição do espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$, eq.(3.111), o vetor flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ é dado por

$$\tilde{\mathbf{u}}_{hp} = (\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i | \mathbf{0})^T. \quad (3.115)$$

Modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno. Para o modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno, a geometria do EVR deve respeitar as

restrições previstas na Seção 3.1.6.3. Neste caso, é conveniente assumir³ que cada nó do contorno i^+ , com coordenada \mathbf{y}_i^+ , tem um par i^- , com coordenada \mathbf{y}_i^- , como mostrado na Fig.3.4. Com as condições mencionadas anteriormente, o espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$ das flutuações de deslocamento cinematicamente admissíveis pode ser definido como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^+ | \mathbf{v}^-)^T : \mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- \}, \quad (3.116)$$

onde \mathbf{v}^i , \mathbf{v}^+ e \mathbf{v}^- denotam os vetores contendo, respectivamente, os graus de liberdade interiores do EVR e das partes Γ^+ e Γ^- do contorno do EVR, ou seja,

$$\Gamma^+ = \bigcup_{j=1}^N \Gamma_j^+ \quad \text{e} \quad \Gamma^- = \bigcup_{j=1}^N \Gamma_j^-, \quad \text{tal que} \quad \Gamma^+ \cup \Gamma^- = \partial\Omega_\mu. \quad (3.117)$$

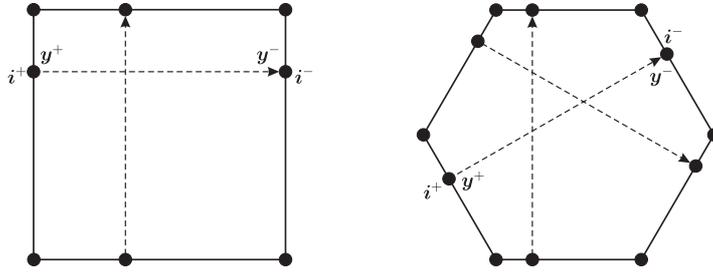


Figura 3.4: geometrias discretas para os EVR periódicos.

Ao dividir \mathbf{f}_{hp} , \mathbf{k}_{hp} , $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ na mesma forma que \mathbf{v} e levando em conta a definição (3.116), lembrando que $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}$ pertencem ao espaço $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$, a expressão (3.109) assume a forma

$$\left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^+ \\ \mathbf{f}_{hp}^- \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{i+} & \mathbf{k}_{hp}^{i-} \\ \mathbf{k}_{hp}^{+i} & \mathbf{k}_{hp}^{++} & \mathbf{k}_{hp}^{+-} \\ \mathbf{k}_{hp}^{-i} & \mathbf{k}_{hp}^{-+} & \mathbf{k}_{hp}^{--} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^- \end{pmatrix} \right\} \cdot \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^+ \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^- \end{pmatrix} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^+. \quad (3.118)$$

Considerando a repetição de $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}^+$ nos vetores dos graus de liberdade nodais, a equação discreta do equilíbrio (3.118) se reduz à seguinte forma

$$\left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^+ + \mathbf{f}_{hp}^- \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{i+} + \mathbf{k}_{hp}^{i-} \\ \mathbf{k}_{hp}^{+i} + \mathbf{k}_{hp}^{-i} & \mathbf{k}_{hp}^{++} + \mathbf{k}_{hp}^{-+} + \mathbf{k}_{hp}^{--} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ \end{pmatrix} \right\} \cdot \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^+ \end{pmatrix} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^+, \quad (3.119)$$

que, em vista da arbitrariedade de $\boldsymbol{\eta}_{hp}^i$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}^+$, tem-se o seguinte sistema linear de equações algébricas para os vetores $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i$ e $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+$,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{i+} + \mathbf{k}_{hp}^{i-} \\ \mathbf{k}_{hp}^{+i} + \mathbf{k}_{hp}^{-i} & \mathbf{k}_{hp}^{++} + \mathbf{k}_{hp}^{-+} + \mathbf{k}_{hp}^{--} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^+ + \mathbf{f}_{hp}^- \end{pmatrix}. \quad (3.120)$$

Finalmente, com a solução do sistema de equações algébricas anterior e levando em conta

³Esta hipótese não é necessária, mas simplifica consideravelmente a implementação do modelo com elementos finitos.

a decomposição apresentada na definição do espaço discreto $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$, eq.(3.116), o vetor flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ é dado por

$$\tilde{\mathbf{u}}_{hp} = (\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i | \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+ | \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^+)^T. \quad (3.121)$$

Modelo de tração uniforme no contorno do EVR. Para este modelo é seguido um procedimento completamente análogo ao anterior, visando obter o conjunto final de equações algébricas de elementos finitos sob a hipótese de mínima restrição cinemática (tração uniforme no contorno do EVR). Para começar, considere a seguinte definição da contraparte discreta do espaço das flutuações de deslocamento admissíveis e virtuais:

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \left\{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^b)^T : \int_{\partial\Omega_\mu^h} (\Phi_b \mathbf{v}^b) \otimes_s \mathbf{n} d\partial\Omega_\mu = \mathbf{0} \right\}, \quad (3.122)$$

sendo \mathbf{v}^b é o vetor que contém os graus de liberdade do contorno e Φ_b a matriz das funções de interpolação globais associadas unicamente com os nós do contorno do EVR discretizado. Do espaço mostrado em (3.122), é simples ver que a restrição integral sobre \mathbf{v}^b pode ser escrita equivalentemente em forma matricial como

$$\mathbf{C} \mathbf{v}^b = \mathbf{0}, \quad (3.123)$$

onde \mathbf{C} é a *matriz de restrição* sobre os graus de liberdade do contorno do EVR. Para um EVR discretizado com k nós interiores e m nós no contorno, no caso bidimensional \mathbf{v}^b é um vetor de dimensão $2m$ e \mathbf{C} é uma matriz de dimensão $3 \times 2m$ dada por

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+1} n_1 d\partial\Omega_\mu & 0 & \cdots & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+m} n_1 d\partial\Omega_\mu & 0 \\ 0 & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+1} n_2 d\partial\Omega_\mu & \cdots & 0 & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+m} n_2 d\partial\Omega_\mu \\ \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+1} n_2 d\partial\Omega_\mu & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+1} n_1 d\partial\Omega_\mu & \cdots & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+m} n_2 d\partial\Omega_\mu & \int_{\partial\Omega_\mu^h} \Phi_{k+m} n_1 d\partial\Omega_\mu \end{bmatrix}, \quad (3.124)$$

note que n_1 e n_2 denotam as componentes do campo vetorial \mathbf{n} , normal ao contorno $\partial\Omega_\mu$, associadas à base global ortonormal $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ e Φ_j , $j = 1, \dots, m$, são as funções de forma globais associadas aos nós do contorno. Neste caso, a equação (3.123) fornece três restrições lineares sobre a quantidade total dos $2m$ graus de liberdade no contorno discreto do EVR. Para EVR tridimensionais, as dimensões do vetor \mathbf{v}^b e das matriz \mathbf{C} são, respectivamente, $3m$ e $6 \times 3m$. No contexto usual de elementos finitos, em vez de utilizar funções de forma globais, a matriz \mathbf{C} é obtida da montagem de matrizes elementares que em duas dimensões, para um elemento e com p nós na intersecção $\Gamma^{(e)}$ do contorno do elemento com o contorno do EVR, é da forma

$$\mathbf{C}^{(e)} = \begin{bmatrix} \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_1^{(e)} n_1 d\partial\Omega_\mu & 0 & \cdots & \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_p^{(e)} n_1 d\partial\Omega_\mu & 0 \\ 0 & \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_1^{(e)} n_2 d\partial\Omega_\mu & \cdots & 0 & \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_p^{(e)} n_2 d\partial\Omega_\mu \\ \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_1^{(e)} n_2 d\partial\Omega_\mu & \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_1^{(e)} n_1 d\partial\Omega_\mu & \cdots & \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_p^{(e)} n_2 d\partial\Omega_\mu & \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_p^{(e)} n_1 d\partial\Omega_\mu \end{bmatrix}, \quad (3.125)$$

na expressão anterior foi assumido que os nós do elemento e que estão em $\Gamma^{(e)}$ são localmente numerados de 1 a p e $\Phi_j^{(e)}$, $j = 1, \dots, p$, são as funções de forma locais associadas ao nó j . Por exemplo, as matrizes para os elementos triangulares convencionais com três e seis nós, tendo um único lado reto de comprimento $l^{(e)}$ e, no caso do elemento triangular de seis nós, três nós igualmente espaçados intersectando o contorno do EVR, são dadas por

$$\mathbf{C}_{T3}^{(e)} = \frac{l^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} n_1 & 0 & n_1 & 0 \\ 0 & n_2 & 0 & n_2 \\ \frac{1}{2}n_2 & \frac{1}{2}n_1 & \frac{1}{2}n_2 & \frac{1}{2}n_1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_{T6}^{(e)} = \frac{l^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} n_1 & 0 & 4n_1 & 0 & n_1 & 0 \\ 0 & n_2 & 0 & 4n_2 & 0 & n_2 \\ \frac{1}{2}n_2 & \frac{1}{2}n_1 & 2n_2 & 2n_1 & \frac{1}{2}n_2 & \frac{1}{2}n_1 \end{bmatrix}. \quad (3.126)$$

A fim de lidar com a restrição (3.123) sobre o espaço discreto das flutuações admissíveis e virtuais de deslocamento é conveniente dividir \mathbf{v}^b como

$$\mathbf{v}^b = (\mathbf{v}^f | \mathbf{v}^d | \mathbf{v}^p)^T, \quad (3.127)$$

onde os sub-índices f , d e p denotam, respectivamente, os graus de liberdade livres, dependentes e prescritos no contorno discreto do EVR. Conseqüentemente, a matriz de restrição global é particionada como

$$\mathbf{C} = \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{C}^f & \mathbf{C}^d & \mathbf{C}^p \end{array} \right], \quad (3.128)$$

tal que a equação da restrição integral (3.123) fica

$$\left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{C}^f & \mathbf{C}^d & \mathbf{C}^p \end{array} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{v}^f \\ -\mathbf{v}^d \\ \mathbf{v}^p \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (3.129)$$

O problema de equilíbrio discreto (3.109) é totalmente determinado a menos de uma constante. Portanto, é necessário prescrever graus de liberdade para tornar o problema (3.109) bem posto. Trivialmente, sem perda de generalidade, é prescrito

$$\mathbf{v}^p = \mathbf{0}, \quad (3.130)$$

onde, no caso bi e tridimensional, \mathbf{v}^p contém três e seis graus de liberdade, respectivamente, convenientemente escolhidos. Assim, a equação de restrição se reduz a

$$\left[\begin{array}{c|c} \mathbf{C}^f & \mathbf{C}^d \end{array} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{v}^f \\ -\mathbf{v}^d \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (3.131)$$

Em duas dimensões, o resultado anterior representa três equações escalares envolvendo $2m - 3$ variáveis, e no caso tridimensional são seis equações escalares com $3m - 6$ variáveis. Finalmente, o vetor \mathbf{v}^d pode ser escrito em termos de \mathbf{v}^f como

$$\mathbf{v}^d = \mathbf{R}\mathbf{v}^f, \quad \text{com} \quad \mathbf{R} = -(\mathbf{C}^d)^{-1}\mathbf{C}^f. \quad (3.132)$$

Note que os graus de liberdade dependentes (correspondentes a \mathbf{v}^d) devem ser escolhidos tal que a matriz \mathbf{C}^d seja inversível. Levando em conta as considerações anteriores, o espaço discreto (3.122) pode ser redefinido como

$$\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp} := \left\{ \mathbf{v} = (\mathbf{v}^i | \mathbf{v}^f | \mathbf{v}^d)^T : \mathbf{v}^d = \mathbf{R}\mathbf{v}^f \right\}, \quad (3.133)$$

que, por conveniência, contém apenas os graus de liberdade não prescritos. A equação de elementos finitos (3.109) para o modelo da mínima restrição cinemática é obtida, analogamente a (3.118), dividindo os vetores e matrizes de acordo com a partição mostrada anteriormente e levando em conta (3.133). Assim, o sistema de equações fica

$$\left\{ \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^f \\ \mathbf{f}_{hp}^d \end{array} \right) + \left[\begin{array}{c|c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{if} & \mathbf{k}_{hp}^{id} \\ \mathbf{k}_{hp}^{fi} & \mathbf{k}_{hp}^{ff} & \mathbf{k}_{hp}^{fd} \\ \mathbf{k}_{hp}^{di} & \mathbf{k}_{hp}^{df} & \mathbf{k}_{hp}^{dd} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f \\ \mathbf{R}\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f \end{array} \right) \right\} \cdot \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{\eta}_{hp}^i \\ \boldsymbol{\eta}_{hp}^f \\ \mathbf{R}\boldsymbol{\eta}_{hp}^f \end{array} \right) = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}_{hp}^i, \boldsymbol{\eta}_{hp}^f, \quad (3.134)$$

que finalmente, em vista da arbitrariedade de $\boldsymbol{\eta}_{hp}^i$ e $\boldsymbol{\eta}_{hp}^f$, é reduzido no seguinte sistema linear de equações algébricas para os vetores $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i$ e $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f$

$$\left[\begin{array}{c|c} \mathbf{k}_{hp}^{ii} & \mathbf{k}_{hp}^{if} + \mathbf{k}_{hp}^{id}\mathbf{R} \\ \mathbf{k}_{hp}^{fi} + \mathbf{R}^T\mathbf{k}_{hp}^{di} & \mathbf{k}_{hp}^{ff} + \mathbf{k}_{hp}^{fd}\mathbf{R} + \mathbf{R}^T\mathbf{k}_{hp}^{df} + \mathbf{R}^T\mathbf{k}_{hp}^{dd}\mathbf{R} \end{array} \right] \left(\begin{array}{c} \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i \\ \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f \end{array} \right) = - \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{hp}^i \\ \mathbf{f}_{hp}^f + \mathbf{R}^T\mathbf{f}_{hp}^d \end{array} \right). \quad (3.135)$$

Com a solução associada aos graus de liberdade interiores e livres, obtidos do sistema de equações algébricas anterior, e a decomposição proposta em (3.122) e (3.133), o vetor flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_{hp}$ pode ser construído, finalmente, como

$$\tilde{\mathbf{u}}_{hp} = (\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^i | \tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f | \mathbf{R}\tilde{\mathbf{u}}_{hp}^f | \mathbf{0})^T. \quad (3.136)$$

3.1.8.2 Aspectos computacionais

A resolução numérico-computacional dos modelos constitutivos multi-escala apresentados na Seção 3.1.6 não segue o caminho clássico do método dos elementos finitos, devido ao fato de ter que impor as restrições cinemáticas do espaço das variações admissíveis \mathcal{V}_μ em sua versão discreta \mathcal{V}_μ^{hp} (ou $\tilde{\mathcal{K}}_\mu^{hp}$). Portanto, não é possível utilizar os códigos de programas de elementos finitos usuais (ou comerciais, se for o caso). Este fato motivou o desenvolvimento da técnica de implementação computacional – no contexto dos elementos finitos – apresentada na seção anterior.

Visando utilizar os espaços usuais para as funções de interpolação de elementos finitos, na seção anterior foi proposta uma técnica que introduz as restrições dos espaços discretos na própria construção do sistema de equações algébricas. Com isso, é possível utilizar os espaços de elementos finitos convencionais nesta técnica de modelagem constitutiva multi-escala. No entanto, esta forma de construir os espaços discretos de elementos finitos leva um esforço computacional a mais na identificação dos graus de liberdade que permitem a separação da matriz de rigidez global \mathbf{K}_{hp} e o vetor de carregamentos nodais generalizados \mathbf{f}_{hp} , nas sub-matrizes e sub-vetores necessários para re-escrever o sistema de equações algébricas. Como os graus de liberdade que devem ser identificados variam para

cada modelo multi-escala, em seguida é mostrado um breve resumo:

- Modelo de deslocamento linear no contorno: interiores (i) e no contorno (b);
- Modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno: interiores (i) e nas partes Γ^+ e Γ^- do contorno (+ e -);
- Modelo de tração uniforme no contorno: interiores (i) e no contorno (f – livres, d – dependentes e p – prescritos).

No entanto, existem outras maneiras para colocar o problema no contexto tradicional dos elementos finitos. Estas outras possibilidades de introduzir as restrições dos espaços das variações admissíveis no problema são as seguintes:

- Uso de multiplicadores de Lagrange.
- Modificação da matriz de rigidez global introduzindo as restrições com a mesma técnica empregada na colocação de condições de contorno não locais.

Por questões que excedem o objetivo deste trabalho, as alternativas mencionadas anteriormente para a introdução das restrições dos espaços no problema não são aqui desenvolvidas. Finalmente, cabe mencionar que toda a implementação computacional do método dos elementos finitos, necessária para o desenvolvimento deste trabalho foi realizada em MatLab[®].

3.1.9 Experimentos numéricos

Empregando a implementação computacional associada à modelagem constitutiva multi-escala proposta neste capítulo e discutida na seção anterior, agora são apresentados um conjunto de exemplos numéricos acerca da aplicação desta classe de modelos. Em particular, através de exemplos simples procura-se mostrar as vantagens desta modelagem em relação aos modelos constitutivos clássicos encontrados na literatura.

3.1.9.1 Exemplo 1

Na literatura especializada na modelagem de materiais compostos, existem limites teóricos (superior e inferior) para os parâmetros elásticos efetivos macroscópicos de uma determinada microestrutura. Em particular, para um material composto por uma matriz na qual estão inseridas fibras alinhadas numa direção preferencial, os limites superior e inferior são comumente conhecidos como limites de Voigt-Reuss, Voigt (1889) [132] e Reuss (1929) [103]. Assim, o modelo de Voigt foi desenvolvido levando em conta que as fibras estão posicionadas de forma paralela à direção da deformação e quando as fibras estão perpendiculares à mencionada direção se obtém o modelo de Reuss. Alternativamente, os modelos de Voigt e Reuss são chamados, respectivamente, de médias de deformação

uniforme e de tensão uniforme (*isostrain* e *isostress*). Então, para os modelos mencionados anteriormente, o parâmetro elástico efetivo do meio M_e é obtido como

$$\text{Modelo de Voigt} \Rightarrow M_e = \sum_{j=1}^N f_j M_j, \quad (3.137)$$

$$\text{Modelo de Reuss} \Rightarrow \frac{1}{M_e} = \sum_{j=1}^N \frac{f_j}{M_j}, \quad (3.138)$$

onde M_j e f_j são, respectivamente, o parâmetro elástico e a fração de volume de cada uma das N fases do meio tal que, na ausência de vazios, $\sum_{j=1}^N f_j = 1$. Matematicamente o parâmetro elástico M , nas expressões acima, pode ser qualquer módulo: módulo volumétrico, módulo cisalhante, módulo de Young, etc. No entanto, na literatura especializada em parâmetros elásticos efetivos é recomendado empregar os modelos de Voigt-Reuss somente no módulo cisalhante μ e no módulo volumétrico K e, então, obter os outros módulos ou parâmetros elásticos efetivos, como por exemplo o módulo de Young E ou coeficiente de Poisson ν , empregando as relações usuais da elasticidade linear. Para uma discussão mais detalhada acerca desses aspectos pode-se mencionar os livros de Avserth *et al.* (2005) [12] e Canuta (2006) [23]. As mencionadas relações da elasticidade linear podem ser escritas como:

$$K = \frac{E}{1 - 2\nu} \quad \text{e} \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (3.139)$$

Assim sendo, neste primeiro exemplo serão comparados os modelos (3.137) e (3.138) com o modelagem constitutiva multi-escala adotada neste capítulo. Tomando como referência para a direção principal de deformação o eixo horizontal, os EVRs usados na análise numérica são caracterizados através de uma micro-célula quadrada de tamanho unitário, com camadas de material de largura variável chamadas de fibras e inseridas numa matriz de um material diferente, como mostrado na Fig.3.5. Na Tabela 3.1 são apresentados os parâmetros elásticos que caracterizam os materiais utilizados na modelagem computacional, esses valores foram obtidos de Poniznik *et al.* (2008) [101] aonde os autores estudam os parâmetros elásticos efetivos de um composto metal-cerâmico.

	Material	E (GPa)	ν	μ (GPa)	K (GPa)
Matriz Metálica (<i>m</i>)	Alumina - Al ₂ O ₃	390	0.20	162,5	216,7
Fibras (<i>f</i>)	Cobre - Cu	110	0.35	40,7	122,2

Tabela 3.1: exemplo 1 - propriedades físicas dos materiais.

A malha de elementos finitos utilizada na discretização do domínio de análise contém elementos triangulares lineares (3 nós por elemento) da ordem de $2,3 \times 10^4$, distribuídos uniformemente no domínio com um total de nós da ordem de $1,17 \times 10^4$.

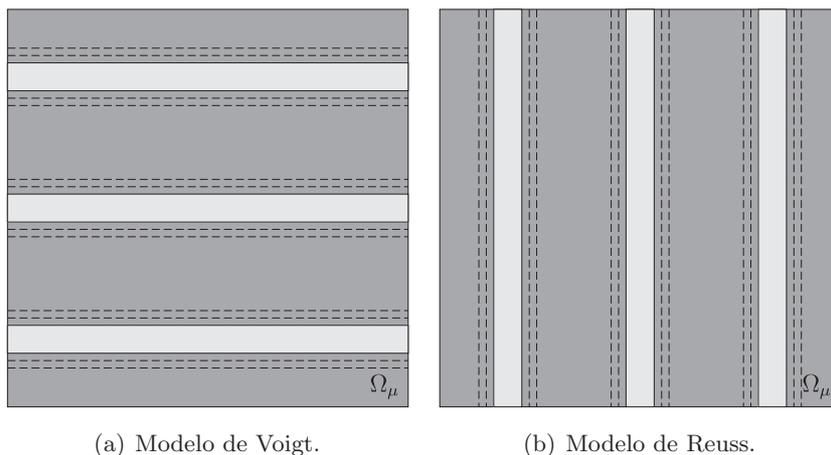


Figura 3.5: exemplo 1 - geometria dos EVRs estudados.

Levando em conta a discussão anterior, acerca do uso dos modelos de Voigt-Reuss, na Fig.3.6 são apresentados os resultados da análise computacional e a comparação com os modelos teóricos mostrados nas eqs.(3.137) e (3.138). Nessa figura está sendo apresentada no eixo das ordenadas a relação entre o parâmetro efetivo e sua contraparte elástica associada ao material da matriz, e no eixo das abscissas é colocada a fração de volume das fibras f_f .

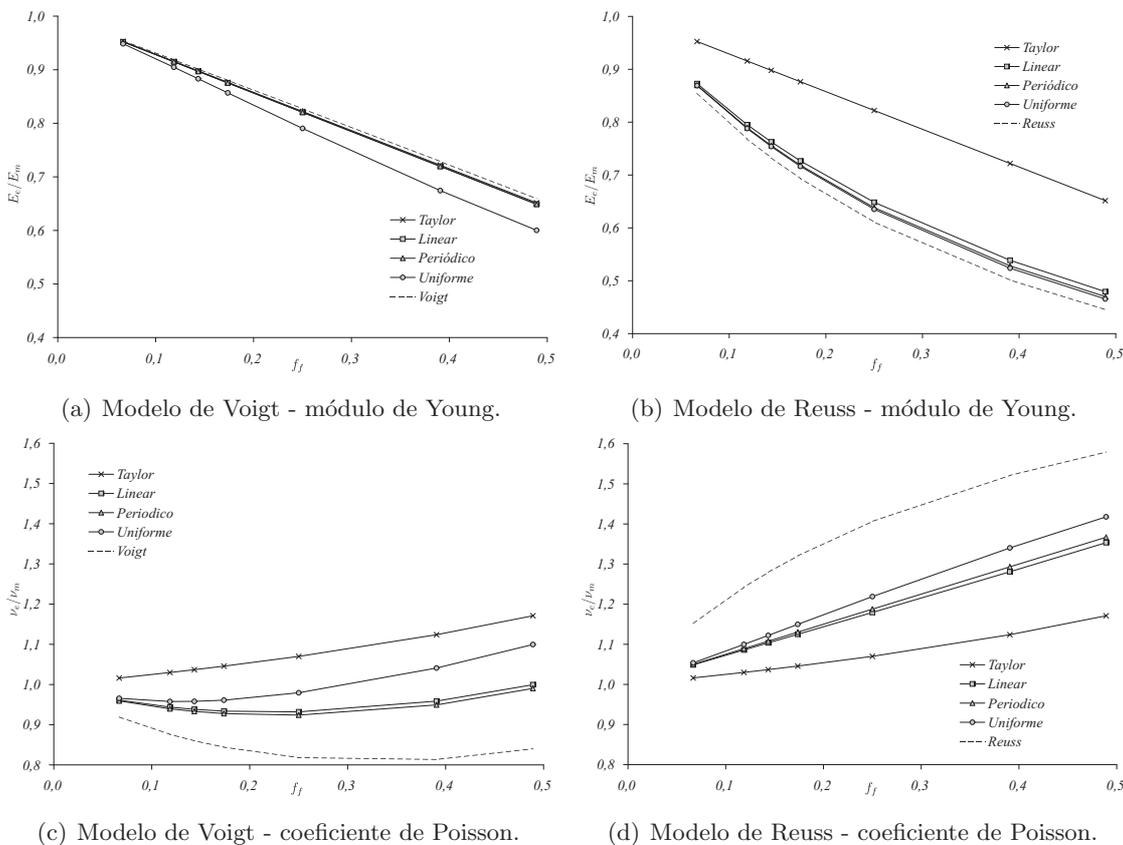


Figura 3.6: exemplo 1 - resultados e comparação com os modelos teóricos.

Dos resultados mostrados anteriormente, observa-se que a modelagem constitutiva multi-escala adotada neste capítulo captura adequadamente o comportamento do módulo

de Young efetivo dos modelos teóricos, eqs.(3.137) e (3.138), sem ter que impor a *priori*, na formulação do modelo, a forma e distribuição das fibras na matriz. No entanto, note-se que para o coeficiente de Poisson efetivo as diferenças entre a modelagem constitutiva multi-escala e os modelos teóricos de Voigt-Reuss são apreciáveis, mas é importante lembrar que os modelos de Voigt-Reuss fornecem os limites superiores e inferiores para o mencionado parâmetro e da Figs.3.6(c) e 3.6(d), observa-se que nenhum dos modelos multi-escala ultrapassas esses limites.

Observação 30. *Para uma discussão e análise mais detalhada acerca do comportamento e validade dos modelos de Voigt-Reuss para estimar o coeficiente de Poisson efetivo do meio, pode-se citar os livros de Markov (2000) [76], Avserth et al. (2005) [12], Canuta (2006) [23] e o trabalho de Poniznik et al. (2008) [101].*

3.1.9.2 Exemplo 2

Na modelagem de materiais compósitos é de interesse o estudo de materiais cujas micro-estruturas são reforçadas com inclusões circulares de material com uma rigidez maior que a da matriz. Portanto, neste segundo exemplo é estudada uma micro-estrutura quadrada de dimensões unitárias constituída por uma matriz na qual estão inseridas 8 inclusões circulares de raio variável distribuídas aleatoriamente no domínio da micro-célula, Fig.3.7. Para esta classe de micro-estruturas foi desenvolvido pelos pesquisadores Hashin e Shtrikman, Hashin & Shtrikman (1963) [52], uma solução exata para os limites superior e inferior do módulo volumétrico K e do módulo cisalhante μ . Esse modelo foi desenvolvido sob a hipótese de que uma matriz é preenchida por um conjunto de esferas, tal que a resposta constitutiva macroscópica da mistura descrita anteriormente seja isotrópica. Então, quando a micro-célula é caracterizada por uma mistura de dois constituintes (matriz e inclusão), os limites de Hashin-Shtrikman são dados por

$$K^{HS} = K_m + f_i \left[\frac{1}{K_i - K_m} + \frac{3f_m}{3K_m + 4\mu_m} \right]^{-1}, \quad (3.140)$$

$$\mu^{HS} = \mu_m + f_i \left[\frac{1}{\mu_i - \mu_m} + \frac{6f_m(K_m + 2\mu_m)}{5\mu_m(3K_m + 4\mu_m)} \right]^{-1}, \quad (3.141)$$

onde os sub-índices m e i denotam o parâmetro associado à matriz ou inclusão, respectivamente. Os limites superiores e inferiores são obtidos das expressões anteriores intercambiando os índices da matriz e inclusão. Em particular, as frações de volume satisfazem, na ausência de vazios, a relação $f_m + f_i = 1$.

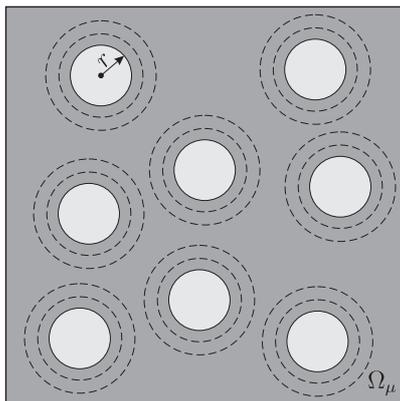


Figura 3.7: exemplo 2 - geometria do EVR.

De forma similar ao tratado no exemplo anterior para os limites de Voigt-Reuss, uma vez que os parâmetros efetivos do meio são obtidos com as expressões (3.140) e (3.141), os limites para o módulo de Young e o coeficiente de Poisson podem ser calculados empregando as relações usuais da elasticidade linear mostradas na eq.(3.139). Cabe mencionar ainda que para o caso particular do coeficiente de Poisson efetivo as observações feitas no exemplo anterior permanecem válidas para o presente estudo (veja Avserth *et al.* (2005) [12] e Canuta (2006) [23]). Para caracterizar os materiais que compõem a matriz e as inclusões, são utilizados os parâmetros elásticos apresentados na Tabela 3.2. Esses parâmetros foram obtidos de Böhm *et al.* (2002) [19], aonde os autores estudam a resposta efetiva, em termos dos parâmetros elásticos, de uma matriz metálica reforçada com inclusões esféricas. Na discretização do domínio de análise foram empregados 22400 elementos finitos triangulares lineares (3 nós por elementos) distribuídos uniformemente no domínio com um total de 11401 nós.

	E (GPa)	ν	σ_y (MPa)	σ_f (MPa)
Matriz metálica (A12618-T4)	70	0.30	184	–
Inclusões de reforço (SiC)	450	0.17	–	1.0

Tabela 3.2: exemplo 2 - propriedades físicas dos materiais.

Cabe mencionar que a resposta constitutiva macroscópica do EVR apresentado anteriormente pode não ser totalmente isotrópica para alguma das frações de volume de inclusão analisadas. Assim, para possibilitar a comparação desejada com o modelo teórico, os módulos volumétrico efetivo K_e e cisalhante efetivo μ_e , associados à modelagem constitutiva multi-escala estudada nesta seção, são obtidos como a média desses parâmetros efetivos nas duas direções ortogonais do sistema de coordenadas cartesiano, ou seja, admite-se que a resposta constitutiva macroscópica possa ser levemente ortotrópica. Então, e em vista do comentário anterior, na Fig.3.8 são apresentados os resultados obtidos para cada modelo multi-escala e a comparação com os limites de Hashin-Shtrikman. Em particular, no eixo das ordenadas está sendo desenhado a relação entre o parâmetro efetivo e sua contraparte elástica associada ao material da matriz e no eixo das abscissas é colocada a fração de volume das inclusões f_i .

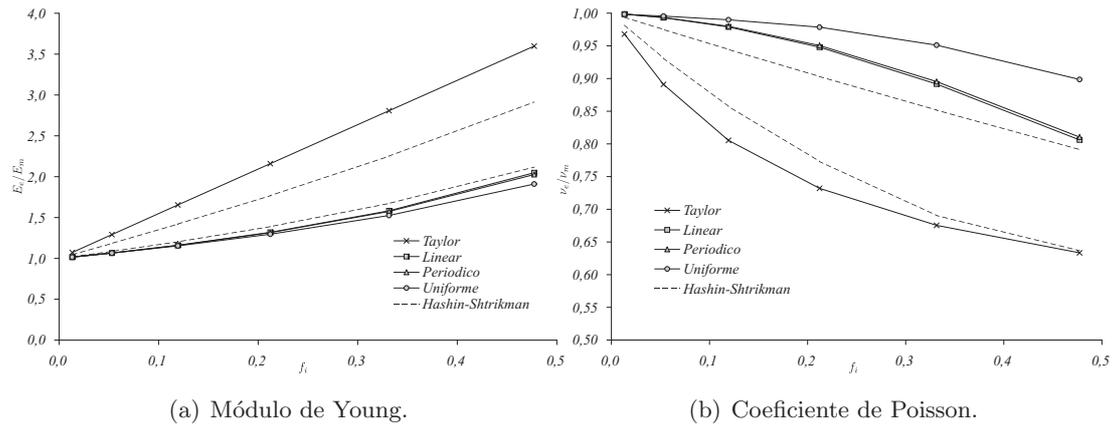


Figura 3.8: exemplo 2 - resultados e comparação com os modelos teóricos.

Observa-se ainda na Fig.3.8 que, para o valor efetivo do Módulo de Young, existe uma pequena diferença (no limite inferior) entre os resultados da modelagem constitutiva multi-escala apresentada nesta seção e a estimativa calculada pelo modelo de Hashin-Shtrikman. Essa diferença pode ser explicada pelo fato de que a resposta constitutiva macroscópica do EVR não é totalmente isotrópica, portanto a hipótese sob a qual foi construído o modelo teórico não é satisfeita num sentido estrito. Quanto ao limite superior, o resultado obtido é o esperado, pois o modelo de Taylor gera a resposta mais rígida possível para este tipo de material (veja na Seção 3.1.6 as características do modelo baseado na regra da mistura). Quanto à resposta efetiva obtida para o coeficiente de Poisson, observa-se que os modelos constitutivos multi-escala ultrapassam os limites teóricos, pois a resposta constitutiva macroscópica não é estritamente isotrópica. Assim, as hipóteses do modelo teórico não são totalmente satisfeitas, gerando, portanto, as discrepâncias nos resultados apresentados na Fig.3.8(b). Para uma discussão mais detalhada acerca do comportamento e validade desta classe de modelos teóricos na estimativa do coeficiente de Poisson efetivo do meio, pode-se mencionar os livros de Markov (2000) [76], Avserth *et al.* (2005) [12] e Canuta (2006) [23].

3.1.9.3 Exemplo 3

Na modelagem computacional do comportamento constitutivo de materiais, uma das questões mais importante é a qualidade dos resultados numéricos obtidos com uma técnica determinada. Assim, visando demonstrar as capacidades preditivas da modelagem constitutiva multi-escala empregada neste trabalho, agora se propõe comparar os valores do módulo de Young obtidos em experiências de laboratório com a técnica computacional mencionada anteriormente. Portanto, serão utilizados como referências os valores experimentais apresentados por Pabst *et al.* (2005) [99] (Tabela 3.3), no qual os autores obtêm em laboratório o valor do módulo de Young efetivo de um material composto metal-cerâmico para várias frações de volume de inclusões cerâmicas. Em particular, o material estudado pelos autores em laboratório possui uma matriz densa de alumina (porosidade inferior a 3%) com inclusões de zircônia.

Na simulação numérica serão estudados três EVRs quadrados de tamanho unitários com diferentes quantidades e distribuições das inclusões, para várias frações de volume:

	E (GPa)	G (GPa)	K (GPa)	ρ (g cm ⁻³)
Matriz metálica (<i>m</i>) Alumina - Al ₂ O ₃	400 ± 2%	163 ± 1%	247 ± 1%	4.0 ± 1%
Inclusões (<i>i</i>) Zirconia - Y ₂ O ₃	210 ± 4%	80 ± 2%	184 ± 2%	6.1 ± 0.6%

Tabela 3.3: exemplo 3 - propriedades físicas dos constituintes do material composto.

- Caso A: uma única inclusão centrada de raio r variável (Fig.3.9(a)) no domínio Ω_μ , discretizado com uma malha uniforme de elementos finitos triangulares lineares (3 nós por elemento) com um total de 11730 nós e 23058 elementos.
- Caso B: 8 inclusões de raio variável r , distribuídas de forma aleatória no domínio Ω_μ (Fig.3.9(b)), discretizado com uma malha de elementos finitos uniforme possuindo 22400 elementos triangulares lineares (3 nós por elemento) e 11401 nós.
- Caso C: 31 inclusões de raio r variável, distribuídas de forma aleatória no domínio Ω_μ (Fig.3.9(c)), discretizado com uma malha de elementos finitos uniforme possuindo 23722 elementos triangulares lineares (3 nós por elemento) e 12062 nós.

Na determinação do módulo de Young efetivo será utilizado o mesmo procedimento descrito no exemplo anterior, onde o valor do parâmetro efetivo E_e é obtido empregando o desenvolvimento apresentado na Seção 3.1.7. Logo, na Fig.3.10 são mostrados os resultados obtidos para os Casos A, B e C, e a comparação com os dados experimentais. Cabe mencionar que para uma detalhada descrição do procedimento utilizado para mensurar o parâmetro efetivo em laboratório o leitor se deve referir a Pabst *et al.* (2005) [99].

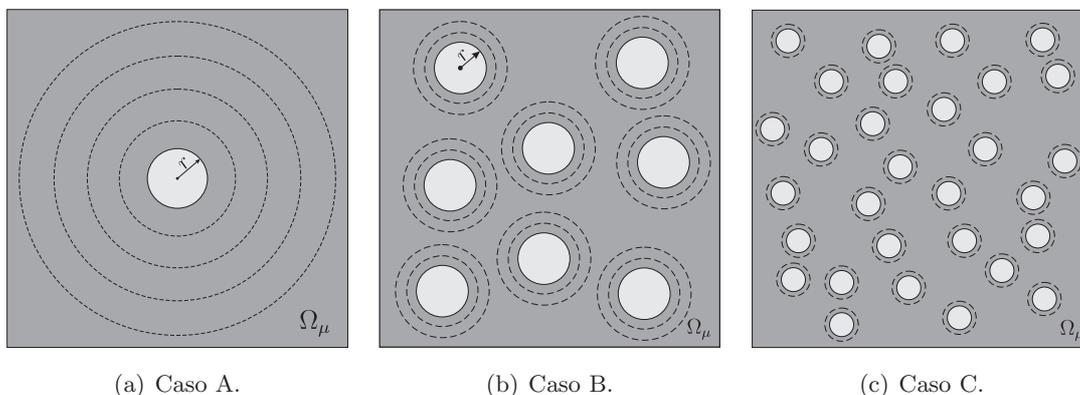
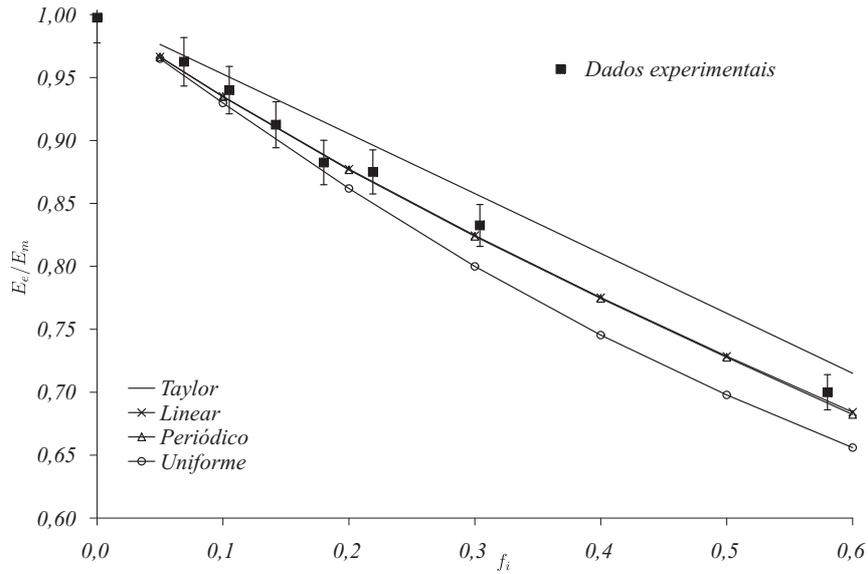
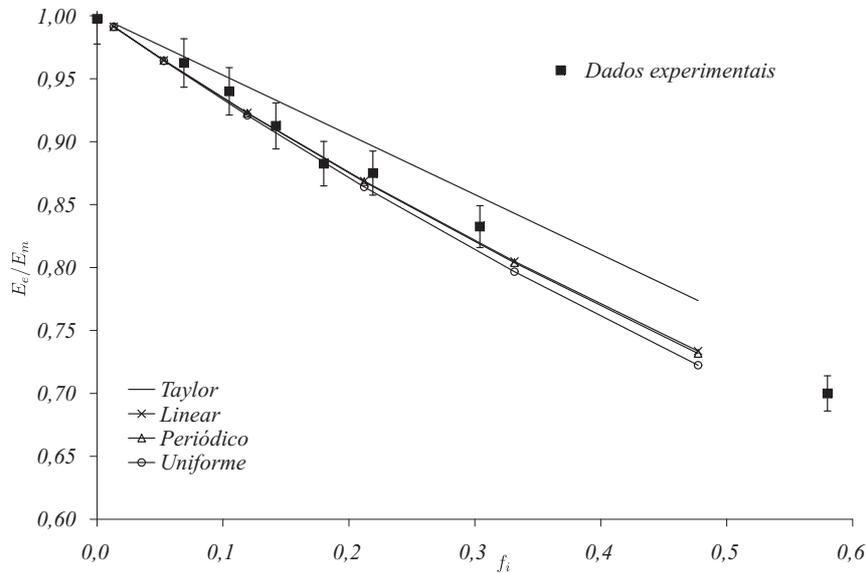


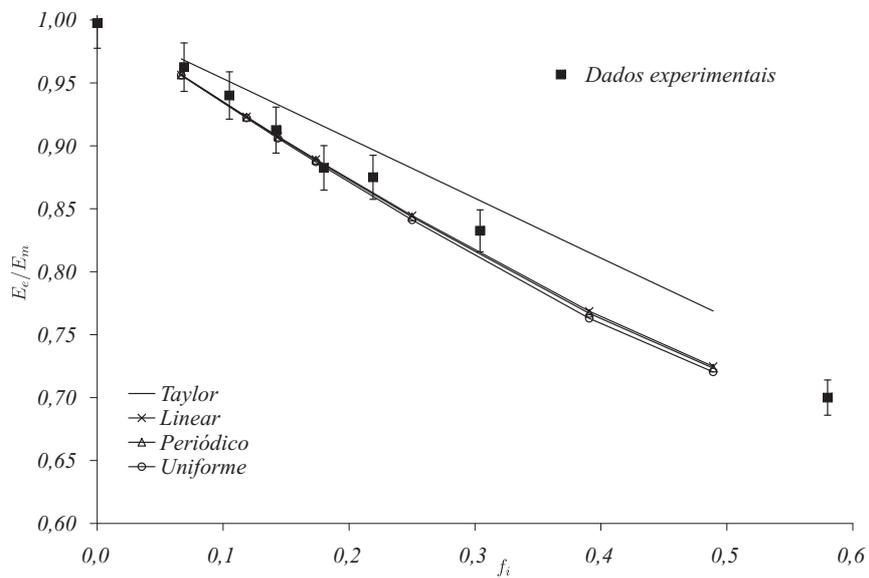
Figura 3.9: exemplo 3 - geometrias dos EVRs estudados.



(a) Caso A.



(b) Caso B.



(c) Caso C.

Figura 3.10: exemplo 3 - resultados e comparação com dados experimentais.

Da comparação apresentada anteriormente na Fig.3.10, observa-se que os dados experimentais estão contidos dentro dos limites superior e inferior fornecidos pela modelagem multi-escala adotada neste trabalho. Em particular, observa-se que o modelo de deslocamento linear no contorno fornece a melhor aproximação entre os diferentes modelos constitutivos multi-escala e as medidas obtidas experimentalmente. Sendo assim, é possível afirmar que esta classe de modelos fornece uma estimativa adequada e útil da resposta constitutiva efetiva (macroscópica) de um material real, evidenciando a capacidade preditiva dos modelos multi-escalas.

Observação 31. *Embora a diferença entre os diferentes modelos constitutivos multi-escala seja apreciável, não existe uma variação relativa importante dos resultados entre os diferentes EVR analisados (Caso A, B e C). O que permite afirmar que a resposta constitutiva macroscópica é mais sensível à variação da fração de volume f_i que da própria distribuição espacial das inclusões; sempre que as inclusões não estejam alinhadas numa direção preferencial, introduzindo uma ortotropia na resposta macroscópica da microcélula.*

3.1.9.4 Exemplo 4

Existem materiais compostos com propriedade macroscópicas muito particulares como é o caso do coeficiente de Poisson negativo. Esse tipo de propriedade é obtido de conformações micro-estruturais muito complexas e tem sido objeto de muitas pesquisas na área da ciência dos materiais, como pode ser visto, por exemplos, nos trabalhos pioneiros de Almgreen (1985) [1], Lakes (1987a) [68], Lakes (1987b) [69] e Prall & Lakes (1997) [102]. Cabe mencionar que cada um dos materiais constituintes dessas micro-estruturas pode ser modelado através de materiais elásticos e isotrópicos (com coeficientes de Poisson positivos), sendo que somente no nível macroscópico exibem essa característica particular. Assim sendo, neste exemplo apresenta-se o estudo de uma micro-célula caracterizada por um quadrado unitário e constituída por uma matriz reforçada com uma inclusão com forma de estrela com cantos re-entrantes (Theocaris *et al.* (1997) [125]), como mostrado nas Figs.3.11(a) e 3.11(b). O objetivo do estudo é mostrar a variação do coeficiente de Poisson efetivo (macroscópico) em relação aos módulos de Young da matriz e da inclusão, respectivamente, para os modelos constitutivos multi-escala apresentados na Seção 3.1.7.

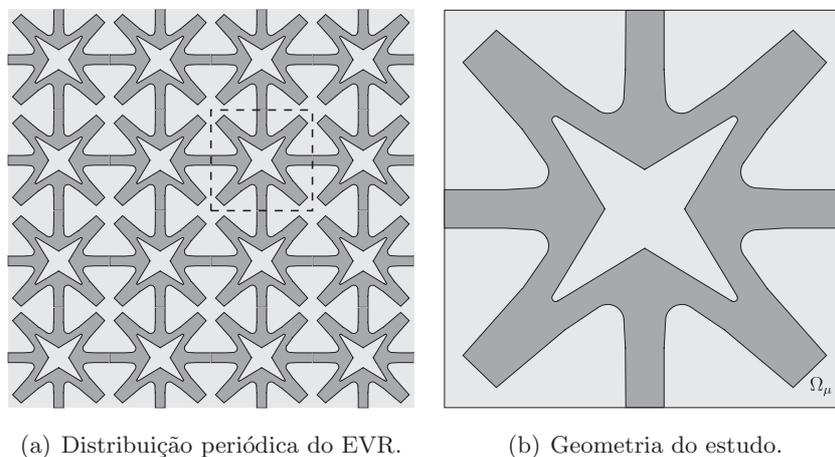


Figura 3.11: exemplo 4 - geometria do EVR.

O estudo é conduzido para uma matriz cujo material é caracterizado por um módulo de Young $E_m = 100.0$ GPa e um coeficiente de Poisson $\nu_m = 0.3$. Para o material da inclusão – reforço do material composto – será considerado um coeficiente de Poisson $\nu_i = 0.3$ e diferentes valores para o módulo de Young, variando desde $E_i = 1.0$ GPa até $E_i = 1.0 \times 10^5$ GPa. O domínio do EVR apresentado anteriormente foi discretizado com 22168 elementos finitos triangulares lineares (3 nós por elemento) distribuídos uniformemente, gerando um total de 11285 nós. Na determinação do coeficiente de Poisson efetivo ν_e foi utilizado o mesmo procedimento que nos exemplos anteriores, ou seja, partindo do comportamento macroscópico, o coeficiente de Poisson efetivo é obtido utilizando as relações usuais da elasticidade linear. A variação do referido valor efetivo ν_e em relação ao cociente E_i/E_m é apresentado na Fig.3.12.

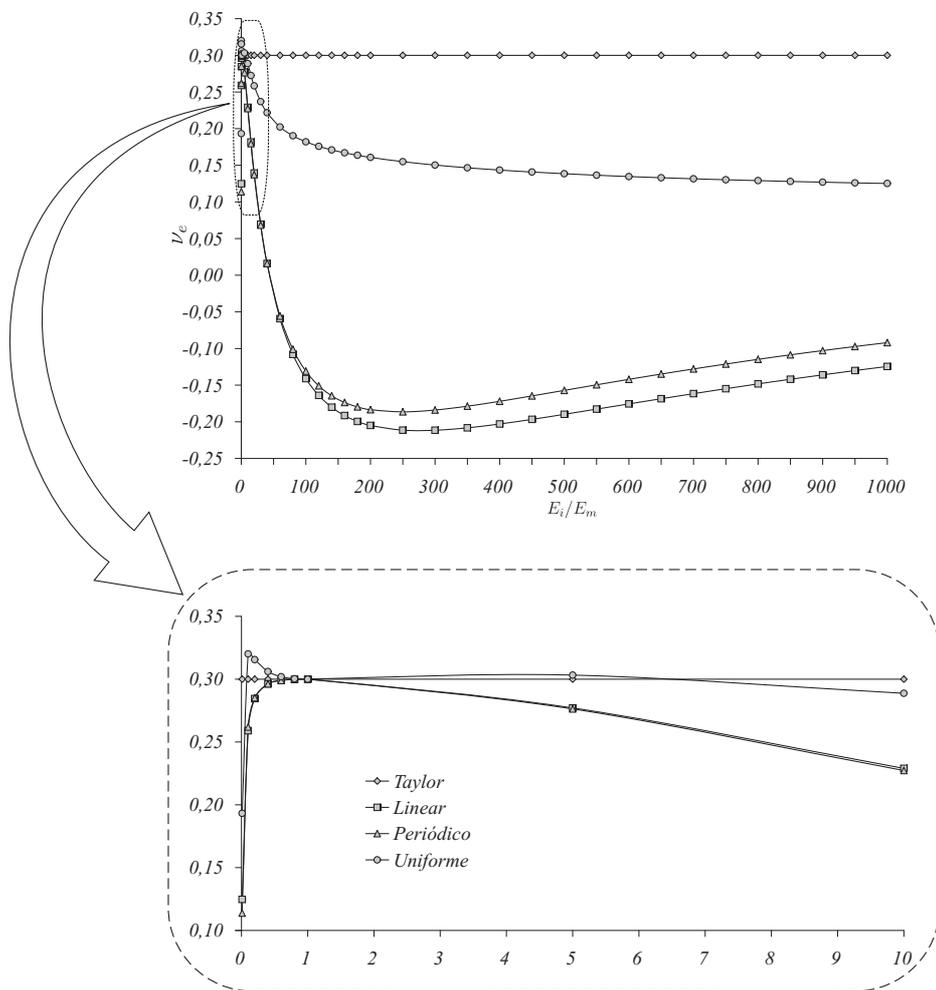


Figura 3.12: exemplo 4- resultados obtidos.

Observa-se, pelos resultados apresentados anteriormente, que o coeficiente de Poisson macroscópico permanece positivo para uma relação $E_i/E_m < 50$. Acima desse limite esse parâmetro fica negativo para os modelos de flutuação periódica de deslocamento e deslocamento linear no contorno do EVR. No entanto, para o modelo de tração uniforme no contorno, o valor de ν_e é sempre positivo, tendendo assintoticamente a um valor constante. Para o modelo de Taylor (regra da mistura) o valor efetivo do coeficiente de Poisson é um

valor constante igual a 0.3. No caso do modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR, resultados similares aos mostrados na Fig.3.12 são encontrados na literatura especializada, como pode ser visto em Theocaris *et al.* (1997) [125].

3.1.9.5 Exemplo 5

Os exemplos apresentados anteriormente foram desenvolvidos para mostrar diferentes aspectos no uso da modelagem constitutiva multi-escala adotada neste trabalho. Mas, em situações mais gerais da modelagem computacional, nem sempre é possível simular o comportamento constitutivo de um material através de seus parâmetros efetivos. De fato, necessita-se do tensor elástico homogeneizado que representa a resposta constitutiva macroscópica da micro-estrutura do material estudado. Por essa razão, neste último exemplo será mostrado que através da modelagem constitutiva multi-escala adotada neste trabalho é possível obter o tensor elástico homogeneizado \mathbb{C} , que caracteriza a resposta constitutiva macroscópica de uma dada micro-estrutura do EVR, necessário na modelagem ao nível macroscópico do material estudado.

A micro-estrutura analisada é dada por um domínio quadrado de dimensões unitárias constituída por uma matriz na qual estão inseridas uma inclusão circular de raio $r = 0.12$, centrada no ponto de coordenadas $(0.19, 0.11)$, tomando como origem do sistema o canto inferior esquerdo, e uma inclusão elíptica centrada no ponto de coordenadas cartesianas $(0.69, 0.67)$, com o semi-eixo maior de comprimento $a = 0.25$ orientado na direção horizontal e o semi-eixo menor de comprimento $b = 0.10$, segundo mostrado na Fig.3.13. Na simulação computacional foram utilizados para caracterizar os materiais da matriz e inclusões, os seguintes parâmetros: (i) módulo de Young: matriz: $E_m = 100.0$ GPa, inclusões: $E_i = 5.0$ GPa; (ii) coeficiente de Poisson: matriz: $\nu_m = 0.3$, inclusões $\nu_m = 0.17$. Na resolução numérica foi utilizada uma malha de elementos finitos uniforme com 11816 nós e 23230 elementos triangulares lineares (3 nós por elemento). Os resultados são apresentados na Fig.3.13.

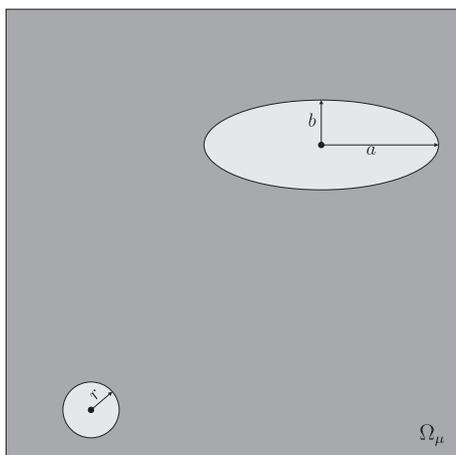


Figura 3.13: exemplo 5 - geometria do EVR.

$$\mathbb{C}^T = \begin{bmatrix} 100.576 & 30.113 & 0 \\ 30.113 & 100.576 & 0 \\ 0 & 0 & 35.231 \end{bmatrix},$$

$$\mathbb{C}^L = \begin{bmatrix} 94.700 & 24.163 & -0.154 \\ 24.163 & 78.698 & -0.217 \\ -0.154 & -0.217 & 31.116 \end{bmatrix},$$

$$\mathbb{C}^P = \begin{bmatrix} 93.789 & 24.203 & 0.003 \\ 24.203 & 75.099 & 0.010 \\ 0.003 & 0.010 & 29.298 \end{bmatrix},$$

$$\mathbb{C}^M = \begin{bmatrix} 91.801 & 24.014 & -0.033 \\ 24.014 & 65.520 & 0.564 \\ -0.033 & 0.564 & 26.293 \end{bmatrix}.$$

3.2 Análise de sensibilidade topológica

Como mencionado no início do capítulo, para estabelecer a sensibilidade da resposta constitutiva macroscópica em relação a uma perturbação singular na micro-estrutura do EVR serão utilizados os conceitos da análise de sensibilidade topológica propostos, entre outros, por Sokołowski & Żochowski (1999) [116], Cea *et al.* (2000) [26] e Novotny *et al.* (2003) [92]. Esta expansão assintótica topológica fornece a sensibilidade de um funcional de forma em relação a uma perturbação infinitesimal, caracterizada por um parâmetro ε , na topologia do domínio de definição do problema. O principal termo dessa expansão é a chamada derivada topológica, cujo cálculo é uns dos principais objetivos deste trabalho. De fato, nesta seção é apresentado o desenvolvimento matemático e o cálculo da mencionada derivada topológica para o modelo constitutivo multi-escala de elasticidade linear em materiais com comportamento isotrópico ao nível microscópico. Em particular, objetiva-se obter a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico quando é introduzida uma pequena inclusão circular na micro-escala (representada pelo EVR), ou seja, propõe-se estudar a seguinte expansão assintótica

$$\mathbf{T}^\varepsilon \cdot \mathbf{E} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{V_\mu} f(\varepsilon) D_T \psi + o(f(\varepsilon)). \quad (3.142)$$

Sendo assim e lembrando que o EVR é representado por $\Omega_\mu = \Omega_\mu^m \cup \Omega_\mu^i$, inicialmente é introduzido um furo circular \mathcal{H}_ε de raio ε centrado no ponto arbitrário $\hat{\mathbf{y}} \in \Omega_\mu$ da matriz; em seguida, insere-se uma inclusão \mathcal{I}_ε , com propriedades físicas diferentes às da matriz, de modo a ocupar o vazio ora produzido. Logo, o domínio topologicamente perturbado é definido como $\Omega_{\mu\varepsilon} = (\Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon}) \cup \mathcal{I}_\varepsilon$ (ver Fig.3.14). Cabe ainda definir a normal unitária ao contorno da inclusão como $\mathbf{n}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} := -\mathbf{n}$.

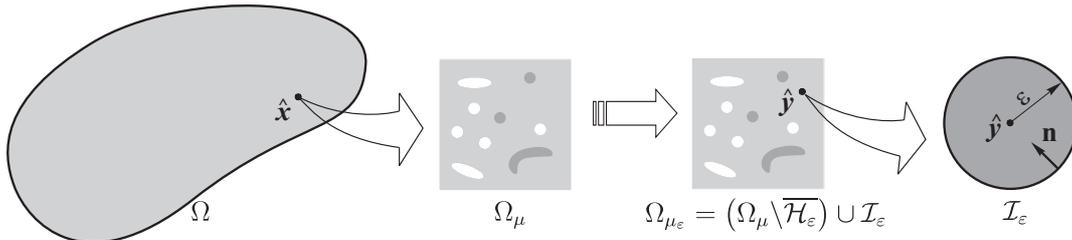


Figura 3.14: micro-estrutura perturbada com uma inclusão \mathcal{I}_ε .

Além do mais, o Princípio de Hill-Mandel de Macro-Homogeneidade estabelece que a energia elástica específica macroscópica avaliada no ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ deve ser igual à média volumétrica da energia elástica microscópica associada ao correspondente EVR, ou seja,

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{T}_\mu \cdot \mathbf{E}_\mu dV \quad \text{e} \quad \mathbf{T}^\varepsilon \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mu\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu\varepsilon} dV, \quad (3.143)$$

onde de forma análoga ao apresentado na Seção 3.1, a tensão microscópica $\mathbf{T}_{\mu\varepsilon}$ associada ao domínio perturbado $\Omega_{\mu\varepsilon}$ é dada por,

$$\mathbf{T}_{\mu\varepsilon} = \mathbb{C}_\mu^* \mathbf{E}_{\mu\varepsilon}, \quad (3.144)$$

sendo $\mathbb{C}_\mu^* = \mathbb{C}_\mu^*(\mathbf{y})$ o tensor de elasticidade (de quarta ordem) tal que, para $\gamma \in \mathfrak{R}^+$,

$$\mathbb{C}_\mu^* = \begin{cases} \mathbb{C}_\mu & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon} \\ \gamma \mathbb{C}_\mu & \forall \mathbf{y} \in \mathcal{I}_\varepsilon \end{cases}. \quad (3.145)$$

Além do mais, o deslocamento microscópico $\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{K}_{\mu_\varepsilon} := \{\mathbf{v} \in \mathcal{K}_\mu : \llbracket \mathbf{v} \rrbracket = \mathbf{0} \text{ sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon\}$, associado ao domínio perturbado Ω_{μ_ε} , é decomposto aditivamente como

$$\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{y}) + \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}), \quad (3.146)$$

sendo $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$ o campo de flutuação de deslocamento microscópico associado ao domínio Ω_{μ_ε} . No entanto, assumindo a mesma cinemática apresentada em (3.7) para o campo de deformações microscópicas $\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}$ e levando em conta as eqs.(3.144) e (3.146), os tensores tensão e deformação microscópicas associadas ao domínio perturbado e denotados respectivamente por $\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}$ e $\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}$, podem ser escritos como

$$\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} = \mathbf{E} + \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon} \quad \text{e} \quad \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} = \bar{\mathbf{T}}_\mu^* + \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}, \quad (3.147)$$

com $\bar{\mathbf{T}}_\mu^*$ denotando a tensão microscópica induzida pela deformação macroscópica \mathbf{E} associada à micro-estrutura perturbada Ω_{μ_ε} , ou seja, $\bar{\mathbf{T}}_\mu^* = \mathbb{C}_\mu^* \mathbf{E}$.

Em virtude da decomposição aditiva para o campo de tensão $\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}$, apresentada em (3.147)₂, tem-se que o problema de equilíbrio no domínio Ω_{μ_ε} é escrito como: encontre o campo de flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \tilde{\mathcal{K}}_{\mu_\varepsilon}$, tal que

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta}_\varepsilon dV = - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \bar{\mathbf{T}}_\mu^* \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta}_\varepsilon dV \quad \forall \boldsymbol{\eta}_\varepsilon \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon} \quad \text{com} \quad \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} = \mathbb{C}_\mu^* \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}, \quad (3.148)$$

sendo que os espaços das flutuações e as variações de deslocamento cinematicamente admissíveis, associados ao domínio topologicamente perturbado, são definidos como

$$\tilde{\mathcal{K}}_{\mu_\varepsilon} := \left\{ \mathbf{v} \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu : \llbracket \mathbf{v} \rrbracket = \mathbf{0} \text{ sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon \right\} \quad \text{e} \quad \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon} := \left\{ \boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}_\mu : \llbracket \boldsymbol{\xi} \rrbracket = \mathbf{0} \text{ sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon \right\}. \quad (3.149)$$

Assim, a equação de Euler-Lagrange associada ao problema variacional (3.148) resulta no seguinte problema de valor no contorno: encontre $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$, tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div} \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} = \mathbf{0} & \text{em } \Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon} \\ \operatorname{div} \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} = \mathbf{0} & \text{em } \mathcal{I}_\varepsilon \\ \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} = \mathbb{C}_\mu^* \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} & \text{em } \Omega_{\mu_\varepsilon} \\ \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \otimes_s \mathbf{n} dS = \mathbf{0} & \\ \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} dV = -\mathbf{E} \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{y} dV & \\ \llbracket \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket = \mathbf{0} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \cup \partial\mathcal{I}_\varepsilon \\ \llbracket \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} = -\llbracket \bar{\mathbf{T}}_\mu^* \rrbracket \mathbf{n} & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \cup \partial\mathcal{I}_\varepsilon \end{array} \right. . \quad (3.150)$$

Observação 32. *Mais uma vez (veja Observação 25, pag.93), a condição (3.150)₄ está naturalmente satisfeita pela escolha feita para o espaço $\mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$, compatível com a escolha*

para \mathcal{V}_μ . Além disso, desde que o termo do lado direito de (3.150)₇ tem média nula, e do Lema de Lax-Milgram, tem-se que existe uma única solução para o problema (3.148). Finalmente, da coercividade do lado esquerdo de (3.46) e (3.148), tem-se que a seguinte estimativa é satisfeita para o caso bi-dimensional analisado (veja Seção B.2 do apêndice B),

$$\|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{\mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}} = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (3.151)$$

Introduzindo a seguinte notação para a energia elástica microscópica associada ao domínio perturbado Ω_{μ_ε}

$$\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} dV, \quad (3.152)$$

observa-se que a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}$ em relação a $\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}$ na direção $\delta\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$, onde $\delta\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$ é definida como uma flutuação de deslocamento virtual microscópico, permite estabelecer a seguinte condição de mínima energia

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}}{\partial \mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}}, \delta\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \right\rangle = 0 \quad \forall \delta\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \delta\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} dV = 0 \quad \forall \delta\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}. \quad (3.153)$$

Empregando a representação do deslocamento $\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}$ dada pela eq.(3.146) e o conceito da homogeneização do campo de tensão, tem-se

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot [\nabla^s(\delta\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) - \nabla^s(\delta\mathbf{u})] dV = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s(\delta\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) dV - V_\mu \mathbf{T}^\varepsilon \cdot \mathbf{E}, \quad (3.154)$$

substituindo o resultado acima na expressão (3.153), chega-se a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s(\delta\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) dV - V_\mu \mathbf{T}^\varepsilon \cdot \delta\mathbf{E} &= 0 \\ \Rightarrow \quad \mathbf{T}^\varepsilon \cdot \delta\mathbf{E} &= \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \delta\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} dV. \end{aligned} \quad (3.155)$$

Observação 33. Do resultado anterior segue que a mínima energia elástica do EVR, na sua configuração perturbada, está associada com a energia específica virtual avaliada no ponto material \mathbf{x} . Sendo assim, a eq.(3.155) define o operador constitutivo perturbado representado por $\mathbf{T}^\varepsilon(\mathbf{x})$. Então, a expansão (3.142) fornece, de fato, a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando a microestrutura é perturbada de forma não suave com a introdução de uma inclusão \mathcal{I}_ε .

3.2.1 Obtenção da derivada topológica

A função chamada de derivada topológica é obtida a partir da análise assintótica de funcionais que dependem tanto explícita quanto implicitamente do domínio Ω_{μ_ε} , sendo que essa última dependência decorre do fato que a flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$ é solução do problema variacional associado ao EVR perturbado eq.(3.148). Este fato conduz a alguns problemas técnicos que vêm sendo gradativamente resolvidos. De fato, diversas metodologias de cálculo da derivada topológica têm sido apresentadas na literatura, dentre outros podemos mencionar: *material derivative method*: Sokolowski &

Źochowski (1999) [116], *domain truncation method*: Garreau et al. (2001) [40] e *topological-shape sensitivity method*: Novotny et al. (2003) [92]. Em particular, dos métodos ora citados para o cálculo da derivada topológica neste trabalho será utilizado o proposto por Novotny no seu trabalho de doutorado, Novotny (2003) [90], cuja expressão para a derivada topológica foi apresentada na seção introdutória deste trabalho na eq.(1.4). Através dessa abordagem, a análise de sensibilidade à mudança de forma deve ser desenvolvida para o caso particular em que a perturbação singular sofre uma expansão uniforme. Nesse contexto, pode-se definir um campo de velocidade de mudança de forma suficientemente regular $\mathbf{v} \in \Omega_{\mu_\varepsilon}$, com a característica particular de ser nulo no contorno exterior do domínio da matriz, $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sobre $\partial\Omega_\mu^m$, e possuir, no contorno da perturbação singular, uma direção contrária ao vetor normal definido nesse contorno, ou seja, $\mathbf{v} = -\mathbf{n}$ sobre $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$. Em seguida, na Proposição 3, é apresentado o cálculo da derivada do funcional de forma $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$, definido na eq.(3.152), em relação ao parâmetro ε .

Proposição 3. *Seja $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ o funcional definido em (3.152). Então, a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ com relação ao parâmetro ε é dada por*

$$\frac{d}{d\varepsilon}\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \mathbf{v} dV, \quad (3.156)$$

onde \mathbf{v} é o campo de velocidade de mudança de forma definido em Ω_{μ_ε} e $\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon}$ denota a generalização do clássico tensor momento-energia de Eshelby (1975) [35] no EVR, que neste caso em particular é dado por:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} = (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon})\mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}. \quad (3.157)$$

Prova. Do teorema de transporte de Reynolds e da definição (3.152) para o funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$, obtemos a seguinte identidade

$$\frac{d}{d\varepsilon}\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \left[\frac{d}{d\varepsilon}(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) + \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} \operatorname{div} \mathbf{v} \right] dV. \quad (3.158)$$

Empregando o conceito de derivada material de campos espaciais, Gurtin (1981) [49], é possível calcular o primeiro termo da integral acima, que fica dado por:

$$\frac{d}{d\varepsilon}(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) = 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon}, \quad (3.159)$$

onde $(\dot{\cdot})$ denota a derivada material (total) do campo (\cdot) com relação ao parâmetro ε . Utilizando a decomposição aditiva do campo de deslocamento $\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}$, dada pela eq.(3.146), a derivada material da deformação no EVR é obtida da seguinte forma,

$$\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} = \mathbf{E} + \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \dot{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon} = \dot{\tilde{\mathbf{E}}}_{\mu_\varepsilon} = \nabla^s \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_{\mu_\varepsilon} - (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \nabla \mathbf{v})^s, \quad (3.160)$$

e introduzindo o resultado anterior na expressão (3.159), tem-se que

$$\frac{d}{d\varepsilon}(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) = 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_{\mu_\varepsilon} - 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \nabla \mathbf{v})^s. \quad (3.161)$$

Substituindo o resultado (3.161) em (3.158) e empregando a definição do $\text{div } \mathbf{v} = \mathbf{I} \cdot \nabla \mathbf{v}$, tem-se que a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ pode ser escrita como

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \left[2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \nabla \mathbf{v})^s + (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] dV. \quad (3.162)$$

No entanto, observa-se que da definição do espaço das variações cinematicamente admissíveis para as flutuações de deslocamento, tem-se que $\dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$. Assim, o primeiro termo da integral acima satisfaz a equação de estado (3.148), ou seja,

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} dV = 0 \quad \forall \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}. \quad (3.163)$$

Finalmente a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε é dada por,

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} [(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}] \cdot \nabla \mathbf{v} dV, \quad (3.164)$$

onde é possível identificar o tensor Σ_{μ_ε} dado por (3.157). ■

Proposição 4. *Seja $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ o funcional definido em (3.152). Então, a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ com relação ao parâmetro ε pode ser escrita como*

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) = \int_{\partial\Omega_\mu} \Sigma_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\Omega_\mu^i} [\Sigma_{\mu_\varepsilon}] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} [\Sigma_{\mu_\varepsilon}] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS, \quad (3.165)$$

sendo \mathbf{v} o campo de velocidade de mudança de forma e Σ_{μ_ε} o tensor definido na eq.(3.157).

Prova. Calculando a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}$ com relação ao parâmetro pequeno ε usando a versão do teorema de transporte de Reynolds escrita em termos de integrais de contorno, tem-se que a sensibilidade à mudança de forma do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$, pode ser obtida como

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) &= \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) dV + \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\Omega_\mu^i} [(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon})] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} [(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon})] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS. \end{aligned} \quad (3.166)$$

Empregando os conceitos da derivada espacial e levando em conta a eq.(3.144), tem-se que o primeiro termo da expressão acima pode ser escrito como

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) = 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}'_{\mu_\varepsilon}, \quad (3.167)$$

onde $(\cdot)'$ denota a derivada espacial (parcial) do campo (\cdot) em relação ao parâmetro ε . Utilizando a decomposição aditiva do campo de deslocamento $\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}$, a derivada espacial da deformação microscópica no EVR é dada por,

$$\mathbf{E}'_{\mu_\varepsilon} = \tilde{\mathbf{E}}'_{\mu_\varepsilon} = \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}'_{\mu_\varepsilon} = \nabla^s (\dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}). \quad (3.168)$$

Introduzindo o resultado anterior na expressão (3.167), tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) = 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}). \quad (3.169)$$

Com o resultado anterior, a sensibilidade do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ fica da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) &= \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \left[2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - 2\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}) \right] dV + \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\Omega_\mu^i} \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS. \end{aligned} \quad (3.170)$$

Observa-se, no entanto que $\dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$. Assim, o primeiro termo da integral acima satisfaz a equação de estado (3.148), ou seja,

$$\int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} dV = 0 \quad \forall \dot{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}. \quad (3.171)$$

Logo, a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε é dada por,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) &= -2 \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}) dV + \int_{\partial\Omega_\mu} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\Omega_\mu^i} \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS. \end{aligned} \quad (3.172)$$

Introduzindo a relação tensorial

$$\operatorname{div} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^T \nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}) = \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}) + \operatorname{div} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v}, \quad (3.173)$$

e empregando o teorema da divergência, a sensibilidade do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon}) &= 2 \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \operatorname{div} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{v} dV + \int_{\partial\Omega_\mu} [(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\Omega_\mu^i} \llbracket (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS. \end{aligned} \quad (3.174)$$

Finalmente, uma vez que o campo de tensão $\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}$ está em equilíbrio no EVR, da equação de Euler-Lagrange (3.150), observa-se que $\operatorname{div} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} = \mathbf{0}$ no domínio Ω_{μ_ε} , assim a expressão acima pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu_\varepsilon}}(u_{\mu_\varepsilon}) &= \int_{\partial\Omega_\mu} [(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\Omega_\mu^i} \llbracket (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &+ \int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \cdot \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}) \mathbf{I} - 2(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon})^T \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS, \end{aligned} \quad (3.175)$$

onde é possível novamente identificar o tensor Σ_{μ_ε} dado por (3.157). ■

Corolário 1. *Empregando o teorema de divergência, a expressão (3.156) pode ser escrita da seguinte forma*

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu\varepsilon}) &= \int_{\partial\Omega_{\mu}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\Omega_{\mu}^i} [[\boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon}]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{\partial\mathcal{I}_{\varepsilon}} [[\boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon}]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS \\ &\quad - \int_{\Omega_{\mu\varepsilon}} \operatorname{div} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon} \cdot \mathbf{v} dV. \end{aligned} \quad (3.176)$$

Mas, desde que as expressões da sensibilidade do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}$, eqs.(3.165) e (3.176), são equivalentes para todo campo de velocidade de mudança de forma \mathbf{v} em $\overline{\Omega_{\mu\varepsilon}}$, conclui-se que

$$\int_{\Omega_{\mu\varepsilon}} \operatorname{div} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon} \cdot \mathbf{v} dV = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \Omega_{\mu\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \operatorname{div} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon} = \mathbf{0} \text{ em } \Omega_{\mu\varepsilon}, \quad (3.177)$$

ou seja, o campo tensorial de Eshelby $\boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon}$ possui divergência nula no domínio $\Omega_{\mu\varepsilon}$. \square

Finalmente, introduzindo a definição do campo de velocidade de mudança de forma \mathbf{v} em (3.176), a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε é dada por:

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu\varepsilon}) = - \int_{\partial\mathcal{I}_{\varepsilon}} [[\boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon}]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.178)$$

Desse último resultado observa-se que a análise de sensibilidade à mudança de forma, em relação a uma expansão uniforme da inclusão $\mathcal{I}_{\varepsilon}$, do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu\varepsilon})$ depende apenas do salto do fluxo normal do tensor de Eshelby através do contorno da perturbação $\partial\mathcal{I}_{\varepsilon}$.

Observação 34. *Dentre os modelos constitutivos multi-escala apresentados na seção anterior, tem-se que no modelo de Taylor o espaço das variações cinematicamente admissíveis \mathcal{V}_{μ} é o espaço nulo. Conseqüentemente, as flutuações de deslocamento microscópico são nulas, ou seja,*

$$\mathcal{V}_{\mu\varepsilon} = \mathcal{V}_{\mu\varepsilon}^T = \{\mathbf{0}\} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\mathbf{u}}_{\mu\varepsilon} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}_{\mu\varepsilon} = \mathbf{E}(\mathbf{x}). \quad (3.179)$$

Do resultado anterior segue que a deformação microscópica é uniforme no domínio $\Omega_{\mu\varepsilon}$. Portanto, introduzindo a restrição anterior na definição (3.157) do tensor momento-energia generalizado de Eshelby, tem-se

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mu\varepsilon} = (\bar{\mathbf{T}}_{\mu}^* \cdot \mathbf{E}) \mathbf{I}. \quad (3.180)$$

Com esse resultado e a expressão (3.178), a derivada do funcional $\mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu\varepsilon})$ em relação ao parâmetro ε é dada, simplesmente, por

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \mathcal{J}_{\Omega_{\mu\varepsilon}}(\mathbf{u}_{\mu\varepsilon}) &= - \int_{\partial\mathcal{I}_{\varepsilon}} [[\bar{\mathbf{T}}_{\mu}^* \cdot \mathbf{E}]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} dS \\ &= -2\pi\varepsilon(1 - \gamma)(\bar{\mathbf{T}}_{\mu} \cdot \mathbf{E}). \end{aligned} \quad (3.181)$$

Substituindo os resultados anteriores na definição da derivada topológica e identificando a função $f(\varepsilon)$ como a medida da perturbação $\mathcal{I}_{\varepsilon}$,

$$f(\varepsilon) = \pi\varepsilon^2, \quad (3.182)$$

a derivada topológica associada ao modelo de Taylor é obtida trivialmente como

$$D_T^{\mathcal{I}} \psi = -(1 - \gamma) \bar{\mathbf{T}}_{\mu} \cdot \mathbf{E}. \quad (3.183)$$

Contrariamente ao apresentado na observação anterior, nos outros modelos constitutivos multi-escala o espaço das variações cinematicamente admissíveis é não trivial. Necessita-se, portanto, levar em conta que o campo de flutuações de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$ é solução do problema variacional (3.148). Assim, para obter uma forma explícita do integrando da expressão (3.178) considera-se agora um sistema de coordenadas curvilíneo n - t definido no contorno $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$, caracterizado pelos vetores ortonormais \mathbf{n} e \mathbf{t} . Com esse sistema é possível decompor o tensor tensão $\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ e o tensor deformação $\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{u}_{\mu_\varepsilon})$ no contorno $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ como segue

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} &= \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nt}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{t}) + \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn}(\mathbf{t} \otimes \mathbf{n}) + \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tt}(\mathbf{t} \otimes \mathbf{t}), \\ \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} &= \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}^{nn}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}^{nt}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{t}) + \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}^{tn}(\mathbf{t} \otimes \mathbf{n}) + \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}^{tt}(\mathbf{t} \otimes \mathbf{t}). \end{aligned} \quad (3.184)$$

Entretanto, observa-se que da condição de Neumann no contorno da inclusão $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$, eq. (3.150)₇, tem-se que

$$\llbracket \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = -\llbracket \bar{\mathbf{T}}_{\mu}^* \rrbracket \mathbf{n} \quad \Rightarrow \quad \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = \mathbf{0}, \quad (3.185)$$

de modo que com a decomposição (3.184)₁ obtém-se as seguintes relações de continuidade para as componentes do tensor $\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon}$

$$\llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn} \rrbracket \mathbf{n} + \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn} \rrbracket \mathbf{t} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_m = \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_i \quad \text{e} \quad \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn}|_m = \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn}|_i \quad \text{sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon. \quad (3.186)$$

Da mesma forma que na eq.(3.184) o campo de flutuação de deslocamento $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$ admite a seguinte decomposição no contorno da inclusão $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$

$$\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}^n \mathbf{n} + \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}^t \mathbf{t}. \quad (3.187)$$

Portanto, a condição de continuidade (3.150)₆ implica em

$$\llbracket \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} \right|_m = \left. \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}}{\partial t} \right|_i \quad \text{sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon. \quad (3.188)$$

Alternativamente, a condição acima pode ser escrita em termos das componentes, na base n - t , do tensor flutuação de deformação microscópica $\tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon}$, como segue

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_m = \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_i, \quad (3.189)$$

mas, observa-se ainda que, da decomposição aditiva do campo de deformação microscópica $\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}$, eq. (3.147)₁, tem-se

$$\mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_m = \mathbf{E}_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_i. \quad (3.190)$$

Levando em conta as decomposições (3.184) e (3.187) e as condições de continuidade mostradas nas eqs.(3.186), (3.188) e (3.190), o salto do fluxo normal do tensor de Eshelby

através do contorno da inclusão $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$, pode ser escrito como

$$\llbracket \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = \llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tt} \rrbracket E_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_i - \llbracket \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon}^{nn} \rrbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_i - \left\llbracket \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}^t}{\partial n} \right\llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn}|_i. \quad (3.191)$$

Por outro lado, observa-se que empregando a relação constitutiva (3.144) e levando em conta que o salto da tensão induzida no contorno da perturbação é dado trivialmente por $\llbracket \tilde{\mathbf{T}}_\mu^* \rrbracket = (1 - \gamma)\tilde{\mathbf{T}}_\mu$, os termos associados ao operador de salto na direita da expressão acima satisfazem

$$\llbracket \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tt} \rrbracket = \frac{1 - \gamma}{\gamma} (\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_i - \nu \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_i), \quad (3.192)$$

$$\llbracket \tilde{\mathbf{E}}_{\mu_\varepsilon}^{nn} \rrbracket = -\frac{1 - \nu^2}{E} \frac{1 - \gamma}{\gamma} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_i, \quad (3.193)$$

$$\left\llbracket \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}^t}{\partial n} \right\llbracket = -2 \frac{1 + \nu}{E} \frac{1 - \gamma}{\gamma} \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn}|_i. \quad (3.194)$$

Introduzindo, portanto, os resultados mostrados acima e levando em conta (3.147)₂ junto com (3.144), o salto do fluxo normal do tensor de Eshelby através do contorno da perturbação, $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$, pode ser escrito em termos da solução no interior da perturbação \mathcal{I}_ε da seguinte maneira

$$\llbracket \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = \frac{1 - \gamma}{\gamma^2 E} \left[(\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tt}|_i - \nu \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_i)^2 + \gamma(1 - \nu^2) \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{nn}|_i^2 + 2\gamma(1 + \nu) \mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}^{tn}|_i^2 \right]. \quad (3.195)$$

Para resolver a integral no contorno da perturbação $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ é necessário conhecer o comportamento do campo de tensão microscópica no interior da perturbação $\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}|_i$ em relação ao parâmetro ε . Então, empregando a análise assintótica clássica a distribuição do campo de tensão microscópica no contorno da perturbação \mathcal{I}_ε (segundo mostrado na Seção A.2 do Apêndice A) é escrita da seguinte forma

$$\mathbf{T}_{\mu_\varepsilon}|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = \mathbb{L} \tilde{\mathbf{T}}_\mu + \mathbb{S} \tilde{\mathbf{T}}_\mu + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (3.196)$$

com $\mathcal{O}(\varepsilon)$ denotando os termos maior ordem em ε , tal que $\mathcal{O}(\varepsilon) \rightarrow 0$ quando $\varepsilon \rightarrow 0$, e \mathbb{L} e \mathbb{S} denotam os tensores simétricos e isotrópicos de quarta ordem dados por

$$\mathbb{L} = \frac{\gamma(1 - \gamma)}{1 + \alpha\gamma} \left[\frac{1 + \alpha}{1 - \gamma} \mathbb{I} + \frac{\beta - \alpha}{2(1 + \beta\gamma)} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) \right], \quad (3.197)$$

$$\mathbb{S} = \frac{\gamma}{(1 + \alpha\gamma)(1 + \nu)} \left\{ 4\mathbb{I} + \left[\frac{\beta(1 + \alpha\gamma)}{1 + \beta\gamma} - 2 \right] (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) \right\}, \quad (3.198)$$

sendo que as constantes α e β são definidas como

$$\beta := \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \quad \text{e} \quad \alpha := \frac{3 - \nu}{1 + \nu}. \quad (3.199)$$

Com a distribuição de tensões no contorno da inclusão, mostradas na eq.(3.196), é possível calcular a derivada topológica avaliando analiticamente a integral de contorno (3.178). De fato:

$$\int_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} \llbracket \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} dS = \frac{2\pi\varepsilon}{E} \left(\frac{1 - \gamma}{1 + \alpha\gamma} \right) \left[4\mathbf{T}_\mu \cdot \mathbf{T}_\mu + \frac{\gamma(\alpha - 2\beta) - 1}{1 + \beta\gamma} (\text{tr} \mathbf{T}_\mu)^2 \right] + o(\varepsilon). \quad (3.200)$$

Substituindo o resultado obtido anteriormente na definição alternativa de derivada topológica, mostrada na eq.(1.4), pode-se identificar a função $f(\varepsilon)$ da mesma forma que em (3.182). De fato,

$$f(\varepsilon) = \pi\varepsilon^2 \quad \Rightarrow \quad f'(\varepsilon) = 2\pi\varepsilon. \quad (3.201)$$

Finalmente, tomando o limite $\varepsilon \rightarrow 0$, a derivada topológica resulta em uma função escalar que depende apenas da solução \mathbf{u}_μ associada ao domínio original Ω_μ (não perturbado), ou seja,

$$D_T\psi(\hat{\mathbf{y}}) = -\mathbb{H}\mathbf{T}_\mu \cdot \mathbf{T}_\mu \quad \forall \hat{\mathbf{y}} \in \Omega_\mu, \quad (3.202)$$

onde o tensor simétrico e isotrópico de quarta ordem \mathbb{H} é definido como

$$\mathbb{H} := \frac{1}{E} \left(\frac{1-\gamma}{1+\alpha\gamma} \right) \left[4\mathbb{I} + \frac{\gamma(\alpha-2\beta)-1}{1+\beta\gamma} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) \right]. \quad (3.203)$$

Observação 35. *Como era esperado, a expressão final da derivada topológica para modelos constitutivos multi-escala (3.202) coincide com o resultado clássico associado ao problema de elasticidade bidimensional para quando a perturbação é caracterizada por uma inclusão circular, Giusti et al. (2008) [45]. No entanto, será mostrado mais adiante que através da eq.(3.202) é possível identificar um tensor de quarta ordem que representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando é introduzido uma pequena inclusão circular no EVR.*

Como mencionado no início deste trabalho, a derivada topológica fornece a sensibilidade do problema ao introduzir uma perturbação não suave no domínio de análise quando $\varepsilon \rightarrow 0$. Visando, portanto, corroborar numericamente o resultado (3.202) obtido analiticamente, define-se a função $d_T\psi_\varepsilon$ como

$$d_T\psi_\varepsilon := \frac{\psi(\varepsilon) - \psi(0)}{f(\varepsilon)} \quad \Rightarrow \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} d_T\psi_\varepsilon = D_T\psi. \quad (3.204)$$

Se para um dado EVR calcula-se as funções $\psi(0)$ e $\psi(\varepsilon)$ para uma seqüência de inclusões de raios ε decrescentes, a utilização da fórmula (3.204)₁ fornecerá uma aproximação assintótica para o valor analítico da derivada topológica (3.202). Os valores da função ψ são computados numericamente empregando o método dos elementos finitos para a resolução do problema de elasticidade linear, no contexto da modelagem constitutiva multi-escala, mostrado na Seção 3.1.8.1. O EVR utilizado para o desenvolvimento desta verificação numérica está caracterizado por uma matriz quadrada de dimensões unitárias, com uma inclusão circular de raio 0.1 centrada no ponto (0.35, 0.75) – com a origem do sistema de coordenadas cartesianas localizada no canto inferior esquerdo do EVR, ver Fig.3.15(a). O estudo é feito introduzindo uma perturbação circular, com propriedades físicas similares à da inclusão preexistente, centrada em $\hat{\mathbf{y}} = (0.5, 0.5)$ e com o raio ε variável dado por

$$\varepsilon \in \{0.005, 0.010, 0.020, 0.040, 0.080, 0.160\}. \quad (3.205)$$

A discretização do domínio de análise é feita utilizando elementos finitos triangulares isoparamétricos quadráticos. A malha de elementos finitos foi gerada com a seguinte regra:

- Contorno exterior: 20 elementos em cada linha.
- Inclusão (centrada em $(0.35, 0.75)$): 30 elementos no contorno.
- Perturbações (centradas em $(0.5, 0.5)$): 60 elementos em cada contorno.

Gerando um total de 13353 nós e 6636 elementos, como mostrado na Fig.3.15(b).

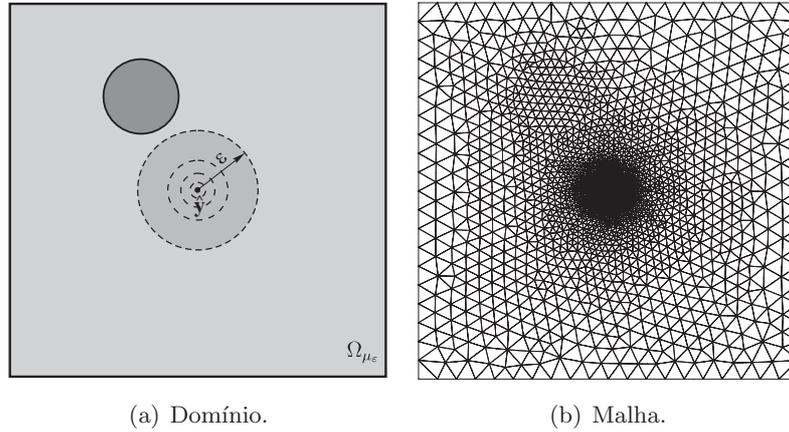


Figura 3.15: verificação numérica - EVR e malha de elementos finitos.

Baseado no conceito de modelagem constitutiva multi-escala, o EVR mostrado anteriormente representa a microestrutura do ponto material \boldsymbol{x} da macro-escala. Assim, para o desenvolvimento do estudo foi admitido que o mencionado ponto tem associado a seguinte deformação macroscópica,

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1.00 & 0.05 \\ 0.05 & 2.00 \end{bmatrix}. \quad (3.206)$$

Na definição dos materiais que caracterizam a matriz, inclusão preexistente e perturbação, foram estudadas duas situações para diferentes valores do coeficiente de Poisson, com um contraste $\gamma = 0.10$ no módulo de Young:

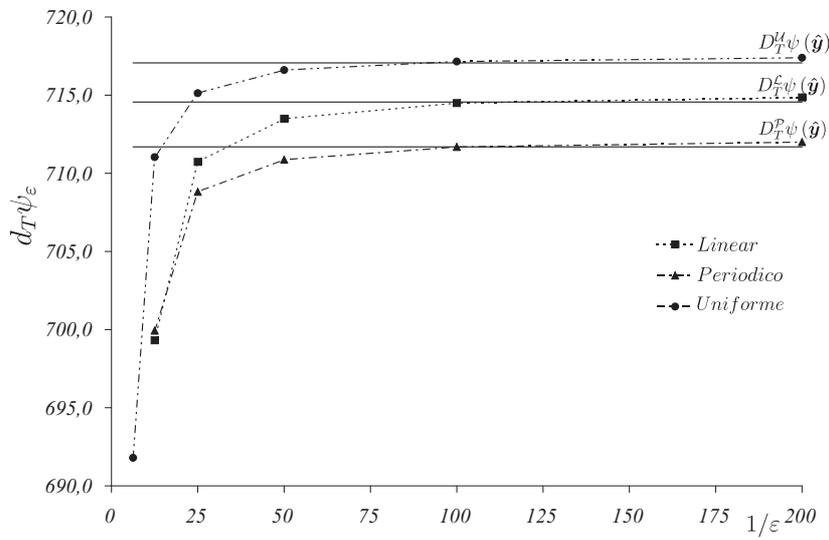
- Caso A: $E_m = 50.0$, $\nu_m = 1/3$, $E_i = 5.0$ e $\nu_i = 1/3$.
- Caso B: $E_m = 50.0$, $\nu_m = 1/5$, $E_i = 5.0$ e $\nu_i = 1/5$.

Em cada um dos casos apresentados anteriormente, a verificação numérica desenvolvida atende aos seguintes modelos constitutivos multi-escala:

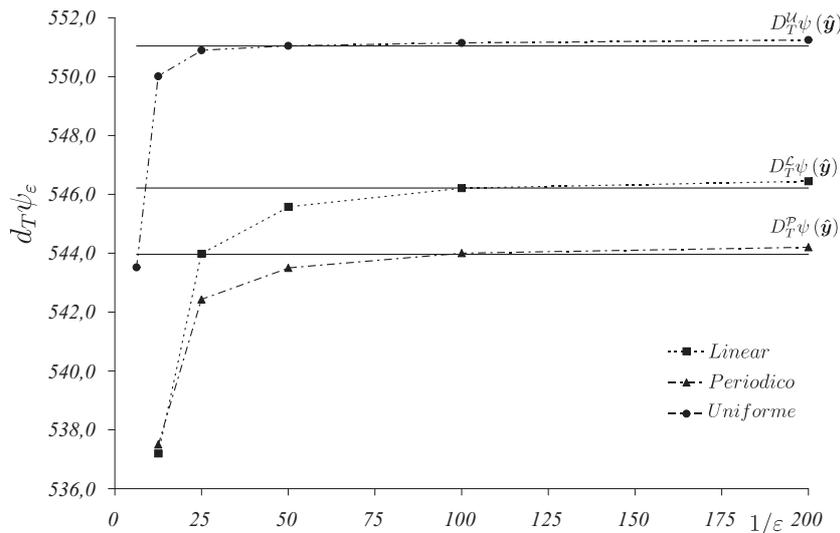
- Modelo de deslocamento linear no contorno (Seção 3.1.6.2);
- Modelo de flutuação de deslocamento periódica no contorno (Seção 3.1.6.3);
- Modelo de tração uniforme no contorno (Seção 3.1.6.4).

O modelo de Taylor (ou da regra da mistura) da Seção 3.1.6.1, possui solução trivial, não sendo, portanto, considerado na análise. Os resultados da análise detalhada anteriormente são apresentados na Fig.3.16, na qual é mostrado o valor analítico da derivada

topológica $D_T\psi(\hat{\mathbf{y}})$ e a aproximação numérica $d_T\psi_\varepsilon$ para cada valor de ε em cada modelo constitutivo multi-escala considerado. A convergência da derivada topológica numérica para o correspondente valor analítico é óbvia em todos os casos analisados.



(a) Caso A.



(b) Caso B.

Figura 3.16: verificação de convergência da derivada topológica numérica.

Observação 36. Da Fig.3.16 observa-se claramente que cada um dos modelos constitutivos multi-escala estudados apresenta uma assíntota $D_T\psi$ própria, associada com as diferentes propriedades dos materiais utilizados na simulação (Caso A e Caso B).

3.2.2 Interpretação dos resultados

A seguir será apresentada a metodologia de análise para obter a partir da forma esalar da derivada topológica calculada na seção anterior, a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico. Cabe lembrar que a mencionada expansão constitui uns dos principais resultados deste trabalho. Levando em conta, portanto, o resultado

da análise assintótica topológica apresentada na anteriormente na eq.(3.202), a expansão assintótica (3.142) pode ser escrita explicitamente como

$$\mathbf{T}^\varepsilon \cdot \mathbf{E} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{E} - v(\varepsilon)\mathbb{H}\mathbf{T}_\mu \cdot \mathbf{T}_\mu + o(v(\varepsilon)), \quad (3.207)$$

onde $v(\varepsilon) = \pi\varepsilon^2/V_\mu$ é a fração de volume da inclusão \mathcal{I}_ε .

Empregando argumentos similares aos utilizados na Seção 3.1.7, ou seja, a partir das eqs.(3.90) e (3.91), a deformação microscópica \mathbf{E}_μ pode ser escrita como uma combinação linear das componentes da deformação macroscópica da seguinte forma,

$$\mathbf{E}_\mu = (\mathbf{E})_{ij} \left(\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j + \tilde{\mathbf{E}}_{\mu ij} \right) = (\mathbf{E})_{ij} \mathbf{E}_{\mu ij} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}_{\mu ij} := \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j + \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}, \quad (3.208)$$

lembrando que as funções $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}$ são as soluções do conjunto de problemas variacionais (3.93). Empregando o resultado mostrado acima é possível escrever a tensão microscópica \mathbf{T}_μ como

$$\mathbf{T}_\mu = (\mathbf{E})_{ij} \mathbb{C}_\mu \mathbf{E}_{\mu ij} = (\mathbf{T}_{\mu ij} \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \mathbf{E}, \quad (3.209)$$

com $\mathbf{T}_{\mu ij}$ denotando o tensor tensão microscópica associada a cada flutuação de deslocamento microscópico $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu ij}$. Sendo assim, a derivada topológica $D_T\psi$ pode ser reescrita da seguinte forma,

$$D_T\psi = -\mathbb{D}_{T\mu} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}, \quad (3.210)$$

onde $\mathbb{D}_{T\mu}$ é um tensor simétrico de quarta ordem, cujas componentes são dadas por,

$$\mathbb{D}_{T\mu} = \mathbb{H}\mathbf{T}_{\mu ij} \cdot \mathbf{T}_{\mu kl} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l). \quad (3.211)$$

No entanto, sendo que foi assumida uma relação constitutiva linear para a tensão da macro-escala, tem-se que

$$\mathbf{T} = \mathbb{C}\mathbf{E} \quad \text{e} \quad \mathbf{T}^\varepsilon = \mathbb{C}_\varepsilon \mathbf{E}, \quad (3.212)$$

onde \mathbb{C} e \mathbb{C}_ε denotam os tensores constitutivos homogeneizados associados aos domínios Ω_μ e $\Omega_{\mu\varepsilon}$, respectivamente. Introduzindo a expressão da derivada topológica (3.210) em (3.207) e rearranjando os termos, tem-se que a expansão assintótica topológica do tensor constitutivo macroscópico pode ser escrita como

$$\mathbb{C}_\varepsilon = \mathbb{C} - v(\varepsilon)\mathbb{D}_{T\mu} + o(v(\varepsilon)). \quad (3.213)$$

Observação 37. A derivada topológica $D_T\psi$, dada por um campo escalar definido no EVR não perturbado, depende da deformação macroscópica através da função $\mathbf{u}_\mu = \mathbf{u} + \mathbf{E}\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu$, sendo $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ solução do problema variacional (3.46). Por outro lado, do resultado (3.213) observa-se que o conceito da derivada topológica no contexto de modelagem constitutiva multi-escala resulta em um campo tensorial $\mathbb{D}_{T\mu}$, que representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico, cujas componentes são dadas pela tensão associada às soluções do conjunto de equações variacionais (3.93) no domínio original não perturbado. Além do mais, referidos problemas variacionais não dependem da deformação macroscópica.

Observação 38. O tensor derivada topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$, apresentado na eq.(3.211), possui uma dependência explícita com o contraste γ , através do tensor \mathbb{H} , o que permite analisar os casos limites para esse parâmetro, quais sejam: (i) no primeiro caso tem-se que a inclusão degenera para um vazio ($\gamma \rightarrow 0$), e (ii) no outro extremo ($\gamma \rightarrow \infty$) a perturbação torna-se uma inclusão rígida. As expressões do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para os dois casos mencionados anteriormente são:

- furo ($\gamma \rightarrow 0$):

$$\mathbb{D}_{T\mu} = \mathbb{H} \mathbf{T}_{\mu_{ij}} \cdot \mathbf{T}_{\mu_{kl}} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l), \text{ com } \mathbb{H} = \frac{1}{E} [4\mathbb{H} - (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})], \quad (3.214)$$

- inclusão rígida ($\gamma \rightarrow \infty$):

$$\mathbb{D}_{T\mu} = \mathbb{H} \mathbf{T}_{\mu_{ij}} \cdot \mathbf{T}_{\mu_{kl}} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l), \text{ com } \mathbb{H} = -\frac{1}{E\alpha} \left[4\mathbb{H} + \frac{\alpha - 2\beta}{\beta} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) \right]. \quad (3.215)$$

Em resumo, a expressão (3.214) representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando no EVR é introduzido um furo; e a expressão (3.215) fornece a sensibilidade topológica à nucleação de uma inclusão rígida no domínio do EVR.

Observação 39. Da expressão (3.213), observa-se que o tensor de sensibilidade topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$ preserva as propriedades de simetria do tensor constitutivo \mathbb{C} . Portanto, em vista do discutido na Observação 29 (pag.103), o tensor de quarta ordem $\mathbb{D}_{T\mu}$ admite a seguinte representação matricial

$$\mathbf{D}_{T\mu} = \begin{bmatrix} (\mathbb{D}_{T\mu})_{1111} & (\mathbb{D}_{T\mu})_{1122} & (\mathbb{D}_{T\mu})_{1112} \\ & (\mathbb{D}_{T\mu})_{2222} & (\mathbb{D}_{T\mu})_{2212} \\ \text{sim.} & & (\mathbb{D}_{T\mu})_{1212} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\mathbf{D}_{T\mu})_{11} & (\mathbf{D}_{T\mu})_{12} & (\mathbf{D}_{T\mu})_{13} \\ & (\mathbf{D}_{T\mu})_{22} & (\mathbf{D}_{T\mu})_{23} \\ \text{sim.} & & (\mathbf{D}_{T\mu})_{33} \end{bmatrix}. \quad (3.216)$$

Além do mais, da representação matricial mostrada anteriormente, o problema de obter um tensor de quarta ordem fica reduzido a ter que calcular as 6 componentes $(\mathbf{D}_{T\mu})_{ij}$, com $i, j = 1, 2, 3$.

Do desenvolvimento apresentado anteriormente, em particular da eq.(3.213), conclui-se que o tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ contém todas as informações *a priori* necessárias para perturbar o domínio original do EVR, representado por Ω_μ , de maneira a obter uma variação desejada do tensor constitutivo homogeneizado \mathbb{C}_ε .

3.2.3 Experimentos numéricos

Segundo mencionado no início, um dos objetivos secundários deste trabalho é desenvolver uma metodologia aplicável no projeto e/ou otimização de microestruturas, baseada na informação fornecida pela derivada topológica. Portanto, nesta seção são mostrados alguns exemplos ilustrativos, visando demonstrar a potencialidade das ferramentas apresentadas neste capítulo no projeto e/ou otimização microestrutural. Cada um dos seguintes exemplos foi construído objetivando mostrar as características e/ou propriedades do tensor derivada topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$. Nos exemplos 1 e 2 é realizado um estudo qualitativo das propriedades das componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para diferentes EVR. No exemplo 3 e 4 é

apresentado um procedimento para tornar isotrópica uma microestrutura que inicialmente possui uma resposta constitutiva anisotrópica. Por último, nos exemplos 5 e 6 é mostrado um procedimento de análise, utilizando a expansão assintótica (3.213), que fornece as bases para uma metodologia geral de projeto de microestruturas.

3.2.3.1 Exemplo 1

O EVR utilizado neste primeiro exemplo está caracterizado por uma micro célula quadrada de dimensões unitárias com um poro circular de raio 0.15 centrado no ponto (0.5, 0.5), ver Fig.3.17. O material da matriz é caracterizado pelo módulo de Young $E = 210.0$ MPa e coeficiente de Poisson $\nu = 1/3$. A discretização por elementos finitos utilizada na análise numérica está constituída por uma malha uniforme de 21356 elementos triangulares lineares com um total de 10925 nós.

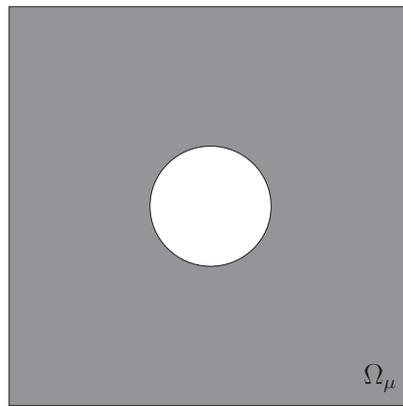


Figura 3.17: exemplo 1 - EVR utilizado no estudo.

Os tensores constitutivos homogeneizados \mathbb{C} associados ao EVR ora descrito, para cada modelo multi-escala, são os seguintes:

$$\mathbb{C}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 194.13 & 62.85 & 0 \\ 62.85 & 194.13 & 0 \\ 0 & 0 & 65.13 \end{bmatrix}, \quad \mathbb{C}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 193.67 & 62.91 & 0 \\ 62.19 & 193.67 & 0 \\ 0 & 0 & 62.73 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbb{C}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 188.56 & 67.49 & 0 \\ 67.49 & 188.56 & 0 \\ 0 & 0 & 61.36 \end{bmatrix}.$$

Neste exemplo propõe-se estudar a sensibilidade da micro célula à introdução de uma inclusão circular cuja resposta constitutiva elástica é definida através do parâmetro $\gamma = 0.1$ (menos rígida – Caso A) e $\gamma = 10.0$ (mais rígida – Caso B). Assim sendo, nas Fig.3.18 (Caso A) e Fig.3.19 (Caso B) são mostrada as componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para os modelos constitutivos multi-escala:

- Modelo de deslocamento linear no contorno do EVR - \mathcal{L} ;
- Modelo de flutuação de deslocamento periódica no contorno do EVR - \mathcal{P} ;
- Modelo de mínima restrição cinemática - \mathcal{M} .

No caso do modelo de Taylor (ou da regra da mistura), as componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ são constantes e por isso não são aqui apresentadas.

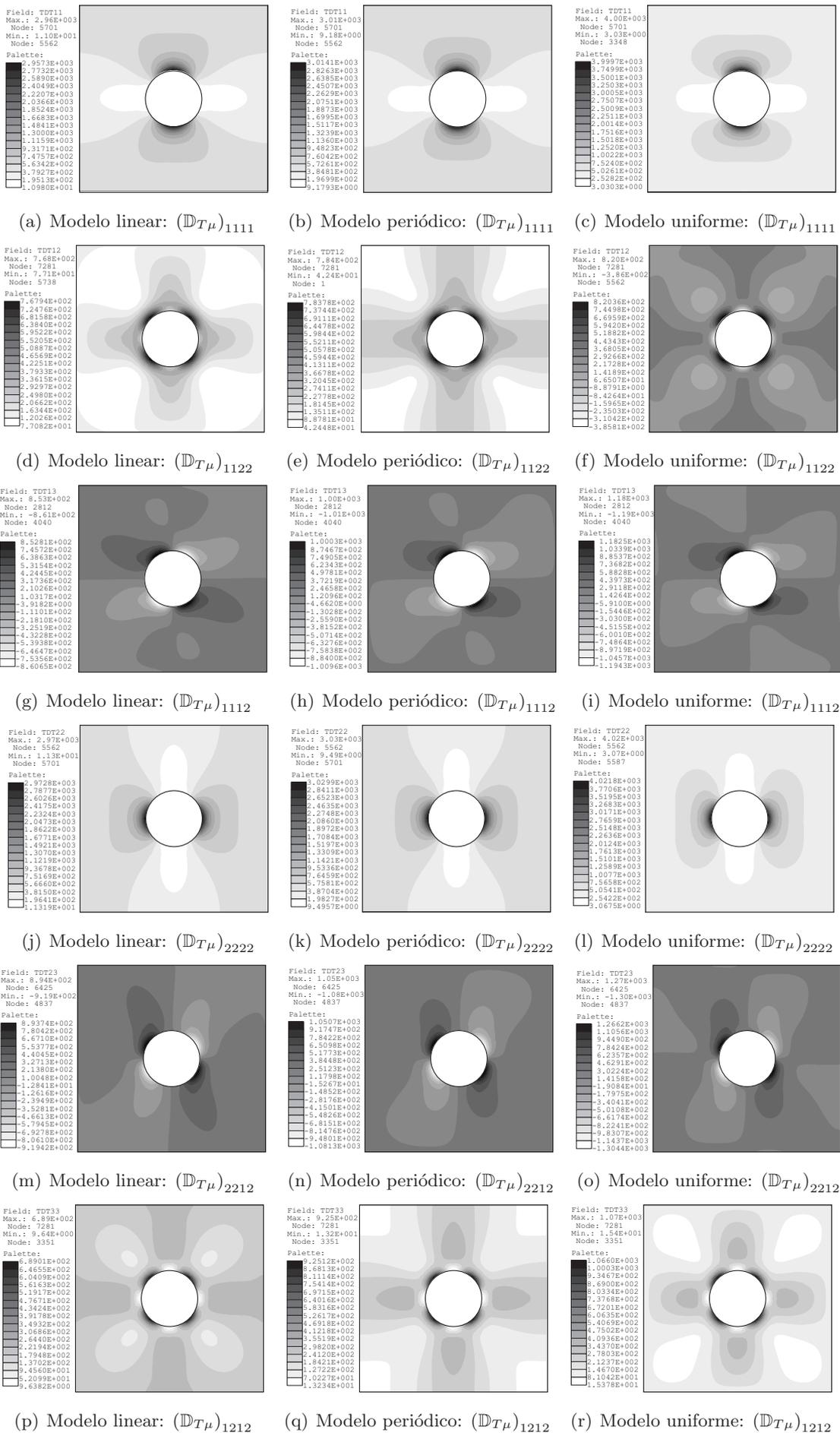


Figura 3.18: exemplo 1 - caso A: componentes do tensor $\mathbb{D}T_\mu$ para $\gamma = 0.1$.

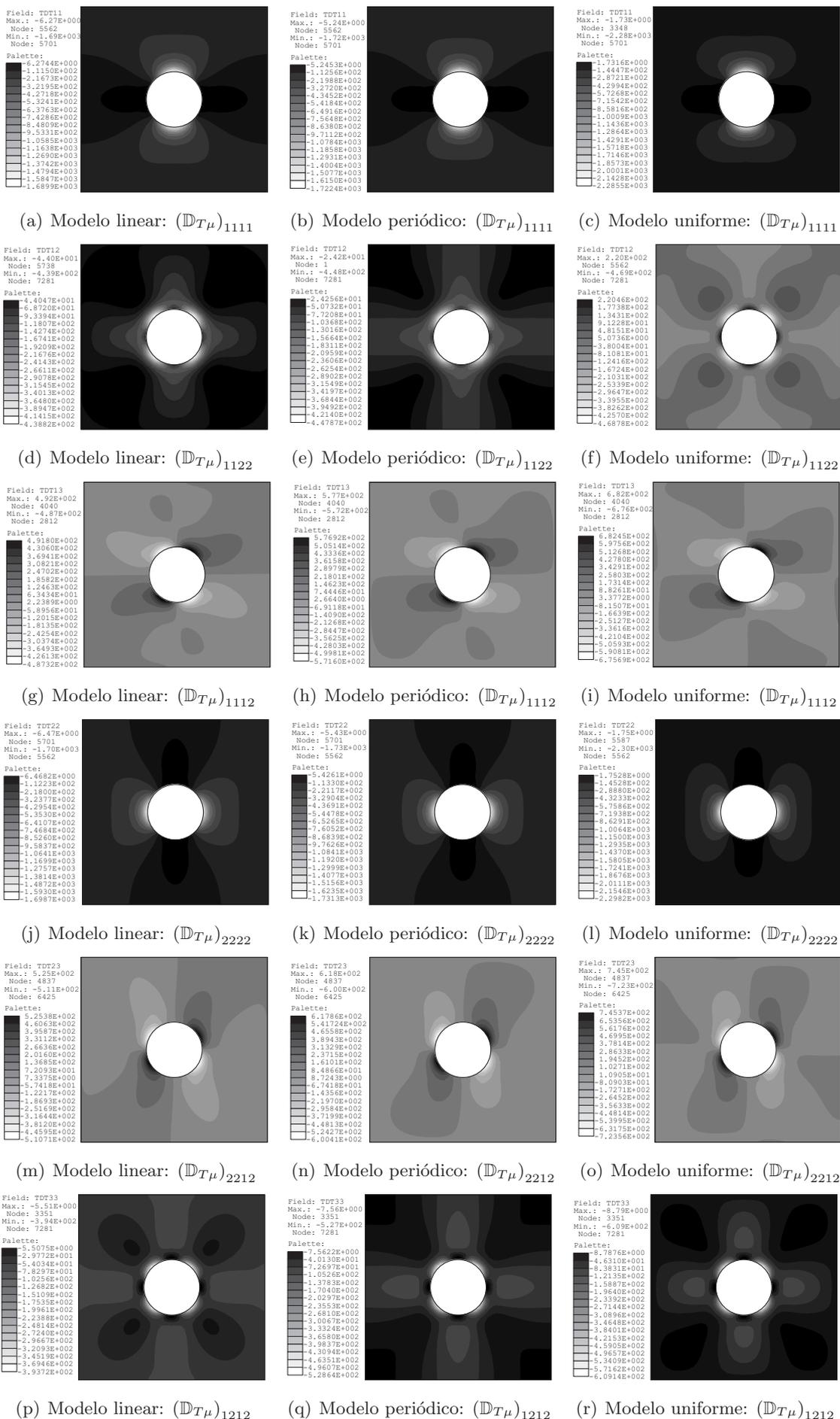


Figura 3.19: exemplo 1 - caso B: componentes do tensor $\mathbb{D}T\mu$ para $\gamma = 10.0$.

Inicialmente, note-se que tanto no Caso A ou Caso B não se observa uma diferença qualitativa apreciável da sensibilidade topológica entre os diferentes modelos. Assim, das Fig.3.18 e Fig.3.19, inferi-se que a direção onde as componentes do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ são mais sensíveis coincide com: (i) as direções dos vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 , que definem o sistema de coordenadas globais no EVR, no caso das componentes $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1111}$ e $(\mathbb{D}_{T\mu})_{2222}$; (ii) uma inclinação aproximada de 45° em relação aos vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 , no caso das componentes $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1122}$ e $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1212}$; e (iii) uma inclinação aproximada de 22.5° em relação ao vetor \mathbf{e}_2 no caso da componente $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1112}$ e em relação ao vetor \mathbf{e}_1 no caso da componente $(\mathbb{D}_{T\mu})_{2212}$. No entanto, existe uma diferença conceitual importante entre a análise do Caso A e do Caso B, que será discutida posteriormente.

Utilizando as informações fornecidas pelo tensor de sensibilidade topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$, o EVR será perturbado com a introdução de inclusões circulares de raio 0.03 constituídas pelo material mencionado anteriormente, da maneira seguinte: na seção anterior foi provado que uma estimativa de primeira ordem, na fração de volume perturbado, da resposta constitutiva macroscópica associada ao domínio perturbado, pode ser escrita como

$$\mathbb{C}_\varepsilon \approx \mathbb{C} - v(\varepsilon)\mathbb{D}_{T\mu}, \quad (3.217)$$

e considerando, por exemplo, a componente $(\mathbb{C})_{1111}$, observa-se que para produzir uma diminuição significativa no seu valor temos que procurar os pontos onde o campo $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1111}$ atinge o maior valor positivo. Portanto, o campo mencionado anteriormente fornece um indicador de onde devem ser introduzidas as perturbações. No caso das outras componentes a análise é totalmente análoga. No entanto, e retomando a discussão levantada ao início do parágrafo, cabe mencionar que existe uma diferença importante na análise dos Casos A e B. De fato, o valor do parâmetro γ define se a perturbação possui uma rigidez menor ou maior que o material onde está sendo inserida. Portanto, para um valor de $\gamma < 1$ a perturbação introduzida é menos rígida que o material da matriz e, no caso contrário, para $\gamma > 1$ o material da inclusão tem uma rigidez maior que a matriz.

Assim, analisando novamente a componente $(\mathbb{C})_{1111}$, tem-se que para produzir uma diminuição significativa do seu valor, introduzindo uma inclusão circular de material com $\gamma < 1$, o procedimento é como mencionado anteriormente. Mas, no caso $\gamma > 1$ não é possível produzir uma diminuição no valor da componente $(\mathbb{C})_{1111}$, pois o valor do campo $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1111}$ é negativo em todo o domínio. Assim, nessa situação, uma inclusão com material caracterizado pelo parâmetro $\gamma > 1$ só pode produzir um incremento no valor da componente analisada. Mais uma vez, a análise das outras componentes é totalmente análoga.

Nas Fig.3.20 até Fig.3.28 são mostradas as diferentes posições das perturbações colocadas e do lado das mencionadas figuras, estão indicadas as respostas constitutivas homogeneizadas, obtidas para cada modelo constitutivo multi-escala.

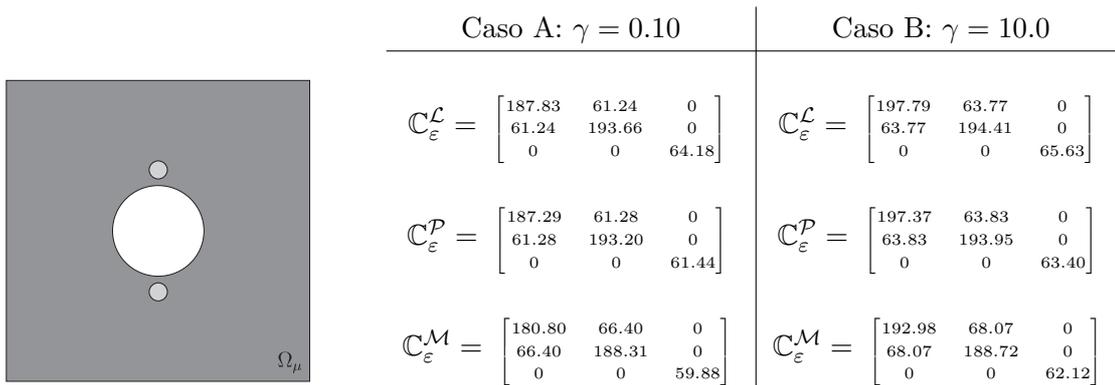


Figura 3.20: ex.1 - EVR perturbado

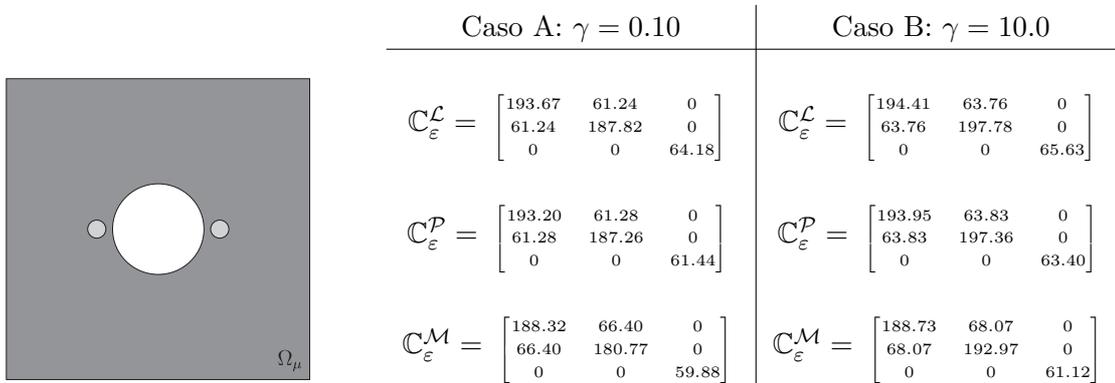


Figura 3.21: ex.1 - EVR perturbado

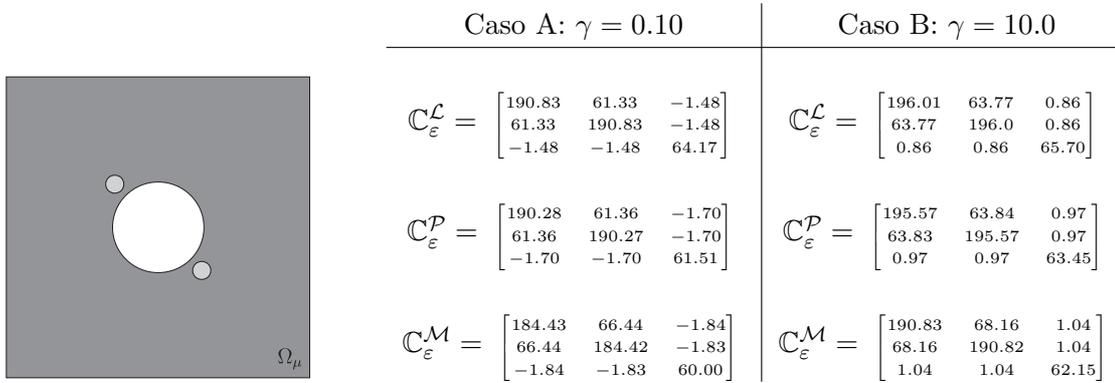


Figura 3.22: ex.1 - EVR perturbado

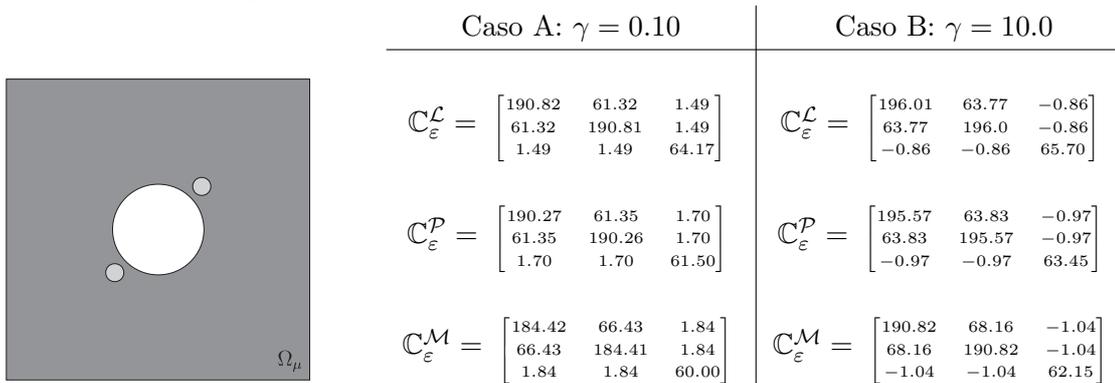


Figura 3.23: ex.1 - EVR perturbado

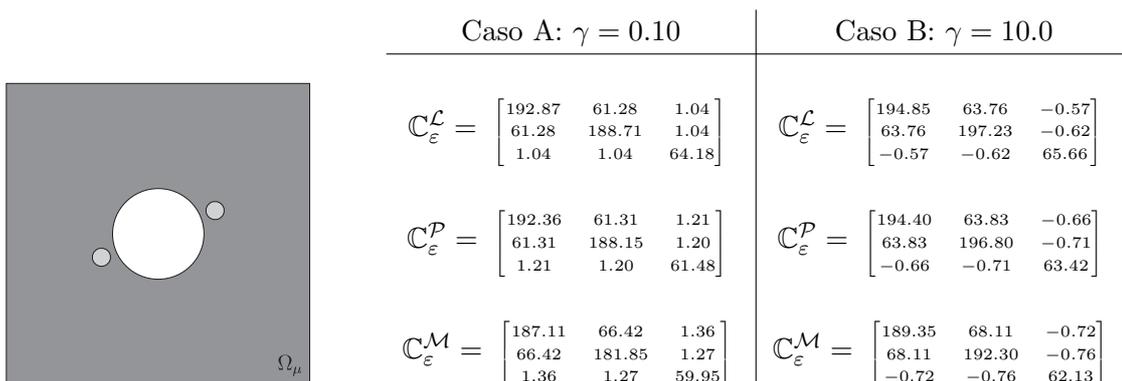


Figura 3.24: ex.1 - EVR perturbado

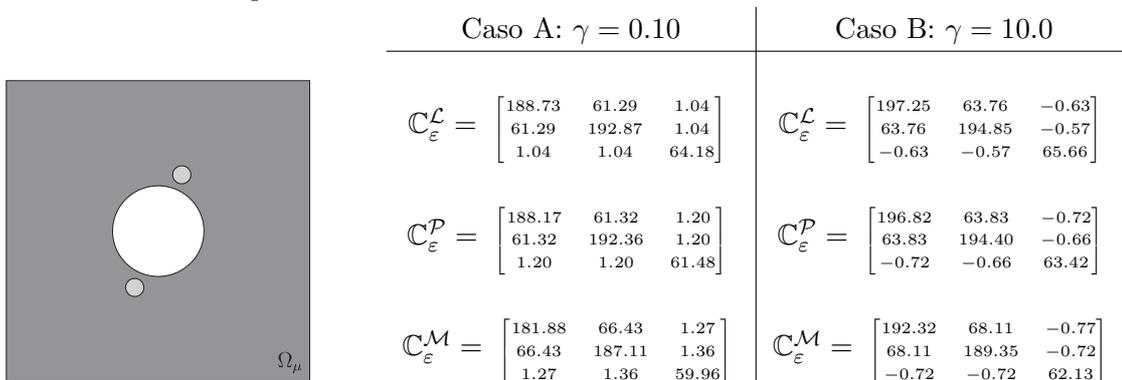


Figura 3.25: ex.1 - EVR perturbado

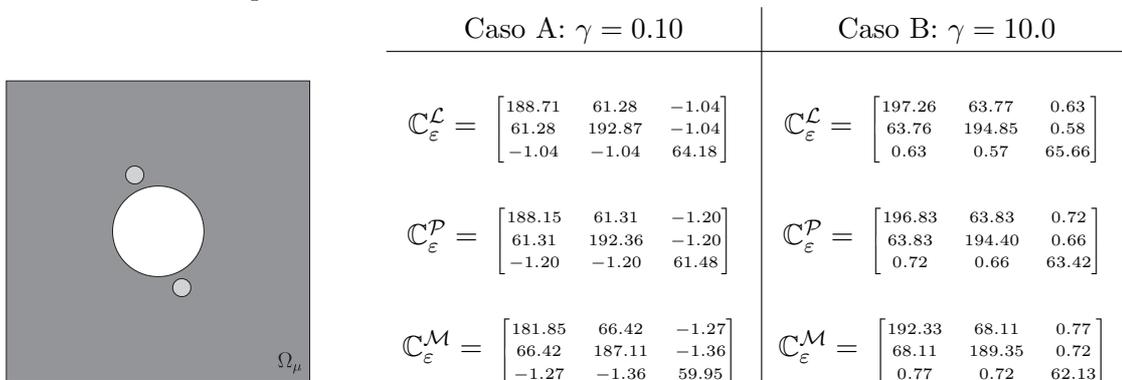


Figura 3.26: ex.1 - EVR perturbado

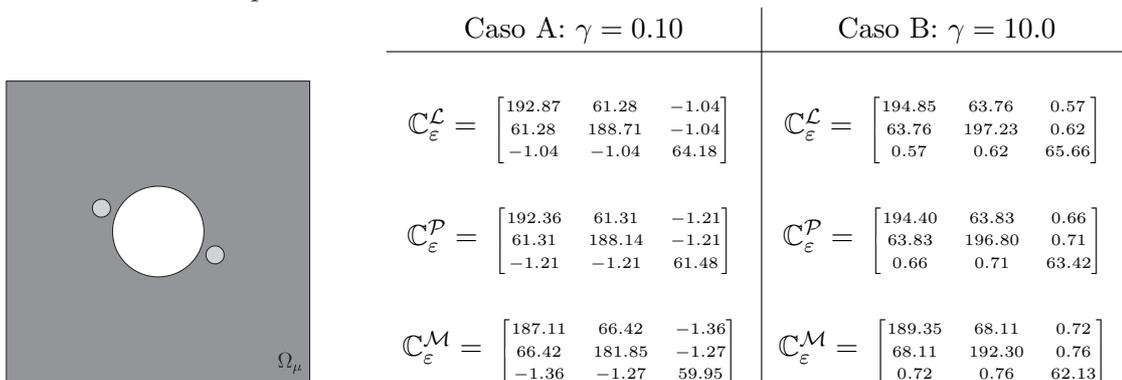


Figura 3.27: ex.1 - EVR perturbado

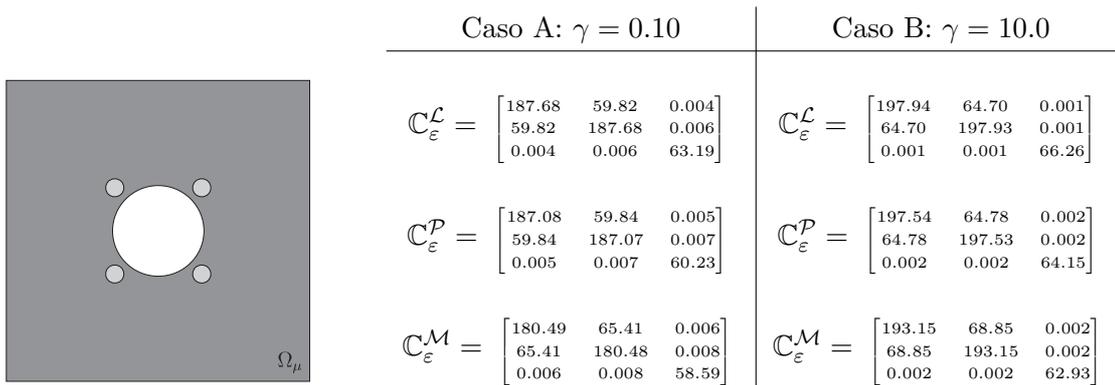


Figura 3.28: ex.1 - EVR perturbado

Considerando na análise, mais uma vez, a componente $(\mathbb{C}_\varepsilon)_{1111}$, note-se que introduzindo perturbações segundo a direção do vetor \mathbf{e}_2 (Fig.3.20), tem-se para o modelo de deslocamento linear no contorno, uma variação aproximada do 3,24% (Caso A) e 1,88 % (Caso B) com relação ao valor inicial da mesma componente, sendo que a componente $(\mathbb{C}_\varepsilon)_{2222}$ apresenta uma variação do 0,24% (Caso A) e 0,14% (Caso B), e as outras componentes apresentam uma variação média do 2% (Caso A) e 1,01%(Caso B) com relação ao seu valor original. No caso dos outros modelos multi-escala e das outras posições das perturbações, os resultados encontrados são análogos aos apresentados anteriormente. A análise prévia permite concluir que introduzindo perturbações no EVR, utilizando como indicador da posição o campo $\mathbb{D}_{T\mu}$, tem-se efetivamente uma variação significativa da componente estudada. Finalmente, cabe mencionar que os resultados da análise computacional mostrados acima corroboram a discussão apresentada no início do exemplo.

3.2.3.2 Exemplo 2

Neste exemplo será estudado o tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ para os casos limites do parâmetro γ mostrados nas eqs.(3.214) e (3.215). O EVR utilizado na análise é dado por um domínio quadrado de dimensões unitárias com material caracterizado pelo módulo de Young $E = 210.0$ MPa e coeficiente de Poisson $\nu = 1/3$, no qual estão inserido oito poros de raio variável distribuídos aleatoriamente no domínio, veja Fig.3.29. A discretização por elementos finitos utilizada na análise numérica está constituída por uma malha uniforme de 20410 elementos triangulares lineares gerando um total de 10561 nós.

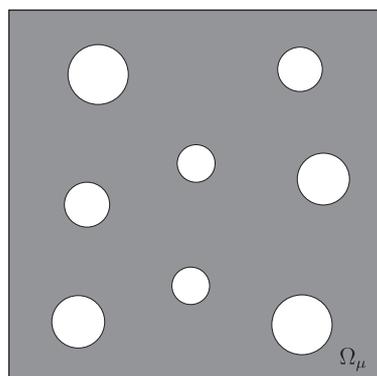


Figura 3.29: exemplo 2 - geometria do EVR de análise.

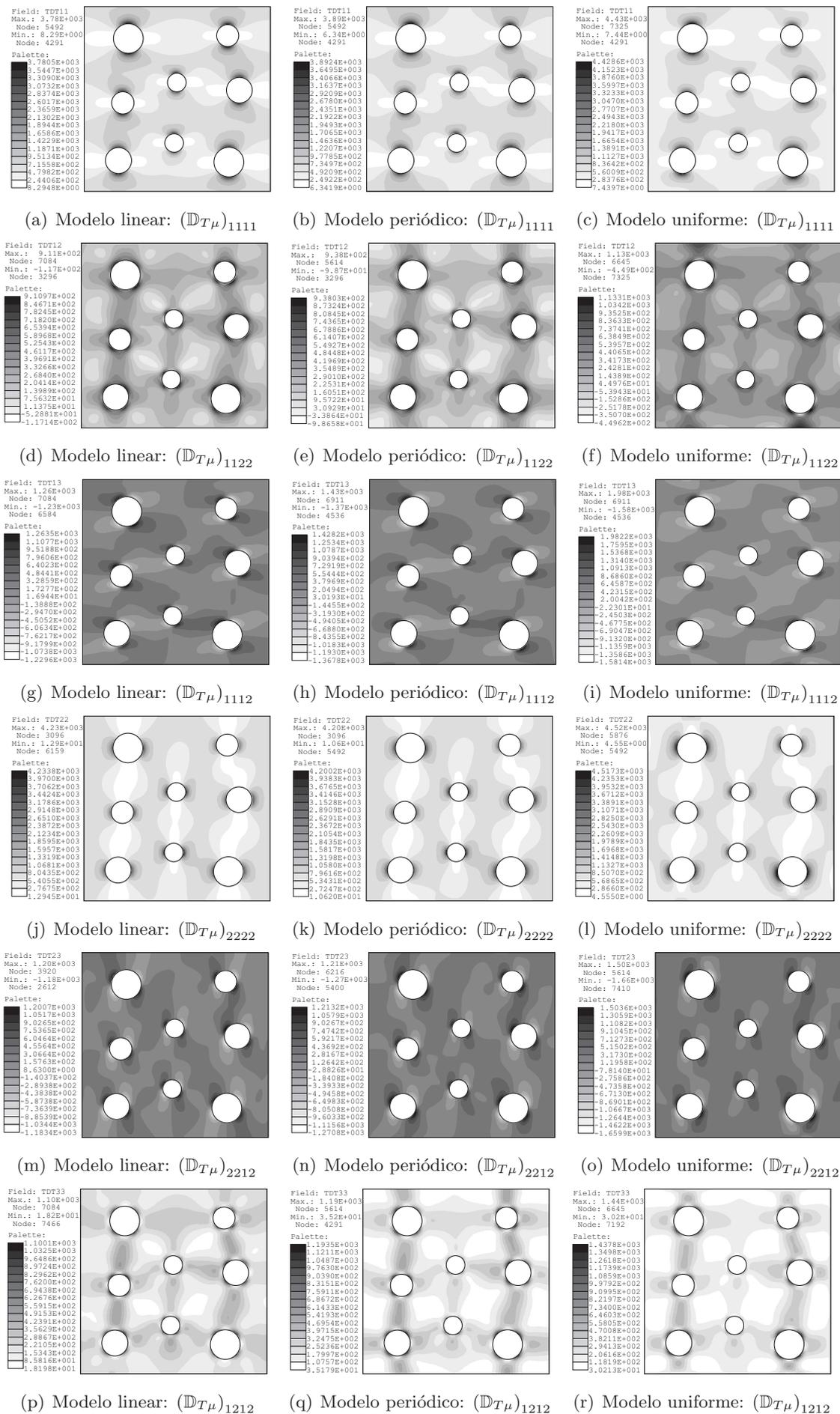


Figura 3.30: exemplo 2 - caso A: componentes do tensor $\mathbb{D}T\mu$ para $\gamma \rightarrow 0$.

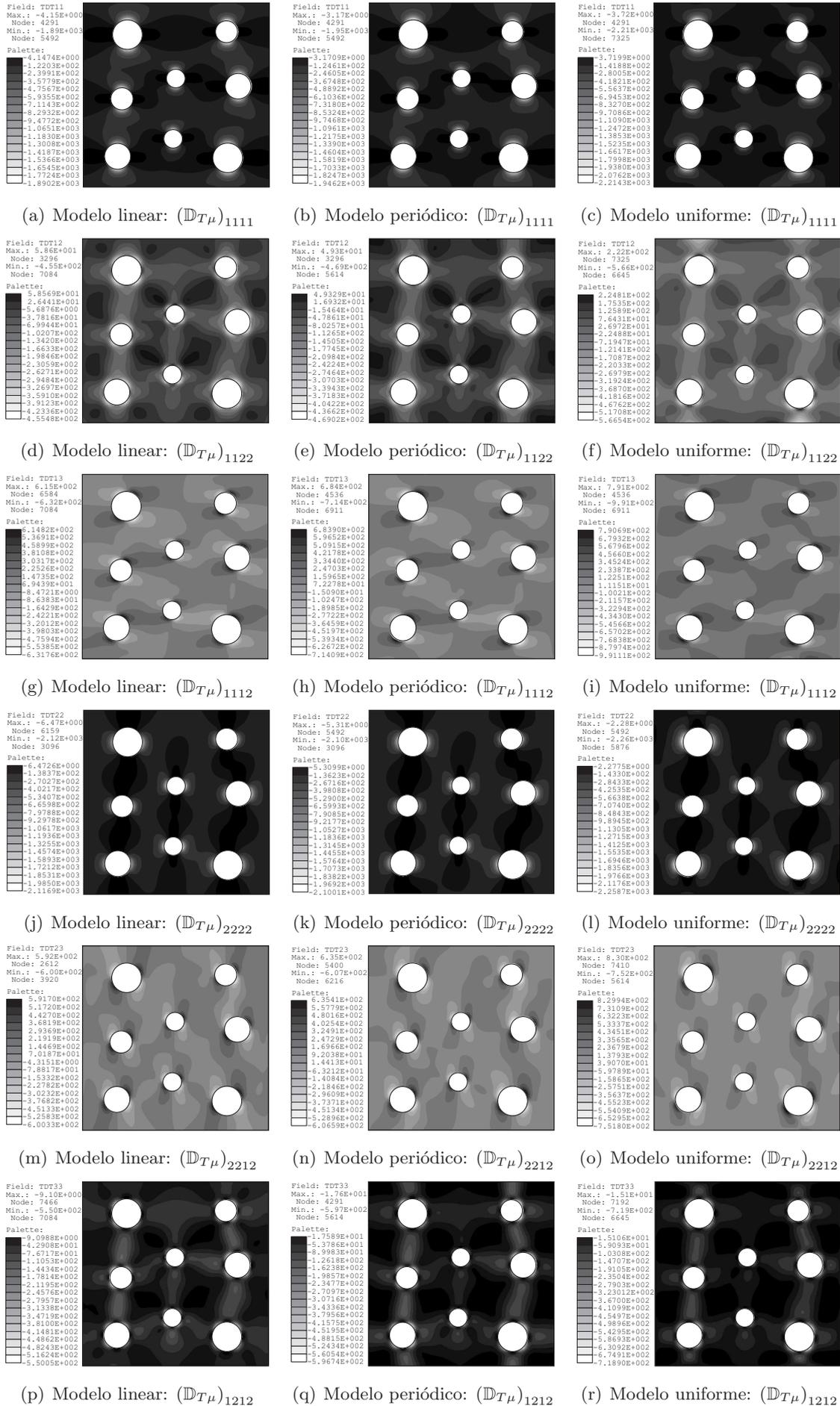


Figura 3.31: exemplo 2 - caso B: componentes do tensor $\mathbb{D}T\mu$ para $\gamma \rightarrow \infty$.

O EVR descrito ao início, fornece ao nível macroscópico os seguintes tensores constitutivos homogeneizados \mathbb{C} (para cada modelo multi-escala):

$$\mathbb{C}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 174.25 & 55.92 & -0.22 \\ 55.92 & 176.80 & 0.03 \\ -0.22 & 0.03 & 57.74 \end{bmatrix}, \quad \mathbb{C}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 173.55 & 55.95 & -0.12 \\ 55.95 & 175.96 & -0.22 \\ -0.12 & -0.22 & 55.63 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbb{C}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 171.46 & 58.16 & -0.37 \\ 58.16 & 170.55 & 0.30 \\ -0.37 & 0.30 & 54.18 \end{bmatrix}.$$

Nas Figs.3.30 ($\gamma \rightarrow 0$) e 3.31 ($\gamma \rightarrow \infty$) são apresentados as componentes do tensor de sensibilidade topológico $\mathbb{D}_{T\mu}$ para cada modelo constitutivo multi-escala. Utilizando o mesmo procedimento de análise mostrado no exemplo anterior, agora será estudado o comportamento da componente $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1111}$, e sua consequência na componente $(\mathbb{C})_{1111}$ da resposta constitutiva macroscópica, para as duas situações limites do parâmetro γ apresentadas ao início, uma vez que os resultados obtidos da análise para essa componente são trivialmente estendidos para as outras. Segundo o mostrado nas Fig.3.30 e Fig.3.31, qualitativamente não existe uma diferença apreciável nos resultados obtidos para os diferentes modelos constitutivos multi-escala. Assim sendo, na análise seguinte será utilizado como referência o modelo de deslocamento linear no contorno. Considerando, portanto, o caso do parâmetro $\gamma \rightarrow 0$ (Fig.3.30(a)), percebe-se que a sensibilidade topológica apresenta uma tendência a coalescer os poros, criando bandas de rigidez nula alinhadas na direção do vetor \mathbf{e}_2 (regiões mais escuras), gerando uma diminuição da resposta elástica associada à direção do vetor \mathbf{e}_1 (Fig.3.32(b)). Por outro lado, no caso do parâmetro $\gamma \rightarrow \infty$ (Fig.3.31) a tendência mostrada pelo campo de sensibilidade topológica é de vincular os poros, na direção do vetor \mathbf{e}_2 , através de uma inclusão rígida (regiões mais claras) com o objetivo de aumentar o valor da componente $(\mathbb{C})_{1111}$ (Fig.3.32(c)).

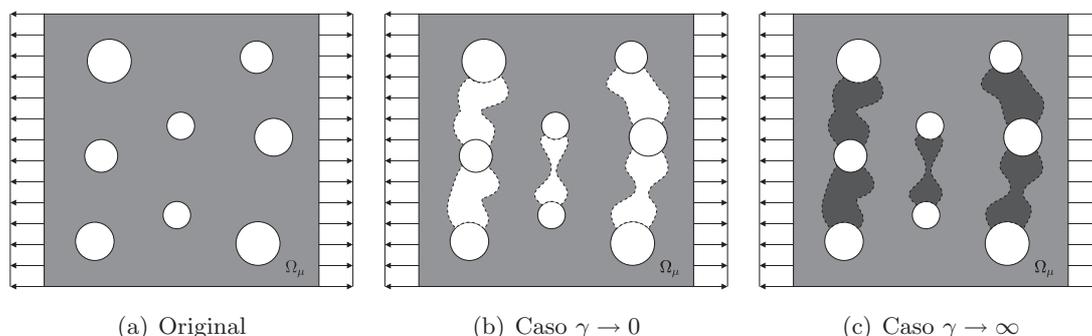


Figura 3.32: exemplo 2 - tendência do campo $(\mathbb{D}_{T\mu})_{1111}$.

Cabe mencionar ainda que, embora a tendência mostrada pela sensibilidade topológica para os casos $\gamma \rightarrow 0$ e $\gamma \rightarrow \infty$ seja a mesma, existe uma diferença conceitual muito importante entre ambos os casos de análise, o que justifica plenamente a apresentação das duas situações limites para o valor do parâmetro γ .

3.2.3.3 Exemplo 3

Considere um EVR quadrado de dimensões unitárias com dois poros circulares de raio $r = 0.05$, centrados nas coordenadas $(1/2, 1/3)$ e $(1/2, 2/3)$ – considerando que a origem do sistema de coordenadas cartesianas está posicionada no canto inferior esquerdo do EVR, como pode ser visto na Fig.3.33. O material utilizado na análise está caracte-

rizado através do Módulo de Young $E = 50.0$ MPa e coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$. Complementando a descrição da micro-célula utilizada neste exemplo, cabe mencionar que na discretização por elementos finitos foi utilizada uma malha uniforme com 22686 elementos triangulares quadráticos isoparamétricos, gerando um total de 45833 nós.

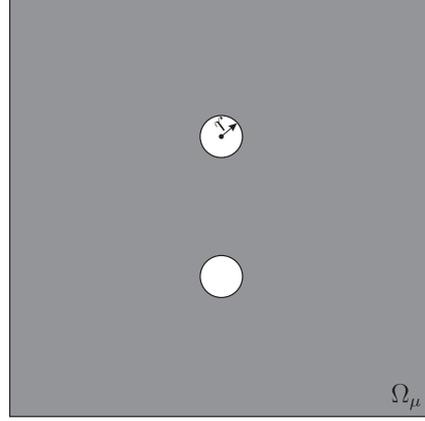


Figura 3.33: exemplo 3 - geometria do EVR de análise.

A micro-célula descrita anteriormente fornece ao nível macroscópico a seguinte resposta constitutiva, para cada um dos modelos multi-escala estudado:

$$\mathbb{C}^{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} 52.47 & 15.77 & 0.0 \\ 15.77 & 52.63 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 18.31 \end{bmatrix}, \quad \mathbb{C}^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 52.46 & 15.77 & 0.0 \\ 15.77 & 52.61 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 18.27 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbb{C}^{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 52.43 & 15.82 & 0.0 \\ 15.82 & 52.53 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 18.25 \end{bmatrix}.$$

Como mencionado ao início desta seção, neste exemplo propõe-se mostrar um procedimento de análise que permite tornar isotrópica uma resposta constitutiva inicialmente anisotrópica, introduzindo furos (perturbações) circulares. Com esse objetivo, considere inicialmente a seguinte decomposição do tensor de elasticidade macroscópico associado ao domínio perturbado \mathbb{C}_ε (Bankus (1970) [13], Spenser (1970) [122] e Ting & He (2006) [126]):

$$\mathbb{C}_\varepsilon = \mathbb{C}_\varepsilon^{iso} + \mathbb{Z}_\varepsilon, \quad (3.218)$$

onde $\mathbb{C}_\varepsilon^{iso}$ é a parte isotrópica do tensor \mathbb{C}_ε e \mathbb{Z}_ε é o tensor de quarta ordem simétrico complemento ortogonal de $\mathbb{C}_\varepsilon^{iso}$ (Gazis *et al.* (1963) [41] e Tu (1968) [130]). Note-se da expressão (3.218) que a diferença entre \mathbb{C}_ε e $\mathbb{C}_\varepsilon^{iso}$ será mínima quando $\mathbb{Z}_\varepsilon \rightarrow \mathbb{0}$. Visando, portanto, procurar os pontos $\mathbf{y} \in \Omega_\mu$ onde introduzir as perturbações que minimizam a diferença entre \mathbb{C}_ε e $\mathbb{C}_\varepsilon^{iso}$, define-se a função escalar $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ como:

$$\zeta_\varepsilon(\mathbf{y}) := \mathbb{Z}_\varepsilon \cdot \mathbb{Z}_\varepsilon \quad \Rightarrow \quad \|\mathbb{C}_\varepsilon - \mathbb{C}_\varepsilon^{iso}\|^2 \xrightarrow{\zeta_\varepsilon(\mathbf{y}) \rightarrow 0} 0, \quad (3.219)$$

onde $\|(\cdot)\|$ denota a clássica norma euclidiana para tensores de quarta ordem.

A dependência da função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ com o parâmetro ε decorre do fato da presença da função $v(\varepsilon)$ na estimativa da resposta constitutiva macroscópica associada ao domínio perturbado \mathbb{C}_ε , ou seja, para calcular a função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ é necessário fornecer a fração de volume perturbado com a qual se deseja minimizar a distância entre os tensores \mathbb{C}_ε e $\mathbb{C}_\varepsilon^{iso}$.

Além do mais, o tensor \mathbb{C}_ε será calculado através da estimativa de primeira ordem na fração de volume perturbado apresentada na eq.(3.217).

Baseado no discutido anteriormente, o procedimento de análise é o seguinte: empregando as informações fornecidas pelo tensor de sensibilidade topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$, o EVR será perturbado com a introdução de furos circulares onde a função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ atinja seu valor mínimo. Assim sendo, neste exemplo serão exploradas as seguintes 3 situações de configurações de perturbações:

- Caso A: 4 furos de raio 0.01 $\Rightarrow v(\varepsilon) = 4\pi(0.01)^2 \approx 0.001256$;
- Caso B: 2 furos de raio $0.05/\sqrt{2}$ $\Rightarrow v(\varepsilon) = 2\pi(0.05/\sqrt{2})^2 \approx 0.007854$;
- Caso C: 2 furos de raio 0.05 $\Rightarrow v(\varepsilon) = 2\pi(0.05)^2 \approx 0.015708$.

Em seguida, na Fig.3.34 são mostradas as microestruturas perturbadas, segundo o procedimento ora descrito, onde se observam as posições dos furos para cada modelo constitutivo multi-escala. Logo, a Tabela 3.4 apresenta a resposta constitutiva homogeneizada associada a cada microestrutura das apresentadas na Fig.3.34.

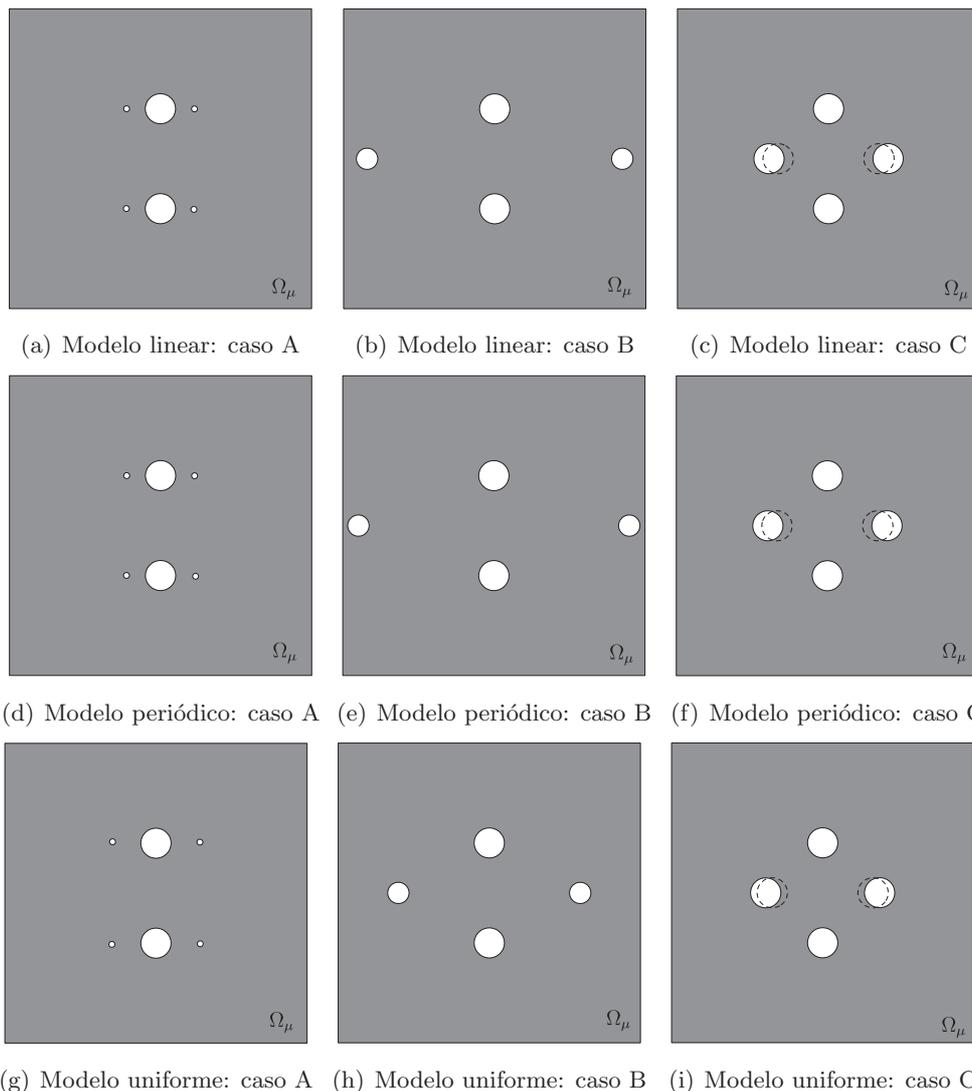


Figura 3.34: exemplo 3 - configuração das perturbações.

$$\begin{aligned}
 \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{L}} &= \begin{bmatrix} 52.3762 & 15.6843 & -0.0017 \\ 15.6843 & 52.3848 & 0.0003 \\ -0.0017 & 0.0003 & 18.1972 \end{bmatrix} & \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} &= \begin{bmatrix} 52.3719 & 15.6837 & -0.002 \\ 15.6837 & 52.3760 & 0.0004 \\ -0.002 & 0.0004 & 18.1514 \end{bmatrix} & \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{M}} &= \begin{bmatrix} 52.3057 & 15.7477 & 0.0001 \\ 15.7477 & 52.3085 & 0.0 \\ 0.0001 & 0.0 & 18.1513 \end{bmatrix} \\
 & & & & \text{(a) Caso A.} \\
 \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{L}} &= \begin{bmatrix} 51.4815 & 15.4377 & 0.0 \\ 15.4377 & 51.4290 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 17.9286 \end{bmatrix} & \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} &= \begin{bmatrix} 51.5337 & 15.3792 & 0.0 \\ 15.4792 & 51.2370 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 17.7375 \end{bmatrix} & \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{M}} &= \begin{bmatrix} 51.2395 & 15.5456 & 0.0 \\ 15.5456 & 51.2566 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 17.8362 \end{bmatrix} \\
 & & & & \text{(b) Caso B.} \\
 \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{L}} &= \begin{bmatrix} 50.1642 & 15.2883 & -0.0003 \\ 15.2883 & 50.0289 & 0.0002 \\ -0.0003 & 0.0002 & 17.655 \end{bmatrix} & \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} &= \begin{bmatrix} 50.1435 & 15.2852 & -0.0004 \\ 15.2852 & 50.0114 & 0.0002 \\ -0.0004 & 0.0002 & 17.5624 \end{bmatrix} & \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{M}} &= \begin{bmatrix} 49.8573 & 15.5182 & -0.0007 \\ 15.5182 & 49.7767 & 0.0004 \\ -0.0007 & 0.0004 & 17.5384 \end{bmatrix} \\
 & & & & \text{(c) Caso C.}
 \end{aligned}$$

Tabela 3.4: exemplo 3 - resposta constitutiva macroscópica.

Levando em consideração a resposta constitutiva inicial \mathbb{C} , tem-se dos resultados mostrados na Tabela 3.4, para o Caso A, uma queda de duas ordens de grandeza na diferença entre os valores $(\mathbb{C}_\varepsilon)_{1111}$ e $(\mathbb{C}_\varepsilon)_{2222}$, já no Caso B a diferença entre os mencionados valores desce somente uma ordem, e finalmente no Caso C essa diferença preserva a mesma ordem de grandeza inicial, mas houve uma diminuição no seu valor. Além do mais, as outras componentes preservam sua ordem de grandeza.

Dos resultados mostrados anteriormente, observa-se que quanto menor o tamanho da perturbação introduzida, menor a distância entre a resposta constitutiva inicial e uma resposta do tipo isotrópica do tensor de elasticidade macroscópica associado ao domínio do EVR perturbado \mathbb{C}_ε . Acredita-se que esse comportamento decorre de dois fatos: (i) a análise de sensibilidade topológica é desenvolvida para perturbações infinitesimais, mas na prática é necessário introduzir perturbações finitas, portanto, é possível que a estimativa de primeira ordem – na fração de volume – fornecida pelo tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ não seja totalmente adequada para tamanhos de perturbações (furos) importantes; e (ii) o cálculo da resposta constitutiva macroscópica é realizado através da solução de um sistema de equações variacionais levando em conta a topologia completa do problema, portanto, quanto maior o tamanho das perturbações (furos) introduzidas, maior a interação entre elas, afetando de forma mais significativa a resposta macroscópica final. Em particular, nas figuras associadas ao Caso C (Figs.3.34(c), 3.34(f) e 3.34(i)) é mostrada em linha tracejada o que poderia ser considerado, para este caso em particular, de posição ótima das perturbações de raio 0.05, mostrando que a estimativa de primeira ordem fornecida pela derivada topológica é suficiente para determinar com certo nível de precisão onde devem ser introduzidos os furos. Cabe mencionar que a maior distância entre a resposta constitutiva inicial e a procurada (isotrópica) corresponde ao Caso C, cujo comportamento foi anteriormente analisado, mas aqui se deseja reforçar que a resposta constitutiva homogeneizada é muito sensível à posição das perturbações.

Finalmente, observa-se ainda que, os resultados obtidos não apresentam uma diferença apreciável entre os diferentes modelos constitutivos multi-escala. Portanto, na Fig.3.35 são apresentadas as isofoixas da função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ associadas ao modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR, para os três casos estudados. Percebe-se claramente a posição onde devem ser colocados os furos, o que mostra a qualidade da informação obtida com o procedimento apresentado neste exemplo.

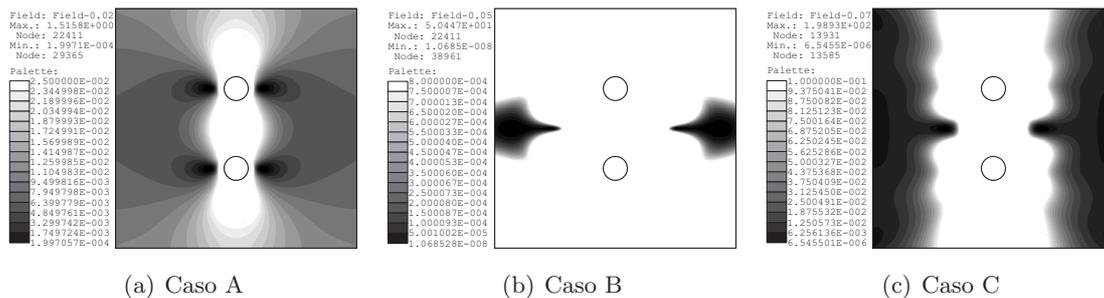


Figura 3.35: exemplo 3 - função $\zeta_\epsilon(\mathbf{y})$ para o modelo periódico.

3.2.3.4 Exemplo 4

Baseado nos conceitos introduzidos no exemplo anterior, agora será estudada uma micro-estrutura com resposta constitutiva anisotrópica e serão simulados os quatro primeiros passos de um processo de otimização, com o objetivo de tornar isotrópica a resposta constitutiva do EVR analisado. Portanto, a micro-célula estudada está caracterizada por um quadrado unitário com três poros de raio $r = 0.05$, com centro nas coordenadas $(11/20, 1/5)$; $(3/4, 3/5)$ e $(9/20, 17/20)$ (considerando que a origem do sistema de coordenadas cartesianas está posicionada no canto inferior esquerdo do EVR), como pode ser visto na Fig.3.36. O material do EVR está definido através do Módulo de Young $E = 210.0$ MPa e coeficiente de Poisson $\nu = 1/3$. Na resolução computacional foi empregada uma discretização uniforme por elementos finitos com 22533 elementos triangulares isoparamétricos quadráticos com um total de 45557 nós.

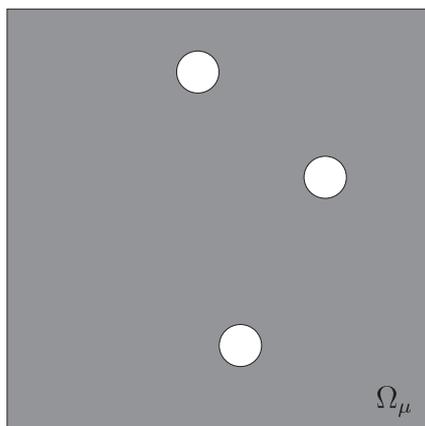


Figura 3.36: exemplo 4 - geometria do EVR de análise.

Nos exemplos anteriores foi mostrado que os resultados obtidos não variam apreciavelmente com os diferentes modelos constitutivos multi-escala, portanto, neste exemplo somente será estudado o modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno. Pois esse modelo é o mais estudado – e desenvolvido – na literatura especializada. Assim, a resposta constitutiva homogeneizada do EVR estudado é dada por:

$$\mathbb{C}^P = \begin{bmatrix} 219.9712 & 73.4158 & -0.1666 \\ 73.4158 & 220.6337 & 0.1768 \\ -0.1666 & 0.1768 & 73.4065 \end{bmatrix}.$$

Considerando a definição da função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ mostrada na eq.(3.219), serão simulados quatro passos de um processo de otimização, onde cada passo tem as seguintes etapas: (i) calcular a função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ associada ao EVR da iteração; (ii) perturbar o domínio do EVR introduzindo furos nos pontos onde a função $\zeta_\varepsilon(\mathbf{y})$ seja mínima. Em particular, a fração de volume a ser retirada em cada passo é constante no valor de $v(\varepsilon) = \pi(0.02)^2 \approx 0.001256$, obtendo-se ao final do processo iterativo um volume sólido de $|\Omega_{\mu_\varepsilon}^m| = 0.99623$. Além do mais, serão exploradas três situações para a configuração da quantidade de material a ser retirado em cada iteração:

- Caso A: 1 furo de raio 0.02;
- Caso B: 2 furos de raio $0.02/\sqrt{2} \approx 0.014142$;
- Caso C: 4 furos de raio 0.01.

A resposta constitutiva macroscópica obtida ao final da simulação descrita anteriormente é apresentada no que segue:

- Caso A:

$$\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 217.2772 & 72.0516 & -0.009 \\ 72.0516 & 217.2738 & 0.0042 \\ -0.009 & 0.0042 & 71.9479 \end{bmatrix};$$

- Caso B:

$$\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 217.1674 & 72.1851 & -0.0022 \\ 72.1851 & 217.1707 & 0.0002 \\ -0.0022 & 0.0002 & 72.1204 \end{bmatrix};$$

- Caso C:

$$\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} = \begin{bmatrix} 217.2912 & 72.1089 & 0.0063 \\ 72.1089 & 217.2908 & -0.006 \\ 0.0063 & -0.006 & 71.9797 \end{bmatrix}.$$

As topologias obtidas em cada iteração para cada caso dos mencionados anteriormente são mostrados nas Figs.3.37. Para avaliar o desempenho da metodologia proposta neste exemplo, defini-se a função

$$\xi := \left| \frac{(\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}})_{1111} - (\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}})_{2222} + (\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}})_{1112} + (\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}})_{2212}}{\max_{i \in \{1,2\}} (\mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}})_{iiii}} \right|, \quad (3.220)$$

como uma medida de distância relativa entre a resposta constitutiva atual do EVR e a resposta desejada (isotrópica para este exemplo). Assim sendo, da definição estabelecida acima, segue que a função ξ possui a seguinte propriedade

$$\xi \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbb{C}_\varepsilon^{\mathcal{P}} \rightarrow 2\mu_\varepsilon^{\mathcal{P}}\mathbb{I} + \lambda_\varepsilon^{\mathcal{P}}(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}). \quad (3.221)$$

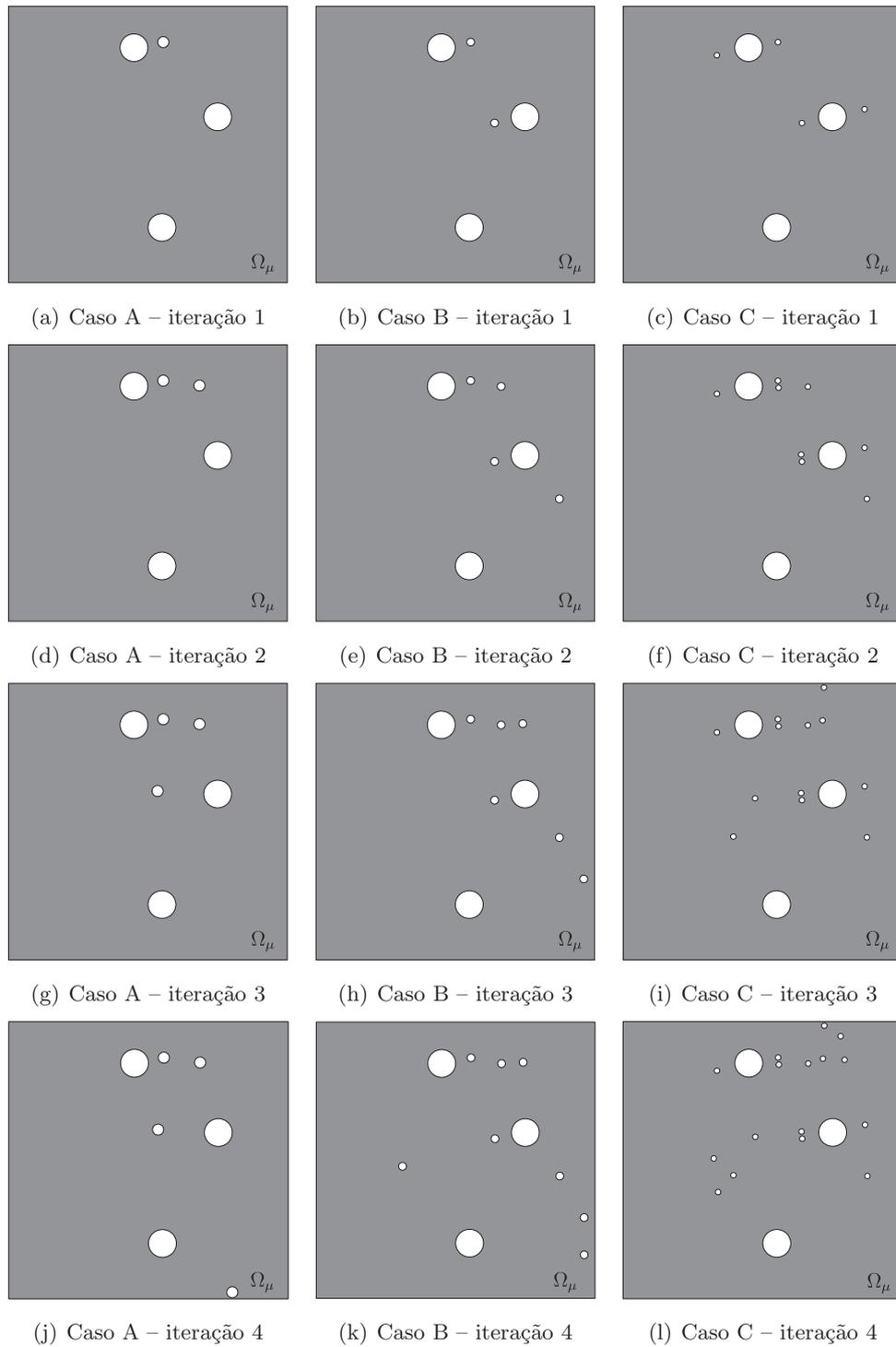


Figura 3.37: exemplo 4 - domínios topologicamente perturbado em cada iteração.

A avaliação da função ξ para cada caso estudado ao longo da simulação do processo de otimização é apresentada na Fig.3.38. Note-se que, aqui e no exemplo anterior, o objetivo está focado no tipo de resposta macroscópica obtida do EVR e não no valor numérico das constantes elásticas que caracteriza essa resposta, ou seja, procura-se uma microestrutura que possua uma resposta constitutiva final do tipo $(3.221)_2$, sem ser muito relevante, por enquanto, o valor das constantes de Lamé μ_ε^P e λ_ε^P . Entretanto, dos resultados anteriores observa-se que o valor da resposta constitutiva macroscópica é menor que a

inicial, esse comportamento (estudado em detalhe nos exemplos 1 e 2, veja Seções 3.2.3.1 e 3.2.3.2) decorre do fato de ter empregado furos como perturbações. Para produzir o efeito contrário, poder-se-ia utilizar como perturbação inclusões de material mais rígido que a matriz.

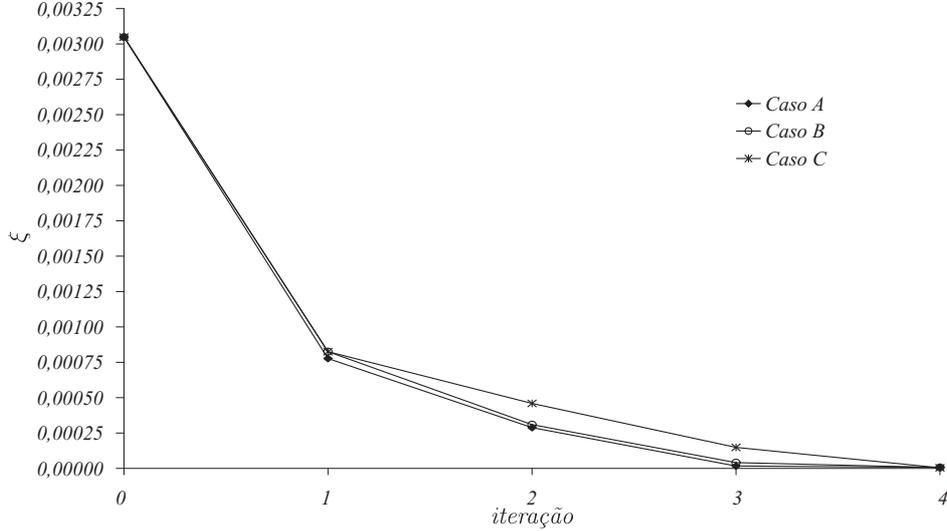


Figura 3.38: exemplo 4 - evolução da função ξ na simulação.

Finalmente, observa-se que, embora a quantidade de furos introduzidos no processo iterativo seja diferente para cada caso, as respostas constitutivas finais, obtidas da simulação do processo de otimização, são similares. Portanto, a quantidade e o tamanho dos furos a serem introduzidos em cada passo do processo devem ser considerados uma variável de projeto, ou seja, tem-se liberdade para escolher o tamanho e quantidade de perturbações, mas a técnica aqui apresentada fornece as posições onde elas **devem** ser colocadas no EVR.

3.2.3.5 Exemplo 5

Neste exemplo será apresentada uma metodologia de análise para ser utilizada no projeto e/ou otimização de microestruturas. Com esse objetivo e considerando uma resposta constitutiva macroscópica desejada, caracterizada através tensor elástico \mathbb{C}^* , defini-se o funcional de forma $\psi(\varepsilon)$, associado ao domínio perturbado $\Omega_{\mu\varepsilon}$, como:

$$\psi(\varepsilon) := \|\mathbb{C}_\varepsilon - \mathbb{C}^*\|^2 \quad \Rightarrow \quad \psi(0) = \|\mathbb{C} - \mathbb{C}^*\|^2, \quad (3.222)$$

onde \mathbb{C} e \mathbb{C}_ε denotam, respectivamente, as respostas constitutivas homogeneizadas associadas aos domínios Ω_μ (não perturbado) e $\Omega_{\mu\varepsilon}$ (perturbado). Além do mais, assumi-se que a norma euclidiana de um tensor é definida, através do produto escalar, como

$$\|\mathbb{A}\| := \sqrt{\mathbb{A} \cdot \mathbb{A}}, \quad (3.223)$$

sendo \mathbb{A} um tensor arbitrário de quarta ordem.

Considerando a expansão assintótica da resposta constitutiva macroscópica \mathbb{C}_ε apre-

sentada na eq.(3.213), tem-se que a expansão assintótica topológica do funcional $\psi(\varepsilon)$ pode ser escrita como

$$\|\mathbb{C}_\varepsilon - \mathbb{C}^*\|^2 = \|\mathbb{C} - \mathbb{C}^*\|^2 - 2v(\varepsilon)\mathbb{D}_{T\mu} \cdot (\mathbb{C} - \mathbb{C}^*) + o(v(\varepsilon)), \quad (3.224)$$

onde o campo escalar $2\mathbb{D}_{T\mu} \cdot (\mathbb{C} - \mathbb{C}^*)$ é reconhecido como a derivada topológica associada ao funcional ψ , ou seja,

$$D_{T\mu}\psi := 2\mathbb{D}_{T\mu} \cdot (\mathbb{C} - \mathbb{C}^*). \quad (3.225)$$

Observa-se da expressão anterior que, para obter uma resposta constitutiva \mathbb{C}^* a partir de uma resposta inicial \mathbb{C} , devem ser introduzidas perturbações singulares nos pontos onde o campo de sensibilidade topológica $D_{T\mu}\psi$ atinja seus valores máximos. Em resumo, dado inicialmente um tensor de elasticidade macroscópico desejado \mathbb{C}^* e uma micro-estrutura com resposta constitutiva homogeneizada \mathbb{C} , com domínio denotado por Ω_μ , o mencionado campo escalar $D_{T\mu}\psi$ mede a sensibilidade topológica à introdução de uma perturbação singular no domínio Ω_μ , que minimize (ou maximize) a diferença entre as respostas constitutivas \mathbb{C} e \mathbb{C}^* . Além do mais, note-se que a derivada topológica $D_{T\mu}\psi$ nem sempre é positiva, pois seu sinal provém do tensor $\mathbb{D}_{T\mu}$ (através do valor do parâmetro γ) e da diferença entre os tensores \mathbb{C} e \mathbb{C}^* (atrelado à resposta constitutiva inicial do EVR).

Para exemplificar o discutido anteriormente, agora será estudado o caso particular de um EVR quadrado de dimensões unitárias com um volume de sólido de $|\Omega_\mu^m| \approx 0.9562$ e material caracterizado pelo módulo de Young $E = 210.0 \text{ MPa}$ e coeficiente de Poisson $\nu = 1/3$. Na simulação numérica são estudadas duas distribuições de vazios diferentes para o mesmo volume sólido:

- Caso A: um único poro centrado de raio $r \approx 0.118$ (Fig.3.39(a)) no domínio Ω_μ , discretizado com uma malha uniforme de elementos finitos isoparamétricos quadráticos com um total de 44478 nós e 22002 elementos.
- Caso B: 4 poros de raio $r \approx 0.059$ centrados nas coordenadas cartesianas $(1/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4)$; $(3/4, 1/4)$ e $(3/4, 3/4)$, considerando que a origem do sistema de coordenadas cartesianas está posicionada no canto inferior esquerdo do EVR (Fig.3.39(b)). Na discretização foi utilizada uma malha uniforme de elementos finitos isoparamétricos quadráticos com um total de 44693 nós e 22074 elementos.

Para as duas situações de análise mencionadas anteriormente, a resposta constitutiva homogeneizada é isotrópica, cujos tensores elásticos são os seguintes:

$$\mathbb{C}_A = \begin{bmatrix} 208.239 & 68.684 & 0.0 \\ 68.684 & 208.239 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 68.613 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbb{C}_B = \begin{bmatrix} 208.240 & 68.683 & 0.0 \\ 68.683 & 208.240 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 68.615 \end{bmatrix}. \quad (3.226)$$

Como tensor de condutividade térmica objetivo, adota-se uma resposta constitutiva ortotrópica como a mostrada no exemplo 1 desta seção, para o modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR com $\gamma = 0.10$ (veja Fig.3.20), aqui repetida

por conveniência:

$$\mathbb{C}^* = \begin{bmatrix} 187.29 & 61.28 & 0.0 \\ 61.28 & 193.20 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 61.44 \end{bmatrix}. \quad (3.227)$$

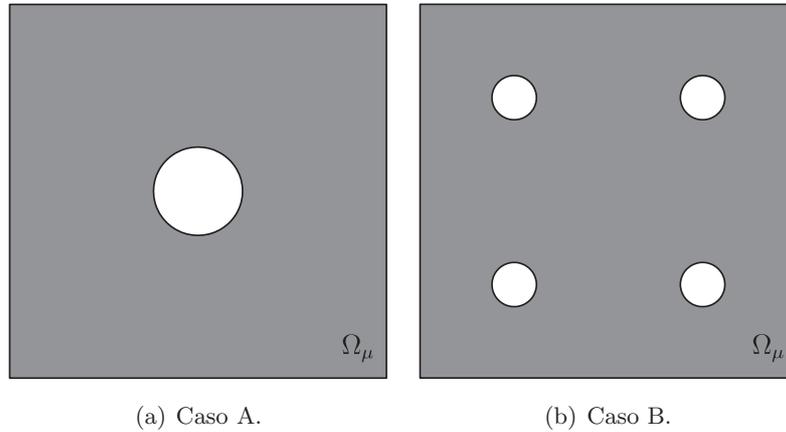


Figura 3.39: exemplo 5 - domínios de análise para os casos de estudo.

O procedimento de análise proposto neste exemplo pode ser resumido nas seguintes etapas: (i) dado um EVR, obter a resposta constitutiva homogeneizada \mathbb{C} ; (ii) calcular o tensor de sensibilidade topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$, associado ao domínio Ω_μ do EVR; e (iii) construir o campo escalar $D_{T\mu}\psi$ com a expressão (3.225) e a resposta desejada \mathbb{C}^* ora apresentada. Pelas mesmas questões mencionadas no exemplo anterior, agora será estudado somente o modelo constitutivo multi-escala associado a flutuações periódicas de deslocamento no contorno do EVR. Assim sendo, na Fig.3.40 são mostrados os campos de sensibilidade topológica $D_{T\mu}\psi$ para os Casos A e B, respectivamente.

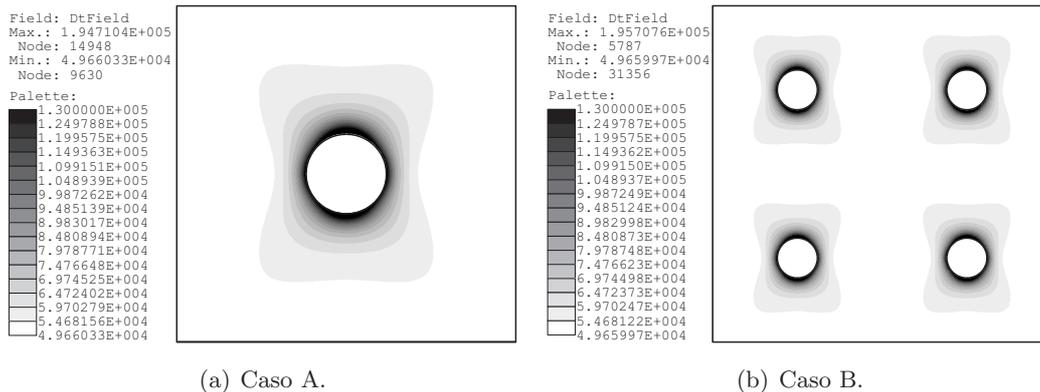


Figura 3.40: exemplo 5 - campo D_T para os casos de estudo.

Observa-se da figura anterior que, para cada caso estudado, os máximos do campo de sensibilidade topológica $D_{T\mu}\psi$ ocorrem no contorno dos poros preexistentes. Indicando uma tendência a mudar de forma do furo circular para um furo elíptico, minimizando a distância entre as resposta \mathbb{C} e \mathbb{C}^* . Essa tendência é mostrada na Fig.3.41.

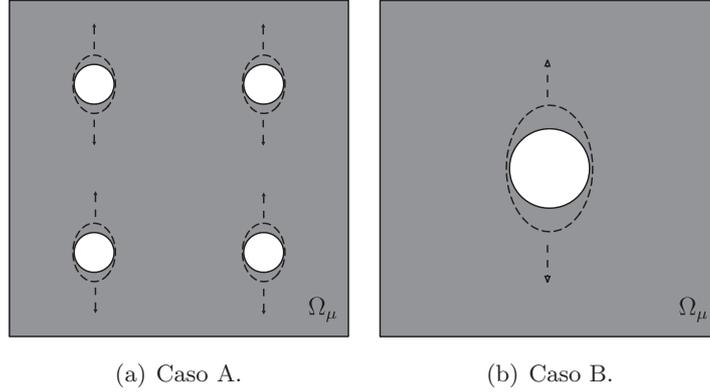


Figura 3.41: exemplo 5 - tendência do campo D_T .

Finalmente, cabe mencionar que, a metodologia apresentada neste exemplo é factível de ser utilizada no projeto ou otimização de micro-estruturas, pois a derivada topológica do funcional ψ , mostrada na eq.(3.225), pode ser utilizada como direção de descida de um algoritmo de otimização. De fato, propõe-se a seguinte estrutura para um algoritmo que minimize a distância entre as respostas constitutivas macroscópicas \mathbb{C} e \mathbb{C}^* :

- **Descrição** completa do domínio inicial do EVR Ω_μ , a resposta constitutiva macroscópica desejada \mathbb{C}^* , o valor do parâmetro γ , o número máximo de iterações N e uma tolerância tol .
- **Calcule** os valores iniciais (iteração $j = 0$) da resposta constitutiva macroscópica \mathbb{C} , o tensor de sensibilidade topológica $\mathbb{D}_{T\mu}$ e a derivada topológica $D_{T\mu}\psi$.
- **Enquanto** $|D_{T\mu}^j\psi| > tol$ e $j \leq N$, **faça**:
 - **Calcule** \mathbb{C}^j , $\mathbb{D}_{T\mu}^j$ e $D_{T\mu}^j\psi$ no domínio Ω_μ^j .
 - **Altere** o domínio atual Ω_μ^j introduzindo perturbações, de acordo com o valor do parâmetro γ , nos pontos onde $D_{T\mu}^j\psi$ atinge os máximos valores.
 - **Atualize** $\Omega_\mu^{j+1} = \Omega_\mu^j$ e $j \leftarrow j + 1$.
- **Assegure** que $\mathbb{C}^j \approx \mathbb{C}^*$.

Algoritmo B: otimização topológica de micro-estruturas especializadas em elasticidade linear.

3.2.3.6 Exemplo 6

Como último exemplo do presente capítulo, propõe-se utilizar a metodologia desenvolvida no exemplo anterior para desenhar uma microestrutura que a nível macroscópico apresente um coeficiente de Poisson negativo. Visando cumprir esse objetivo será empregado o algoritmo proposto anteriormente (algoritmo B), fazendo uso da expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico mostrada na eq.(3.213). Da mesma forma que no exemplo anterior, somente será estudado o modelo de flutuação periódica de deslocamento no contorno do EVR.

A resposta constitutiva objetivo utilizada na análise foi obtida da Seção 3.1.9.4 (pag. 118) para quando o coeficiente de Poisson macroscópico atinge um valor próximo a -0.15 , para o modelo ora mencionado, veja Fig.3.12. Assim sendo, o tensor elástico objetivo \mathbb{C}^* é dado por

$$\mathbb{C}^* = \begin{bmatrix} 11.5403 & -1.748 & 0.0 \\ -1.748 & 11.5403 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.792 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} E^* \approx 11.275 MPa \\ \nu^* \approx -0.152 \end{cases} . \quad (3.228)$$

Como condição inicial para o algoritmo será utilizada uma microestrutura caracterizada por um quadrado de dimensões unitárias com uma inclusão circular de raio $r = 0.15$ centrada no domínio. Os valores do módulo de Young da matriz e da inclusão utilizados na simulação foram de $E_m = 1.0 MPa$ e $E_i = 250.0 MPa$, respectivamente. O coeficiente de Poisson para ambos os materiais é positivo e igual a $\nu = 0.3$. A geometria do EVR, descrito anteriormente, e a resposta constitutiva homogeneizada são mostrados na Fig.3.42. Cabe mencionar que esses valores para os parâmetros dos materiais se correspondem com os utilizados para obter a resposta constitutiva desejada \mathbb{C}^* , ver Seção 3.1.9.4. O domínio de análise foi discretizado utilizando uma malha uniforme com 22568 elementos triangulares lineares (3 nós por elementos), gerando um total de 11485 nós.

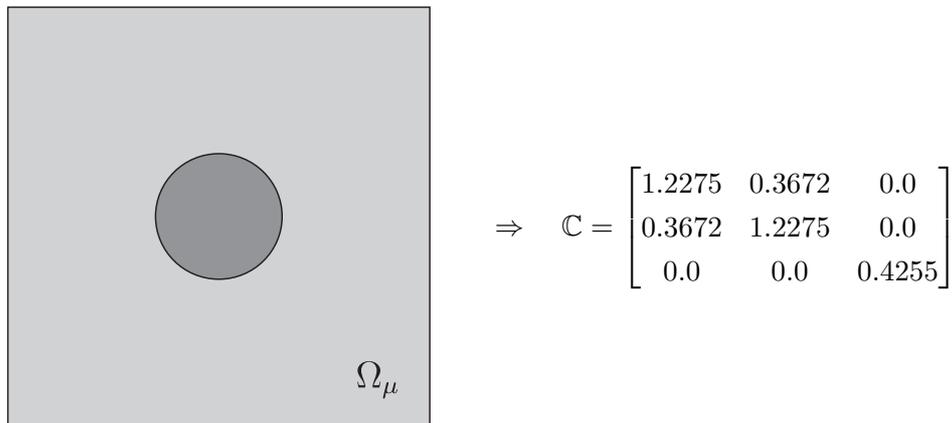
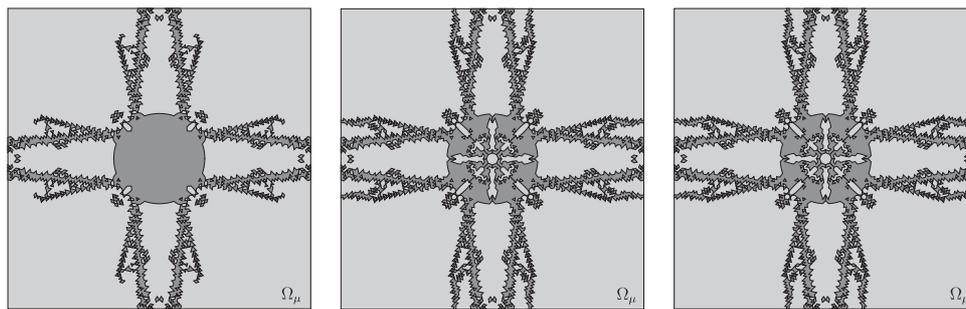


Figura 3.42: exemplo 6 - geometria do domínio de análise.

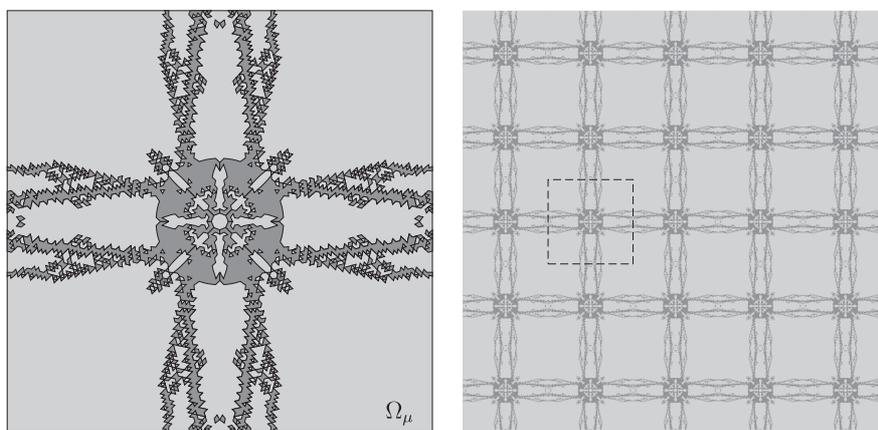
Na Fig.3.43 são mostradas as topologias obtidas para alguns passos intermediários do algoritmo de otimização apresentado no exemplo anterior (Algoritmo B), correspondentes às iterações $j \in \{30, 60, 90\}$.



(a) Iteração 30. (b) Iteração 60. (c) Iteração 90.

Figura 3.43: exemplo 6 - evolução da topologia no processo de otimização.

A topologia final obtida na iteração $j = 120$ é apresentada na Fig.3.44. Ainda na mesma figura, mostra-se como ficaria constituído o material desenhado neste exemplo, através da distribuição periódica do EVR.



(a) Topologia obtida. (b) Distribuição periódica do EVR.

Figura 3.44: exemplo 6 - resultados obtidos.

Em seguida é apresentada a resposta constitutiva homogeneizada associada ao resultado mostrado na Fig.3.44(a). Na Fig.3.45 mostra-se a evolução do valor relativo da função $\psi(\varepsilon)$, eq.(3.222), para a simulação apresentada neste exemplo. Cabe ainda mencionar que os resultados obtidos com o algoritmo proposto neste exemplo são muito satisfatórios. De fato, observa-se que a diferença entre os valores desejados e os obtidos no final da simulação é da ordem do 4 %.

$$\mathbb{C} = \begin{bmatrix} 11.302 & -1.252 & 0.0 \\ -1.252 & 11.302 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.605 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} E \approx 11.164 MPa \\ \nu \approx -0.111 \end{cases} . \quad (3.229)$$

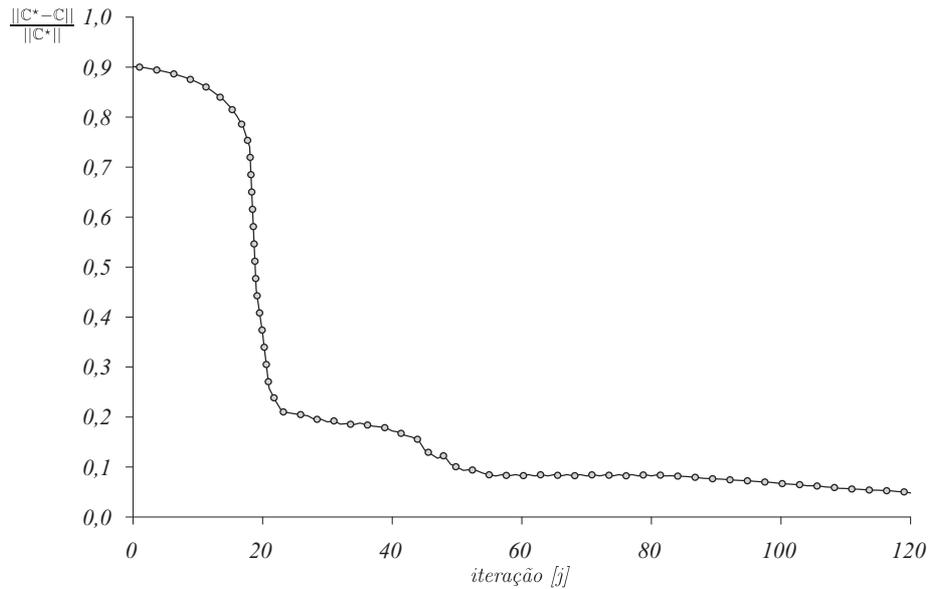


Figura 3.45: exemplo 6 - evolução do valor relativo da função custo.

3.3 Comentários adicionais

Neste Capítulo foram apresentadas as equações e estrutura variacional da modelagem constitutiva multi-escala para sólidos elásticos. Partindo de um princípio de equilíbrio e assumindo que os tensores de deformação e tensão macroscópica são definidos como a média volumétrica de suas contrapartes microscópicas sobre um Elemento de Volume Representativo do material, foi possível derivar de maneira axiomática uma família de modelos constitutivos multi-escala. De fato, a estrutura variacional desenvolvida permitiu distinguir claramente as hipóteses básicas das suas conseqüências. Adicionalmente, foi apresentada de forma detalhada a discretização e implementação computacional, pelo método dos elementos finitos, da modelagem utilizada neste trabalho.

Em seguida, foi utilizada a análise de sensibilidade topológica no cálculo da derivada topológica para os modelos constitutivos multi-escala mencionados anteriormente. A modelagem multi-escala é particularmente apropriada porque permite uma clara identificação dos espaços envolvidos. Sendo possível calcular de forma explícita a derivada topológica associada à energia específica macroscópica. Como resultado fundamental deste trabalho foi identificado um tensor simétrico de quarta ordem, cujas componentes dependem das soluções dos problemas variacionais canônicos associados ao domínio original não perturbado. Esse tensor, representa a sensibilidade topológica do operador constitutivo macroscópico quando é introduzida uma pequena inclusão circular na micro-escala.

Finalmente, visando mostrar as características e propriedades contidas no tensor de sensibilidade topológica, os resultados teóricos foram aplicados no desenvolvimento de seis exemplos computacionais. Cada um desses exemplos foi concebido para mostrar diferentes características da informação fornecida pelo tensor mencionado anteriormente. Os resultados numéricos apresentados na Seção 3.2.3 são bastante satisfatórios, evidenciando assim as potencialidades de aplicação do resultado obtido no desenvolvimento de novos métodos de síntese de microestruturas.

Capítulo 4

Conclusões

O presente trabalho teve como propósito principal desenvolver a análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escala, cuja motivação reside na necessidade de estabelecer uma relação estrita e rigorosa entre as mudanças na conformação interna de um material (micro-estrutura) e suas conseqüências na resposta constitutiva macroscópica. Em particular, utilizaram-se as metodologias usuais de modelagem multi-escala conjuntamente com os conceitos da análise de sensibilidade topológica. Neste sentido, considerando o Princípio de Macro-Homogeneidade de Hill-Mandel e o conceito de média volumétrica, foi estabelecida uma formulação variacional que conduz a uma axiomatização da modelagem constitutiva multi-escala adotada, permitindo, por sua vez, escrever as equações de equilíbrio na micro-escala de maneira rigorosa através de uma clara identificação dos espaços envolvidos. Dessa forma, obteve-se uma estrutura adequada para o desenvolvimento da análise de sensibilidade topológica de modelos constitutivos multi-escala. Particularmente, neste trabalho foram tratados dois problemas clássicos da modelagem computacional: condução estacionária de calor e elasticidade linear. Inicialmente foi desenvolvida a modelagem constitutiva multi-escala de cada um dos problemas ora mencionados. Em seguida, considerando que a micro-estrutura sofre uma perturbação singular caracterizada pela nucleação de uma inclusão circular composta de material com propriedades físicas distintas do meio, foram calculadas as respectivas derivadas topológicas. Neste capítulo, portanto, apresentam-se as contribuições do presente trabalho para a modelagem computacional, bem como uma breve discussão dos resultados principais e apontam-se alguns problemas em aberto a serem estudados no futuro. Encerrando o capítulo, mostram-se alguns indicadores acadêmicos associados ao presente estudo.

4.1 Contribuições deste trabalho

As principais contribuições deste trabalho foram apresentadas nos Capítulos 2 e 3, onde foi obtida a derivada topológica dos modelos constitutivos multi-escala associados aos problemas bidimensionais de condução estacionária de calor e elasticidade linear, respectivamente. Para o cálculo da derivada topológica se utilizou o *topological-shape sensitivity method*, empregando o ferramental matemático da análise de sensibilidade à mudança de

forma para o caso particular em que a perturbação singular sofre uma expansão uniforme. A utilização conjunta dos conceitos da modelagem constitutiva multi-escala e análise de sensibilidade topológica permitiu obter a derivada topológica para os modelos ora mencionados. Como resultado fundamental dessa análise, foi identificado um campo tensorial da mesma ordem que o operador constitutivo macroscópico, que representa a sensibilidade topológica do tensor constitutivo macroscópico quando é introduzida uma perturbação singular na micro-escala, caracterizada pela nucleação de uma inclusão circular composta de material com propriedades físicas diferentes do meio. As componentes do mencionado campo tensorial dependem apenas das soluções dos problemas variacionais canônicos associados ao domínio original não perturbado. Além do mais, foram mostrados os casos limites da expressão final do tensor de sensibilidade topológica, através do estudo do contraste caracterizado pelo parâmetro γ . Em seguida, desenvolveram-se diversos exemplos numéricos ilustrativos, visando mostrar as características e/ou propriedades do tensor de sensibilidade topológica. Nesses exemplos, foram apresentadas três diferentes formas de utilização dos resultados obtidos:

1. Análise das componentes do tensor de sensibilidade topológica;
2. Análise através dos invariantes do tensor de sensibilidade topológica;
3. Análise e proposta de um algoritmo para projeto e/ou otimização de micro-estruturas, considerando uma medida de distância entre uma dada resposta constitutiva e outra desejada (ou prescrita).

Embora os exemplos computacionais sejam simples, os resultados numéricos obtidos são bastante satisfatórios e de baixo custo computacional. De fato, o maior custo computacional está na resolução do sistema canônico de equações variacionais no domínio original (não perturbado), uma vez que o tensor de sensibilidade topológica é obtido apenas do pós-processamento das soluções desses problemas. Deste modo, através dos exemplos de aplicação ora mencionados, pode-se inferir que os resultados deste trabalho constituem uma poderosa ferramenta com potencial aplicação tanto no projeto e/ou otimização topológica de micro-estruturas especializadas, quanto no estudo de problemas inversos e de modelagem mecânica, ampliando as possibilidades de aplicação da metodologia aqui desenvolvida.

Ressalta-se a importância do resultado obtido neste trabalho (campo tensorial de sensibilidade topológica), uma vez que permite escrever de maneira explícita a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico, contribuindo de maneira significativa na modelagem de fenômenos físicos que ocorrem a diferentes escalas. Cabe ainda mencionar que através da análise aqui desenvolvida é possível obter rapidamente a derivada topológica para uma vasta classe de funcionais de forma. De fato, nos exemplos 6 e 5 apresentados nas Seções 2.2.3 e 3.2.3, respectivamente, mostra-se como utilizar essa informação para obter a derivada topológica de um funcional de forma dado, simplesmente substituindo a expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico e coletando os termos em potência de ε .

Finalmente, encerrando esta seção, são enumerados os objetivos gerais alcançados neste trabalho:

- i)* construção variacional consistente dos modelos constitutivos multi-escala para os problemas de condução estacionária de calor e elasticidade linear;
- ii)* implementação computacional dos diferentes modelos constitutivos multi-escala e desenvolvimento de exemplos numéricos de aplicação;
- iii)* desenvolvimento da análise de sensibilidade topológica e cálculo da derivada topológica em modelos constitutivos multi-escala;
- iv)* interpretação dos resultados obtidos, que resultou na definição da expansão assintótica topológica do operador constitutivo macroscópico, através da utilização do tensor de sensibilidade topológica;
- v)* análise dos resultados através do estudo dos valores limites do contraste γ ;
- vi)* implementação computacional e estudo dos resultados obtidos, através de exemplos numéricos;
- vii)* proposta de um algoritmo de otimização topológica de micro-estruturas especializadas.

4.2 Problemas em aberto

Os desenvolvimentos teóricos e aplicações práticas apresentadas neste trabalho de maneira alguma esgotam o uso da análise de sensibilidade topológica na modelagem constitutiva multi-escala. De fato, o presente estudo é pioneiro no cálculo e uso da derivada topológica em tais modelos, o que permite afirmar que existem ainda muitos trabalhos (tanto teóricos quanto práticos) a serem desenvolvidos em futuras pesquisas. Em seguida, apresenta-se uma lista de alguns dos possíveis novos temas de estudos:

- Explorar de maneira mais adequada as informações contidas no tensor de sensibilidade topológica, em particular estudar em detalhe os invariantes desse tensor.
- Estender para problemas tridimensionais os resultados apresentados nas Seções 2.2 e 3.2.
- Construir funcionais de forma que representem características particulares de uma resposta constitutiva macroscópica desejada e determinar sua derivada topológica.
- Cálculo da derivada topológica em modelos constitutivos multi-escala associados a problemas não-lineares e/ou com restrições mais gerais, como por exemplo o problema de micro-estruturas fraturadas com contato na região de fratura.
- Obter a derivada topológica em modelos constitutivos multi-escala para perturbações singulares com forma arbitrária no EVR.

- Aplicar a análise de sensibilidade topológica de ordem superior em modelos constitutivos multi-escala.
- Desenvolver algoritmos para o projeto e/ou otimização micro estrutural mais gerais e eficientes que o proposto neste trabalho, com por exemplo, utilizando as técnicas de *level-set*.

4.3 Indicadores acadêmicos

Para finalizar este capítulo, apresenta-se nesta seção uma lista completa da produção científica do autor. Em seguida, mostram-se as publicações em jornais internacionais indexados estritamente vinculadas a este trabalho:

- S.M. Giusti, A.A. Novotny, E.A. de Souza Neto e R.A. Feijóo. Sensitivity of the macroscopic thermal conductivity tensor to topological microstructural changes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(5-8):727-739, 2009.
- S.M. Giusti, A.A. Novotny, E.A. de Souza Neto e R.A. Feijóo. Sensitivity of the macroscopic elasticity tensor to topological microstructural changes. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(3):555-570, 2009.

No entanto, este trabalho foi desenvolvido durante os quatro anos de participação no programa de pós-graduação em modelagem computacional do Laboratório Nacional de Computação Científica do Ministério da Ciência e Tecnologia. Durante esse período foi necessário estudar as duas grandes áreas de conhecimento que fazem parte deste trabalho: análise de sensibilidade topológica e modelagem constitutiva multi-escala. Decorrente desses estudos obteve-se a produção científica apresentada a continuação:

- S.M. Giusti, A.A. Novotny e C. Padra. Topological sensitivity analysis for inclusion in a two-dimensional linear elasticity. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 38(11):926-935, 2008.
- S.M. Giusti, P.J. Blanco, E.A. de Souza Neto e R.A. Feijóo. An assessment of the Gurson yield criterion by a computational multi-scale approach. *Engineering Computations*, 26(3):281-301, 2009.
- S.M. Giusti, A.A. Novotny e J. Sokołowski. Topological derivative for steady-state orthotropic heat diffusion problem. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, to appears, 2009.

Como resumo, cabe ainda mencionar que durante os quatro anos de participação no programa de doutorado do LNCC/MCT a produção científica do autor deste trabalho totaliza, além dos **5** artigos em jornais internacionais indexados; **8** participações em congressos nacionais e internacionais e **4** relatórios internos de pesquisa.

Apêndice A

Análise assintótica

Neste apêndice são apresentadas as expansões assintóticas das soluções associadas aos domínios topologicamente perturbados considerados no cálculo da derivada topológica mostrado nas Seções 2.2 e 3.2. De fato, a forma explícita das mencionadas expansões assintóticas têm um papel importante na metodologia utilizada, nas seções ora mencionadas, na passagem do limite $\varepsilon \rightarrow 0$ na eq.(2.166) e eq.(3.178). Na Seção A.1 é considerado o problema de condução estacionária de calor e na Seção A.2 é estudado o problema de elasticidade linear isotrópica.

A.1 Condução estacionária de calor

Nesta seção é mostrado o cálculo da expansão assintótica utilizada na análise de sensibilidade topológica desenvolvida na Seção 2.2. Considerando que \tilde{u}_μ e $\tilde{u}_{\mu\varepsilon}$ são as soluções dos problemas de valor no contorno apresentados nas eqs.(2.49) e (2.147), respectivamente, então propõe-se a seguinte expansão assintótica para a solução do problema associado ao domínio topologicamente perturbado $\Omega_{\mu\varepsilon}$,

$$\tilde{u}_{\mu\varepsilon}(\mathbf{y}) = \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) + \tilde{w}_{\mu\varepsilon}(\mathbf{y}/\varepsilon) + \tilde{v}_{\mu\varepsilon}(\mathbf{y}). \quad (\text{A.1})$$

Assumindo que a solução $\tilde{u}_\mu(\mathbf{y})$ possui a regularidade necessária no domínio Ω_μ , tal que uma expansão em série de Taylor em torno do ponto $\hat{\mathbf{y}}$ faça sentido, tem-se que sua derivada normal no contorno $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ pode ser escrita como

$$\left. \frac{\partial}{\partial n} \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) \right|_{\partial\mathcal{I}_\varepsilon} = \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}}) \cdot \mathbf{n} - \varepsilon D(\nabla \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi})) (\mathbf{n})^2, \quad (\text{A.2})$$

onde $\boldsymbol{\xi}$ é um ponto entre \mathbf{y} e $\hat{\mathbf{y}}$, e $D(\nabla \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi}))$ representa a derivada de ordem superior de $\nabla \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi})$ avaliada no ponto $\boldsymbol{\xi}$. Agora, introduzindo a mudança de variável $\mathbf{y} = \varepsilon \mathbf{z}$ e levando em conta que $(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) = -\varepsilon \mathbf{n} \quad \forall \mathbf{y} \in \partial\mathcal{I}_\varepsilon$, tem-se que a função $\tilde{w}_{\mu\varepsilon}(\mathbf{z})$ da eq.(A.1) é definida como a solução do seguinte problema exterior: encontre a função $\tilde{w}_{\mu\varepsilon}$, tal que

seja satisfeita a seguinte equação diferencial

$$\left\{ \begin{array}{ll} -k_\mu \Delta \tilde{w}_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\mathcal{H}_1} \\ -\gamma k_\mu \Delta \tilde{w}_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \mathcal{I}_1 \\ \tilde{w}_{\mu_\varepsilon} \rightarrow 0 & \text{no } \infty \\ \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}|_m - \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}|_i = 0 & \text{sobre } \partial\mathcal{I}_1 \\ \frac{\partial \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma \frac{\partial \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i = -\varepsilon (1 - \gamma) (\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})) \cdot \mathbf{n} & \text{sobre } \partial\mathcal{I}_1 \end{array} \right. \quad (\text{A.3})$$

Devido à discrepância introduzida pelo termo $\varepsilon D(\nabla \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi}))(\mathbf{n})^2$ sobre $\partial\mathcal{I}_\varepsilon$ e pela função $\tilde{w}_{\mu_\varepsilon}$ sobre os contornos $\partial\Omega_\mu$ e $\partial\Omega_\mu^i$, pede-se que o termo remanescente $\tilde{v}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})$ compense essas discrepâncias. Portanto, defini-se $\tilde{v}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})$ como a solução do seguinte problema de valor de contorno: encontre a função $\tilde{v}_{\mu_\varepsilon}$, tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -k_\mu \Delta \tilde{v}_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon} \\ -\gamma k_\mu \Delta \tilde{v}_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \mathcal{I}_\varepsilon \\ \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{v}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} dS = - \int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{w}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} dS \\ \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \tilde{v}_{\mu_\varepsilon} dV = - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \tilde{w}_{\mu_\varepsilon} dV \\ \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}|_m - \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}|_i = 0 & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \cup \partial\mathcal{I}_\varepsilon \\ \frac{\partial \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma \frac{\partial \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i = - \left(\frac{\partial \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma \frac{\partial \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i \right) & \text{sobre } \partial\Omega_\mu^i \\ \frac{\partial \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma \frac{\partial \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i = \varepsilon (1 - \gamma) D^2 \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{n})^2 & \text{sobre } \partial\mathcal{I}_\varepsilon \end{array} \right. \quad (\text{A.4})$$

Observa-se que o problema (A.3) pode ser resolvido explicitamente utilizando separação de variáveis e fazendo um desenvolvimento em série de Fourier da solução $\tilde{w}_{\mu_\varepsilon}$. De fato, as soluções associadas à matriz $\Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon}$ e inclusão \mathcal{I}_ε são, respectivamente, dadas por

$$\tilde{w}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})|_{\Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon}} = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \frac{\varepsilon^2}{\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2} (\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})) \cdot (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}), \quad (\text{A.5})$$

$$\tilde{w}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})|_{\mathcal{I}_\varepsilon} = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} (\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})) \cdot (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}). \quad (\text{A.6})$$

No entanto, para caracterizar completamente a expansão da solução $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ proposta na eq. (A.1), tem-se, no caso do termo remanescente $\tilde{v}_{\mu_\varepsilon}$, a seguinte estimativa:

Proposição 5. *Seja $\tilde{v}_{\mu_\varepsilon}$ solução do problema de valor de contorno (A.4). Então existe uma constante C , independente do parâmetro ε , tal que*

$$|\tilde{v}_{\mu_\varepsilon}|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})} \leq C\varepsilon^2. \quad (\text{A.7})$$

Prova. Considerando a função $\tilde{w}_{\mu_\varepsilon}$ mostrada nas eqs.(A.5) e (A.6), observa-se que

$$\int_{\partial\Omega_\mu} \tilde{w}_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} dS = \varepsilon^2 s(\mathbf{y}), \quad (\text{A.8})$$

$$\left(k_\mu \frac{\partial \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma k_\mu \frac{\partial \tilde{w}_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i \right) = \varepsilon^2 h(\mathbf{y}), \quad (\text{A.9})$$

$$\varepsilon k_\mu (1 - \gamma) D^2 \tilde{u}_\mu(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{n})^2 = \varepsilon p(\mathbf{y}), \quad (\text{A.10})$$

onde as funções $s(\mathbf{y})$, $h(\mathbf{y})$ e $p(\mathbf{y})$ são independentes de ε . Assim, tem-se o seguinte problema auxiliar de valor no contorno: encontre a função $\varphi_{\mu_\varepsilon}$, tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -k_\mu \Delta \varphi_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon} \\ -\gamma k_\mu \Delta \varphi_{\mu_\varepsilon} = 0 & \text{em } \mathcal{I}_\varepsilon \\ \int_{\partial \Omega_\mu} \varphi_{\mu_\varepsilon} \mathbf{n} dS = \varepsilon s(\mathbf{y}) \\ \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \varphi_{\mu_\varepsilon} dV = 0 \\ \varphi_{\mu_\varepsilon}|_m - \varphi_{\mu_\varepsilon}|_i = 0 & \text{sobre } \partial \Omega_\mu^i \cup \partial \mathcal{I}_\varepsilon \\ k_\mu \frac{\partial \varphi_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma k_\mu \frac{\partial \varphi_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i = \varepsilon h(\mathbf{y}) & \text{sobre } \partial \Omega_\mu^i \\ k_\mu \frac{\partial \varphi_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_m - \gamma k_\mu \frac{\partial \varphi_{\mu_\varepsilon}}{\partial n} \Big|_i = p(\mathbf{y}) & \text{sobre } \partial \mathcal{I}_\varepsilon \end{array} \right. . \quad (\text{A.11})$$

Como o problema acima é bem posto, então existe uma constante C , independente de ε , tal que (Cedio-Fengya *et al.* (1998) [27], Kozlov *et al.* (1999) [66] e Ammari & Kang (2004) [2]):

$$|\varphi_{\mu_\varepsilon}|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})} \leq C\varepsilon. \quad (\text{A.12})$$

Logo, da linearidade do problema (A.4) observa-se que $\tilde{v}_{\mu_\varepsilon} = \varepsilon \varphi_{\mu_\varepsilon}$, o que conclui a prova. ■

Observação 40. Para garantir que os problemas definidos no domínio perturbado Ω_{μ_ε} estejam bem postos, nos sistemas definidos pelas equações (A.4) e (A.11) deveria ser acrescentado a condição de contorno associada ao espaço $\mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$, de acordo com a escolha de cada modelo constitutivo multi-escala.

Finalmente, com os resultados mostrados nas eqs.(A.5) e (A.6) e da proposição acima, eq.(A.7), tem-se a seguinte expansão assintótica na vizinhança da inclusão \mathcal{I}_ε da solução $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ do problema apresentado na eq.(2.147):

$$\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})|_{\Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon}} = \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) + \frac{1-\gamma}{1+\gamma} \frac{\varepsilon^2}{\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2} [\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})] \cdot (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) + \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}), \quad (\text{A.13})$$

$$\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y})|_{\mathcal{I}_\varepsilon} = \tilde{u}_\mu(\mathbf{y}) + \frac{1-\gamma}{1+\gamma} [\nabla u + \nabla \tilde{u}_\mu(\hat{\mathbf{y}})] \cdot (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) + \tilde{v}_{\mu_\varepsilon}(\mathbf{y}). \quad (\text{A.14})$$

A.2 Elasticidade linear

No cálculo da derivada topológica apresentada na Seção 3.2 foi empregada a expansão assintótica da distribuição de tensão microscópica no contorno da perturbação circular de raio ε , denotada por \mathcal{I}_ε . Sendo que a tensão microscópica está constituída pela soma de uma tensão microscópica induzida pela deformação macroscópica \mathbf{E} (independente do parâmetro ε) e uma flutuação de tensão microscópica – veja eq.(3.45) – esta seção, portanto, é dedicada a mostrar a derivação da expansão assintótica para o campo de flutuação de tensão associada ao domínio perturbado Ω_{μ_ε} . Assim sendo, propõe-se

a seguinte expansão assintótica para a solução do problema definido na eq.(3.150), veja Sokołowski & Źochowski (1999) [116],

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} = \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty + o(\varepsilon), \quad (\text{A.15})$$

onde $\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty$ denota a solução do sistema elástico (3.150) no domínio infinito $(\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon}) \cup \mathcal{I}_\varepsilon$, tal que o campo de tensão $\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty$ tende a um valor constante (independente do parâmetro ε) quando $\|\mathbf{y}\| \rightarrow \infty$. Então, o mencionado problema no domínio infinito pode ser escrito como: encontre o campo de tensão $\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty$ tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div} \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty = \mathbf{0} & \text{em } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon} \\ \operatorname{div} \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty = \mathbf{0} & \text{em } \mathcal{I}_\varepsilon \\ \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty \rightarrow \tilde{\mathbf{T}}_\mu & \text{no } \infty \\ \llbracket \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty \rrbracket \mathbf{n} = -\llbracket \tilde{\mathbf{T}}_\mu \rrbracket \mathbf{n} & \text{sobre } \partial \mathcal{I}_\varepsilon \end{array} \right., \quad (\text{A.16})$$

sendo que \mathbf{n} denota o vetor normal saliente ao contorno $\partial \mathcal{I}_\varepsilon$, $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ é a solução do problema não perturbado dado pela eq.(3.48) e $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ representa a tensão microscópica induzida pela deformação macroscópica \mathbf{E} , definida na eq.(3.45).

Observa-se que o problema no domínio infinito (A.16) pode ser resolvido explicitamente utilizando separação de variáveis, por exemplo, empregando as metodologias desenvolvidas nos trabalhos de Obert (1967) [95] e Little (1973) [74]. De fato, considerando um sistema de coordenadas polares (r, θ) centrado no ponto $\hat{\mathbf{y}}$ (centro da inclusão \mathcal{I}_ε) e alinhado com as direções principais do tensor $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ associado ao domínio original Ω_μ (o ângulo θ é medido em relação a uma das direções principais de $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$, veja Fig.A.1), as componentes no sistema de coordenadas ora mencionado da solução da equação diferencial parcial (A.16) são dadas por:

- Solução exterior ($r \geq \varepsilon$)

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty)^{rr} &= \bar{S} \frac{1}{1+\beta\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2} + \bar{D} \frac{1}{1+\alpha\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2} \left(4 - 3 \frac{\varepsilon^2}{r^2}\right) \cos 2(\theta + \varphi) \\ &\quad + \tilde{S} \left(1 - \frac{1-\gamma}{1+\beta\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2}\right) + \tilde{D} \left[1 - \frac{1-\gamma}{1+\alpha\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2} \left(4 - 3 \frac{\varepsilon^2}{r^2}\right)\right] \cos 2\theta, \\ (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty)^{\theta\theta} &= -\bar{S} \frac{1}{1+\beta\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2} + \bar{D} \frac{3}{1+\alpha\gamma} \frac{\varepsilon^4}{r^4} \cos 2(\theta + \varphi) \\ &\quad + \tilde{S} \left(1 + \frac{1-\gamma}{1+\beta\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2}\right) - \tilde{D} \left(1 + 3 \frac{1-\gamma}{1+\alpha\gamma} \frac{\varepsilon^4}{r^4}\right) \cos 2\theta, \\ (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty)^{\theta r} &= \bar{D} \frac{1}{1+\alpha\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2} \left(2 - 3 \frac{\varepsilon^2}{r^2}\right) \sin 2(\theta + \varphi) \\ &\quad - \tilde{D} \left[1 + \frac{1-\gamma}{1+\alpha\gamma} \frac{\varepsilon^2}{r^2} \left(2 - 3 \frac{\varepsilon^2}{r^2}\right)\right] \cos 2\theta. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

- Solução interior ($0 < r < \varepsilon$)

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty)^{rr} &= -\frac{\beta\gamma}{1+\beta\gamma} \left[\bar{S} - \frac{2}{1+\nu_m} \tilde{S}\right] - \frac{\alpha\gamma}{1+\alpha\gamma} \left[\bar{D} \cos 2(\theta + \varphi) - \frac{4}{3-\nu_m} \tilde{D} \cos 2\theta\right], \\ (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty)^{\theta\theta} &= -\frac{\beta\gamma}{1+\beta\gamma} \left[\bar{S} - \frac{2}{1+\nu_m} \tilde{S}\right] + \frac{\alpha\gamma}{1+\alpha\gamma} \left[\bar{D} \cos 2(\theta + \varphi) - \frac{4}{3-\nu_m} \tilde{D} \cos 2\theta\right], \\ (\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}^\infty)^{\theta r} &= \frac{\alpha\gamma}{1+\alpha\gamma} \left[\bar{D} \sin 2(\theta + \varphi) - \frac{4}{3-\nu_m} \tilde{D} \sin 2\theta\right]. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Sendo que não necessariamente as direções principais dos tensores $\bar{\mathbf{T}}_\mu$ e $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ coincidem, nas expressões acima φ indica o ângulo existente entre as mencionadas direções principais, veja Fig.A.1. Além do mais, os escalares \bar{S} , \tilde{S} , \bar{D} e \tilde{D} denotam

$$\bar{S} = -(1-\gamma)\frac{\bar{\sigma}_{\mu_1} + \bar{\sigma}_{\mu_2}}{2}, \quad \tilde{S} = \frac{\tilde{\sigma}_{\mu_1} + \tilde{\sigma}_{\mu_2}}{2}, \quad (\text{A.19})$$

$$\bar{D} = -(1-\gamma)\frac{\bar{\sigma}_{\mu_1} - \bar{\sigma}_{\mu_2}}{2}, \quad \tilde{D} = \frac{\tilde{\sigma}_{\mu_1} - \tilde{\sigma}_{\mu_2}}{2}, \quad (\text{A.20})$$

onde $\bar{\sigma}_{\mu_{1,2}}$ e $\tilde{\sigma}_{\mu_{1,2}}$ são as tensões principais, associadas aos tensores $\bar{\mathbf{T}}_\mu$ e $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$, respectivamente, no domínio não perturbado Ω_μ , avaliadas no ponto $\hat{\mathbf{y}} \in \Omega_\mu$. Além do mais, as constantes α e β em (A.17) e (A.18) dependem apenas do coeficiente de Poisson da matriz ν_m e são dadas por

$$\alpha = \frac{3 - \nu_m}{1 + \nu_m} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1 + \nu_m}{1 - \nu_m}. \quad (\text{A.21})$$

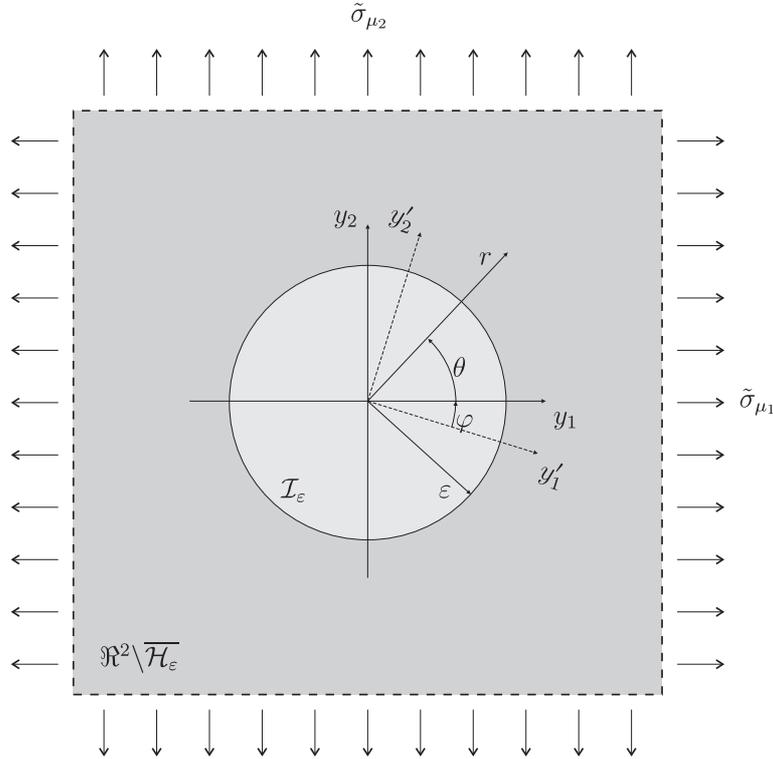


Figura A.1: domínio infinito com inclusão circular \mathcal{I}_ϵ .

Apêndice B

Estimativas de convergência

Nas Seções 2.2 e 3.2 do presente trabalho foram apresentadas as estimativas de convergência da diferença entre as soluções dos problemas associados aos domínios perturbado e não perturbado para ambos os problemas abordados: condução estacionária do calor e elasticidade linear. Embora, esses resultados apareçam freqüentemente na literatura especializada (veja, por exemplo, os trabalhos de Sokołowski & Źochowski (2001) [118], Ammari & Kang (2004) [2] e Amstutz (2006) [5]), achou-se adequado mostrar neste apêndice, em linhas gerais, os passos mais importantes para provar essas estimativas. Em seguida, portanto, na Seção B.1, trata-se o problema de condução estacionária do calor e, logo, na Seção B.2 o problema de elasticidade linear.

B.1 Condução estacionária de calor

Como mencionado ao início do apêndice, nesta seção é abordado o problema de condução estacionária do calor e serão mostrados formalmente os passos mais importantes para provar a estimativa de convergência mostrada na Seção 2.2 (Observação 14, pag. 46). Inicialmente começaremos lembrando que o domínio topologicamente perturbado Ω_{μ_ε} é definido como $\Omega_{\mu_\varepsilon} = (\Omega_\mu \setminus \overline{\mathcal{H}_\varepsilon}) \cup \mathcal{I}_\varepsilon$, sendo \mathcal{H}_ε um furo de raio ε centrado no ponto $\hat{\mathbf{y}} \in \Omega_\mu$ e \mathcal{I}_ε representa uma inclusão de material diferente ao do meio, ocupando o espaço deixado pelo furo denotado por \mathcal{H}_ε . Logo, considerando que as funções \tilde{u}_μ e $\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}$ são as soluções dos problemas variacionais associados, respectivamente, aos domínios original (não perturbado) eq.(2.47) e perturbado eq.(2.146), tem-se que os mencionados problemas podem ser escritos, respectivamente, em forma compacta como:

$$a(\tilde{u}_\mu, \eta) = l(\eta) \quad \forall \eta \in \mathcal{V}_\mu \quad \text{e} \quad a_\varepsilon(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}, \eta_\varepsilon) = l_\varepsilon(\eta_\varepsilon) \quad \forall \eta_\varepsilon \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}, \quad (\text{B.1})$$

onde $a(\cdot, \cdot)$ e $a_\varepsilon(\cdot, \cdot)$ são formas bi-lineares, simétricas, contínuas e coercivas, e $l(\cdot)$ e $l_\varepsilon(\cdot)$ são formas lineares e contínuas. O sub-índice ε nas expressões anteriores denota a dependência com o parâmetro ε . Para o problema analisado, as formas bi-lineares e lineares mostradas anteriormente são definidas da seguinte maneira:

$$a(\tilde{u}_\mu, \eta) := \int_{\Omega_\mu} k_\mu \nabla \tilde{u}_\mu \cdot \nabla \eta dV, \quad l(\eta) := - \int_{\Omega_\mu} k_\mu \nabla u \cdot \nabla \eta dV; \quad (\text{B.2})$$

$$a_\varepsilon(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}, \eta_\varepsilon) := \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* \nabla \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla \eta_\varepsilon dV, \quad l_\varepsilon(\eta_\varepsilon) := - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} k_\mu^* \nabla u \cdot \nabla \eta_\varepsilon dV. \quad (\text{B.3})$$

Agora, tomando em particular, $\eta_\varepsilon = (\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$ e da coercividade da forma bi-linear $a_\varepsilon(\cdot, \cdot)$, tem-se que existe uma constante positiva α tal que

$$\alpha \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 \leq a_\varepsilon(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu, \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu), \quad (\text{B.4})$$

levando em conta a linearidade de $a_\varepsilon(\cdot, \cdot)$, chega-se a

$$\alpha \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 \leq a_\varepsilon(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon}, \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) - a_\varepsilon(\tilde{u}_\mu, \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu), \quad (\text{B.5})$$

utilizando a eq.(B.1)₂ e das definições dadas nas eq.(B.2) e eq.(B.3), a expressão acima pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \alpha \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 &\leq l_\varepsilon(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) - a_\varepsilon(\tilde{u}_\mu, \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) + l(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) \\ &\quad - l(\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} &= a(\tilde{u}_\mu, \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) - a_\varepsilon(\tilde{u}_\mu, \tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) \\ &\quad + \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1 - \gamma) k_\mu \nabla u \cdot \nabla (\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) dV \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1 - \gamma) k_\mu \nabla \tilde{u}_\mu \cdot \nabla (\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) dV \\ &\quad + \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1 - \gamma) k_\mu \nabla u \cdot \nabla (\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) dV \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$= \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1 - \gamma) (k_\mu \nabla \tilde{u}_\mu + k_\mu \nabla u) \cdot \nabla (\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu) dV. \quad (\text{B.9})$$

Lembrando que $\nabla u_\mu = \nabla \tilde{u}_\mu + \nabla u$ e aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwartz na expressão anterior, tem-se

$$\alpha \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 \leq |1 - \gamma| k_\mu \|\nabla u_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\mathcal{I}_\varepsilon)} \quad (\text{B.10})$$

$$\leq |1 - \gamma| k_\mu \|\nabla u_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\mathcal{I}_\varepsilon)} \quad (\text{B.11})$$

$$\leq |1 - \gamma| k_\mu \|\nabla u_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}. \quad (\text{B.12})$$

Da desigualdade acima, tem-se o seguinte resultado

$$\alpha \|\tilde{u}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{u}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})} \leq |1 - \gamma| k_\mu \|\nabla u_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)}. \quad (\text{B.13})$$

Sendo que ∇u_μ é regular em \mathcal{I}_ε e não depende do parâmetro ε , da definição da norma no espaço $L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)$ segue que

$$\|\nabla u_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} = \left(\int_{\mathcal{I}_\varepsilon} |\nabla u_\mu|^2 dV \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.14})$$

$$\leq \max_{\mathbf{y} \in \mathcal{I}_\varepsilon} |\nabla u_\mu| \sqrt{\pi} \varepsilon. \quad (\text{B.15})$$

Finalmente, introduzindo o resultado anterior na eq.(B.13) segue a seguinte estimativa:

$$\|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})} = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (\text{B.16})$$

B.2 Elasticidade linear

Na dedução do problema de equilíbrio mecânico da Seção 3.2, foi mostrado na Observação 32 (pag. 122) a estimativa de convergência entre $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ e $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$, soluções dos problemas associados aos domínios original (não perturbado) e perturbado, respectivamente. Assim sendo, nesta seção serão apresentados de maneira formal os conceitos mais importantes e necessários para provar a mencionada estimativa. Com esse objetivo, começaremos escrevendo em forma compacta os problemas variacionais associados aos domínios não perturbado e perturbado mostrados nas eq.(3.46) e eq.(3.148), então tem-se

$$a(\tilde{\mathbf{u}}_\mu, \boldsymbol{\eta}) = l(\boldsymbol{\eta}) \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_\mu \quad \text{e} \quad a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}_\varepsilon) = l_\varepsilon(\boldsymbol{\eta}_\varepsilon) \quad \forall \boldsymbol{\eta}_\varepsilon \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}, \quad (\text{B.17})$$

onde $a(\cdot, \cdot)$ e $a_\varepsilon(\cdot, \cdot)$ denotam formas bi-lineares, simétricas, contínuas e coercivas, e $l(\cdot)$ e $l_\varepsilon(\cdot)$ são formas lineares e contínuas. O sub-índice ε nas expressões anteriores é utilizado para denotar a dependência com o parâmetro ε . Para o problema de elasticidade linear, as formas bi-lineares e lineares mostradas anteriormente são definidas da seguinte maneira:

$$a(\tilde{\mathbf{u}}_\mu, \boldsymbol{\eta}) := \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV, \quad l(\boldsymbol{\eta}) := - \int_{\Omega_\mu} \bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta} dV; \quad (\text{B.18})$$

$$a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}_\varepsilon) := \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta}_\varepsilon dV, \quad l_\varepsilon(\boldsymbol{\eta}_\varepsilon) := - \int_{\Omega_{\mu_\varepsilon}} \bar{\mathbf{T}}_\mu^* \cdot \nabla^s \boldsymbol{\eta}_\varepsilon dV. \quad (\text{B.19})$$

onde as flutuações de tensão microscópica $\tilde{\mathbf{T}}_\mu$ e $\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon}$ são dadas, respectivamente, por $\tilde{\mathbf{T}}_\mu = \mathbb{C}_\mu \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_\mu$ e $\tilde{\mathbf{T}}_{\mu_\varepsilon} = \mathbb{C}_\mu^* \nabla^s \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}$.

Logo, da coercividade da forma bi-linear $a_\varepsilon(\cdot, \cdot)$ e considerando, em particular, o elemento $\boldsymbol{\eta}_\varepsilon = (\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \in \mathcal{V}_{\mu_\varepsilon}$, tem-se que existe uma constante positiva β tal que

$$\beta \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 \leq a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu, \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu), \quad (\text{B.20})$$

aproveitando a bi-linearidade da forma $a_\varepsilon(\cdot, \cdot)$, a expressão anterior pode ser escrita como

$$\beta \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 \leq a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon}, \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) - a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_\mu, \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu), \quad (\text{B.21})$$

utilizando a equação de estado (B.17)₂ e levando em conta as definições estabelecidas nas eq.(B.18) e eq.(B.19), da expressão acima tem-se

$$\begin{aligned} \beta \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 &\leq l_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) - a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_\mu, \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) + l(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \\ &\quad - l(\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned} &= a(\tilde{\mathbf{u}}_\mu, \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) - a_\varepsilon(\tilde{\mathbf{u}}_\mu, \tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \\ &\quad + \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1 - \gamma) \bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s (\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

$$\begin{aligned} \beta \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 &\leq \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1-\gamma) \tilde{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s (\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV \\ &\quad + \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1-\gamma) \bar{\mathbf{T}}_\mu \cdot \nabla^s (\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

$$= \int_{\mathcal{I}_\varepsilon} (1-\gamma) (\tilde{\mathbf{T}}_\mu + \bar{\mathbf{T}}_\mu) \cdot \nabla^s (\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV. \quad (\text{B.25})$$

Lembrando que $\mathbf{T}_\mu = \tilde{\mathbf{T}}_\mu + \bar{\mathbf{T}}_\mu$ e utilizando a desigualdade de Cauchy-Schwartz na expressão anterior, tem-se

$$\beta \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}^2 \leq |1-\gamma| \|\mathbf{T}_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} |\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{H^1(\mathcal{I}_\varepsilon)} \quad (\text{B.26})$$

$$\leq |1-\gamma| \|\mathbf{T}_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\mathcal{I}_\varepsilon)} \quad (\text{B.27})$$

$$\leq |1-\gamma| \|\mathbf{T}_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})}. \quad (\text{B.28})$$

Assim, a desigualdade anterior é equivalente ao seguinte resultado

$$\beta \|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})} \leq |1-\gamma| \|\mathbf{T}_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)}. \quad (\text{B.29})$$

Como o campo de tensão microscópica \mathbf{T}_μ no interior da inclusão \mathcal{I}_ε é regular e não depende do parâmetro ε , da definição da norma no espaço $L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)$ segue que

$$\|\mathbf{T}_\mu\|_{L^2(\mathcal{I}_\varepsilon)} = \left(\int_{\mathcal{I}_\varepsilon} |\mathbf{T}_\mu|^2 dV \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.30})$$

$$\leq \max_{\mathbf{y} \in \mathcal{I}_\varepsilon} |\mathbf{T}_\mu| \sqrt{\pi} \varepsilon. \quad (\text{B.31})$$

Finalmente, introduzindo o resultado anterior na eq.(B.29), segue a seguinte estimativa

$$\|\tilde{\mathbf{u}}_{\mu_\varepsilon} - \tilde{\mathbf{u}}_\mu\|_{H^1(\Omega_{\mu_\varepsilon})} = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (\text{B.32})$$

Apêndice C

Operações básicas

Este último apêndice dedica-se a apresentar algumas operações básicas de álgebra tensorial e derivação, utilizadas ao longo do presente trabalho. Em particular, na Seção C.1 tratam-se operações básicas de álgebra tensorial, na Seção C.2 são mostrados os principais resultados associados aos operadores de diferenciação gradiente e divergente, e na Seção C.3 retoma-se a álgebra tensorial vinculada com operadores de diferenciação através de relações integrais. Cabe mencionar que o intuito deste apêndice é mostrar resultados associados às áreas ora mencionadas, para uma revisão detalhada das operações aqui apresentada, recomenda-se consultar a literatura consagrada da área como, por exemplo, o livro de Gurtin (1981) [49].

C.1 Álgebra tensorial

Visando facilitar o entendimento das operações realizadas em todo o texto do presente estudo, em seguida, são apresentadas algumas operações básicas da álgebra tensorial. Cabe aclarar que nesta seção será utilizado Lin para denotar o conjunto de todos os tensores de segunda ordem. Assim, considerando que \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , e \mathbf{d} são vetores e \mathbf{A} , \mathbf{B} e \mathbf{C} são tensores de segunda ordem, tem-se as seguintes identidades:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \mathbf{a}, \quad (\text{C.1})$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{A} \mathbf{b} = \mathbf{A}^T \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, \quad (\text{C.2})$$

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \mathbf{C}) = (\mathbf{B}^T \mathbf{A}) \cdot \mathbf{C} = (\mathbf{A} \mathbf{C}^T) \cdot \mathbf{B}, \quad (\text{C.3})$$

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{I}, \quad (\text{C.4})$$

$$\text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}, \quad (\text{C.5})$$

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \mathbf{c} = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{a}, \quad (\text{C.6})$$

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})^T = (\mathbf{b} \otimes \mathbf{a}), \quad (\text{C.7})$$

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})(\mathbf{c} \otimes \mathbf{d}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{a} \otimes \mathbf{d}), \quad (\text{C.8})$$

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \otimes \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}), \quad (\text{C.9})$$

$$\text{tr}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, \quad (\text{C.10})$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{A} \mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}), \quad (\text{C.11})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = (\mathbf{A}\mathbf{a}) \otimes \mathbf{b}, \quad (\text{C.12})$$

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes (\mathbf{A}^T\mathbf{b}), \quad (\text{C.13})$$

onde \mathbf{I} denota o tensor identidade de segunda ordem, tal que $\mathbf{I}\mathbf{A} = \mathbf{A} \quad \forall \mathbf{A} \in Lin$.

No caso particular das operações vinculadas com tensores de quarta ordem, podem ser citados os trabalhos de Del Piero (1979) [100] e, mais recentemente, Jog (2006) [62] e Moakher (2008) [85]. Considerando, portanto, que \mathbf{a} e \mathbf{b} são vetores e \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} e \mathbf{D} tensores de segunda ordem, as seguintes identidades são válidas:

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})\mathbf{C} = (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})\mathbf{A}, \quad (\text{C.14})$$

$$(\mathbf{A} \boxtimes \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{B}^T, \quad (\text{C.15})$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}) = (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{A} \otimes \mathbf{D}), \quad (\text{C.16})$$

$$(\mathbf{A} \boxtimes \mathbf{B})(\mathbf{C} \boxtimes \mathbf{D}) = (\mathbf{A}\mathbf{C}) \boxtimes (\mathbf{B}\mathbf{D}), \quad (\text{C.17})$$

$$(\mathbf{A} \boxtimes \mathbf{I})\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{B}, \quad (\text{C.18})$$

$$(\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{A}^T)\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{A}, \quad (\text{C.19})$$

$$(\mathbf{A} \boxtimes \mathbf{B})(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = (\mathbf{A}\mathbf{a} \otimes \mathbf{B}\mathbf{b}). \quad (\text{C.20})$$

Sendo que os tensores de quarta ordem são definidos como transformações lineares que mapeiam elementos do conjunto Lin no mesmo conjunto Lin , tem-se que os tensores de quarta ordem: nulo (\mathbb{O}), identidade (\mathbb{I}), transposição (\mathbb{T}), simetrização (\mathbb{S}) e anti-simetrização (\mathbb{W}) podem ser definidos como:

$$\mathbb{O}\mathbf{A} = \mathbf{O} \quad \forall \mathbf{A} \in Lin, \quad (\text{C.21})$$

$$\mathbb{I}\mathbf{A} = \mathbf{A} \quad \forall \mathbf{A} \in Lin, \quad (\text{C.22})$$

$$\mathbb{T}\mathbf{A} = \mathbf{A}^T \quad \forall \mathbf{A} \in Lin, \quad (\text{C.23})$$

$$\mathbb{S}\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \quad \forall \mathbf{A} \in Lin, \quad (\text{C.24})$$

$$\mathbb{W}\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T) \quad \forall \mathbf{A} \in Lin, \quad (\text{C.25})$$

sendo \mathbf{O} o tensor nulo de segunda ordem, tal que $\mathbf{O}\mathbf{A} = \mathbf{O} \quad \forall \mathbf{A} \in Lin$.

Finalmente, pode-se demonstrar facilmente que os tensores definidos anteriormente possuem as seguintes propriedades:

$$\mathbb{S}\mathbb{S} = \mathbb{S}, \quad (\text{C.26})$$

$$\mathbb{W}\mathbb{W} = \mathbb{W}, \quad (\text{C.27})$$

$$\mathbb{S}\mathbb{W} = \mathbb{W}\mathbb{S} = \mathbb{O}, \quad (\text{C.28})$$

$$\mathbb{T}\mathbb{W} = \mathbb{W}\mathbb{T} = -\mathbb{W}, \quad (\text{C.29})$$

$$\mathbb{I} = \mathbf{I} \boxtimes \mathbf{I}, \quad (\text{C.30})$$

$$\mathbb{I} = \mathbb{S} + \mathbb{W}, \quad (\text{C.31})$$

$$\mathbb{T}\mathbb{T} = \mathbb{I}, \quad (\text{C.32})$$

$$\mathbb{T}(\mathbf{A} \boxtimes \mathbf{B}) = (\mathbf{B} \boxtimes \mathbf{A})\mathbb{T}. \quad (\text{C.33})$$

C.2 Operações de diferenciação

Nesta seção são mostrados alguns resultados básicos associados aos operadores diferenciais gradiente e divergente. Portanto, considere aos campos φ , \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{T} e \mathbf{U} suficientemente regulares, sendo φ escalar; \mathbf{u} e \mathbf{v} vetoriais; \mathbf{T} e \mathbf{U} tensoriais, então são válidas as identidades:

$$\nabla(\varphi\mathbf{u}) = \varphi\nabla\mathbf{u} + \mathbf{u} \otimes \nabla\varphi, \quad (\text{C.34})$$

$$\text{div}(\varphi\mathbf{u}) = \varphi\text{div}\mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla\varphi, \quad (\text{C.35})$$

$$\nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) = (\nabla\mathbf{u})^T\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T\mathbf{u}, \quad (\text{C.36})$$

$$\text{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = \mathbf{u}\text{div}\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{u})\mathbf{v}, \quad (\text{C.37})$$

$$\text{div}(\mathbf{T}^T\mathbf{u}) = \text{div}\mathbf{T} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}, \quad (\text{C.38})$$

$$\text{div}(\varphi\mathbf{T}) = \varphi\text{div}\mathbf{T} + \mathbf{T}\nabla\varphi, \quad (\text{C.39})$$

$$\text{div}(\nabla\mathbf{u}^T) = \nabla(\text{div}\mathbf{u}), \quad (\text{C.40})$$

$$\nabla(\mathbf{T} \cdot \mathbf{U}) = (\nabla\mathbf{T})^T\mathbf{U} + (\nabla\mathbf{U})^T\mathbf{T}, \quad (\text{C.41})$$

$$\text{div}(\mathbf{T}\mathbf{U}) = (\nabla\mathbf{T})\mathbf{U} + \mathbf{T}\text{div}\mathbf{U}. \quad (\text{C.42})$$

C.3 Operações integrais

No desenvolvimento do presente estudo, foram utilizados resultados da álgebra tensorial envolvendo operadores integrais. Assim sendo, o intuito desta seção é apresentar os principais resultados associado a este tipo de operações. Começaremos mostrando os resultados clássicos do teorema da divergência. Portanto, considerando que os campos φ , \mathbf{u} e \mathbf{T} são suficientemente regulares no domínio Ω de contorno suave denotado por $\partial\Omega$, e sendo φ escalar, \mathbf{u} vetorial e \mathbf{T} tensorial, então são válidas as identidades:

$$\int_{\partial\Omega} \varphi\mathbf{n}dS = \int_{\Omega} \nabla\varphi dV, \quad (\text{C.43})$$

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}dS = \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{u})dV, \quad (\text{C.44})$$

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{T}\mathbf{n}dS = \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{T})dV, \quad (\text{C.45})$$

sendo \mathbf{n} o vetor normal unitário saliente ao contorno $\partial\Omega$.

Levando em conta os resultados mostrados anteriormente, junto com as operações apresentadas nas Seções C.1 e C.2, tem-se que as seguintes igualdades associadas a operadores integrais no domínio Ω são satisfeitas:

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n}dS = \int_{\Omega} \nabla\mathbf{u}dV, \quad (\text{C.46})$$

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{T}\mathbf{n} \otimes \mathbf{u}dS = \int_{\Omega} [\text{div}(\mathbf{T}) \otimes \mathbf{u} + \mathbf{T}(\nabla\mathbf{u})^T] dV, \quad (\text{C.47})$$

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{T}\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}dS = \int_{\Omega} [\mathbf{u} \cdot \text{div}(\mathbf{T}) + \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}] dV, \quad (\text{C.48})$$

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{v}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})dS = \int_{\Omega} [\mathbf{v}\text{div}(\mathbf{u}) + (\nabla\mathbf{v})\mathbf{u}] dV. \quad (\text{C.49})$$

Referências Bibliográficas

- [1] R.F. Almgreen. An isotropic three-dimensional structure with Poisson's ratio -1 . *Journal of Elasticity*, 15(4):427–430, 1985.
- [2] H. Ammari and H. Kang. *Reconstruction of small inhomogeneities from boundary measurements*. Lectures Notes in Mathematics vol. 1846. Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [3] S. Amstutz. *Aspects théoriques et numériques en optimisation de forme topologique*. Phd thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, France, 2003.
- [4] S. Amstutz. The topological asymptotic for the Navier-Stokes equations. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 11(3):401–425, 2005.
- [5] S. Amstutz. Sensitivity analysis with respect to a local perturbation of the material property. *Asymptotic Analysis*, 49(1-2):87–108, 2006.
- [6] S. Amstutz. Topological sensitivity analysis for some nonlinear pde systems. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 85(4):540–557, 2006.
- [7] S. Amstutz and H. Andrä. A new algorithm for topology optimization using a level-set method. *Journal of Computational Physics*, 216(2):573–588, 2006.
- [8] S. Amstutz, I. Horchani, and M. Masmoudi. Crack detection by the topological gradient method. *Control and Cybernetics*, 34(1):81–101, 2005.
- [9] J.L. Auriault. Effective macroscopic description for heat conduction in periodic composites. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 26(6):861–869, 1983.
- [10] J.L. Auriault and P. Royer. Double conductivity media: a comparison between phenomenological and homogenization approaches. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(10):2613–2621, 1993.
- [11] D. Auroux, M. Masmoudi, and L. Belaid. Image restoration and classification by topological asymptotic expansion. In *Variational formulations in mechanics: theory and applications*, Barcelona, Spain, 2007.
- [12] P. Avserth, T. Mukerji, and G. Mavko. *Quantitative seismic interpretation: applying rock physics tools to reduce interpretation risk*. Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [13] G. Backus. A geometrical picture of anisotropic elastic tensors. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 8(3):633–671, 1970.
- [14] N. Bakhvalov and G. Panasenko. *Homogenization: averaging process in periodic media*. Kluwer, Dordrecht, 1989.
- [15] L.J. Belaid, M. Jaoua, M. Masmoudi, and L. Siala. Application of the topological gradient to image restoration and edge detection. *Engineering Analysis with Boundary Element*, 32(11):891–899, 2008.
- [16] M.P. Bendsøe and N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using an homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 71(2):197–224, 1988.

- [17] A. Bensoussan, J.L. Lions, and G. Papanicolau. *Asymptotic analysis for periodic microstructures*. North Holland, Amsterdam, 1978.
- [18] H.J. Böhm. *A short introduction to basic aspects of continuum micromechanics*. in *Mechanics of Microstructured Materials, CISM Course and Lecture Notes*, vol. 464. Springer-Verlag, Vienna, Italy, 2004.
- [19] H.J. Böhm, A. Eckschlager, and W. Han. Multi-inclusion unit cell models for metal matrix composites with randomly oriented discontinuous reinforcements. *Computational Materials Science*, 25(1-2):42–53, 2002.
- [20] M. Bonnet. Topological sensitivity for 3d elastodynamic and acoustic inverse scattering in the time domain. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(37-40):5239–5254, 2006.
- [21] G. Buonanno and A. Carotenuto. The effective thermal conductivity of packed beds of spheres for a finite area. *Numerical Heat Transfer, Part A: Application*, 37(4):343–357, 2000.
- [22] M. Burger, B. Hackl, and W. Ring. Incorporating topological derivatives into level set methods. *Journal of Computational Physics*, 194(1):344–362, 2004.
- [23] B.M. Canuta. *Ceramics and composite materials: new research*. Nova Science Publishers, New York, 2006.
- [24] J.K. Carson, S.J. Lovatt, D.J. Tanner, and A.C. Cleland. Experimental measurements of the effective thermal conductivity of a pseudo-porous food analogue over a range of porosities and mean pore sizes. *Journal of Food Engineering*, 63(1):87–95, 2004.
- [25] J.K. Carson, S.J. Lovatt, D.J. Tanner, and A.C. Cleland. Thermal conductivity bounds for isotropic, porous materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(11):2150–2158, 2005.
- [26] J. Céa, S. Garreau, Ph. Guillaume, and M. Masmoudi. The shape and topological optimizations connection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 188(4):713–726, 2000.
- [27] D.J. Cedio-Fengya, S. Moskow, and M.S. Vogelius. Identification of conductivity imperfections of small diameter by boundary measurements. continuous dependence and computational reconstruction. *Inverse Problems*, 14(3):553–595, 1998.
- [28] V.J. Challis, A.P. Roberts, and A.H. Wilkins. Design of three dimensional isotropic microstructures for maximized stiffness and conductivity. *International Journal of Solids and Structures*, 45(14-15):4130–4146, 2008.
- [29] J.D. Clayton and D.L. McDowell. A multiscale multiplicative decomposition for elastoplasticity of polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 19(9):1401–1444, 2003.
- [30] J. Rocha de Faria. *Análise de sensibilidade topológica de segunda ordem*. Phd thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, Brazil, 2007.
- [31] J. Rocha de Faria, R.A. Feijóo, A.A. Novotny, E. Taroco, and C. Padra. Second order topological sensitivity analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 44(14-15):4958–4977, 2007.

- [32] E.A. de Souza Neto and R.A. Feijóo. Variational foundations of multi-scale constitutive models of solid: small and large strain kinematical formulation. Technical Report N° 16/2006, Laboratório Nacional de Computação Científica LNCC/MCT, Petrópolis, Brasil, 2006.
- [33] E.A. de Souza Neto and R.A. Feijóo. On the equivalence between spatial and material volume averaging of stress in large strain multi-scale solid constitutive models. *Mechanics of Materials*, 40(10):803–811, 2008.
- [34] P. Eberhard. Proceedings of the IUTAM symposium on multiscale problems in multibody system contacts. In *IUTAM*, Stuttgart, Germany, 2006.
- [35] J.D. Eshelby. The elastic energy-momentum tensor. *Journal of Elasticity*, 5(3-4):321–335, 1975.
- [36] A. Eucken. Allgemeine gesetzmäßigkeiten für wärmeleitvermögen verschiedener stoffarten und aggregatzustände. *Forschung Gabiete Ingenieur*, 11(1):6–20, 1940.
- [37] G.R. Feijóo. A new method in inverse scattering based on the topological derivative. *Inverse Problems*, 20(6):1819–1840, 2004.
- [38] R.A. Feijóo, A.A. Novotny, E. Taroco, and C. Padra. The topological derivative for the Poisson’s problem. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 13(12):1825–1844, 2003.
- [39] J.S.O. Fonseca. *Design of microstructures of periodic composite materials*. Phd thesis, The University Of Michigan, Michigan, USA, 1997.
- [40] S. Garreau, Ph. Guillaume, and M. Masmoudi. The topological asymptotic for pde systems: the elasticity case. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 39(6):1756–1778, 2001.
- [41] D.C. Gazis, I. Tadjbakhsh, and R. A. Toupin. The elastic tensor of given symmetry nearest to an anisotropic elastic tensor. *Acta Crystallographica*, 16(9):917–922, 1963.
- [42] P. Germain, Q.S. Nguyen, and P. Suquet. Continuum thermodynamics. *Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME*, 50(4):1010–1020, 1983.
- [43] S.M. Giusti, P.J. Blanco, E.A. de Souza Neto, and R.A. Feijóo. An assessment of the Gurson yield criterion by a computational multi-scale approach. *Engineering Computations*, 26(3):281–301, 2009.
- [44] S.M. Giusti, A.A. Novotny, R.A. Feijóo, and E.A. de Souza Neto. Variational formulation for multi-scale constitutive models in steady-state heat conduction problem on rigid solids. In *19th International Congress of Mechanical Engineering, COBEM Proceedings*, Brasília, Brasil, 2007.
- [45] S.M. Giusti, A.A. Novotny, and C. Padra. Topological sensitivity analysis of inclusion in two-dimensional linear elasticity. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 32(11):926–935, 2008.
- [46] J.K. Guest and J.H. Prevost. Optimizing multifunctional materials: design of microstructures for maximized stiffness and fluid permeability. *International Journal of Solids and Structures*, 43(22-23):7028–7047, 2006.
- [47] P. Guillaume and K. Sid Idris. The topological asymptotic expansion for the Dirichlet problem. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 41(4):1042–1072, 2002.

- [48] P. Guillaume and K. Sid Idris. Topological sensitivity and shape optimization for the Stokes equations. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 43(1):1–31, 2004.
- [49] M.E. Gurtin. *An introduction to continuum mechanics*. Mathematics in Science and Engineering vol. 158. Academic Press, New York, 1981.
- [50] B.B. Guzina and M. Bonnet. Small-inclusion asymptotic of misfit functionals for inverse problems in acoustics. *Inverse Problems*, 22(5):1761–1785, 2006.
- [51] B.B. Guzina and I. Chikichev. From imaging to material identification: a generalized concept of topological sensitivity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(2):245–279, 2007.
- [52] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2):127–140, 1963.
- [53] R. Hill. A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4):213–222, 1965.
- [54] M. Hintermüller. Fast level set based algorithms using shape and topological sensitivity. *Control and Cybernetics*, 34(1):305–324, 2005.
- [55] G.A. Holzapfel. *Computational biomechanics of soft biological tissue*. Encyclopedia of Computational Mechanics, Solids and Structures, vol. 2. Wiley, Chichester, 2004.
- [56] G.A. Holzapfel, T.C. Gasser, and R.W. Ogden. A new constitutive framework for arterial wall mechanics and a comparative study of material models. *Journal of Elasticity*, 61(1):1–48, 2000.
- [57] M. Hori and S. Nemat-Nasser. On two micromechanics theories for determining micro-macro relations in heterogeneous solids. *Mechanics of Materials*, 31(10):667–682, 1999.
- [58] J.D. Humphrey. Continuum biomechanics of soft biological tissues. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 459(2029):3–46, 2003.
- [59] S. Hyun and S. Torquato. Designing composite microstructures with targeted properties. *Journal of Materials Research*, 16(1):280–285, 2001.
- [60] A. Ibrahimbegović and D. Markovič. Strong coupling methods in multi-phase and multi-scale modeling of inelastic behavior of heterogeneous structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3089–3107, 2003.
- [61] F. Jiang and A.C.M. Sousa. Effective thermal conductivity of heterogeneous multi-component materials: an SPH implementation. *Heat and Mass transfer*, 43(5):479–491, 2007.
- [62] C.S. Jog. A concise proof of the representation theorem for fourth-order isotropic tensors. *Journal of Elasticity*, 85(2):119–124, 2006.
- [63] N. Kikuchi, S. Nishiwaki, J.S.O. Fonseca, and E.C.N. Silva. Design optimization method for compliant mechanics and material microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151(3-4):401–417, 1998.
- [64] R. Kohn and M. Vogelius. Relaxation of a variational method for impedance computed tomography. *Communication on Pure and Applied Mathematics*, 40(6):745–777, 1987.

- [65] V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale second order computational homogenization of multi-phase materials: a nested finite element solution strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51):5525–5550, 2004.
- [66] V.A. Kozlov, W.G. Maz'ya, and A.B. Movchan. *Asymptotic analysis of fields in multi-structures*. Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [67] D. Kumlutas and I.H. Tavman. A numerical and experimental study on thermal conductivity of particle filled polymer composites. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 19(4):441–455, 2006.
- [68] R. Lakes. Foam structures with negative Poisson's ratio. *Science, AAAS*, 235(4792):1038–1040, 1987.
- [69] R. Lakes. Negative Poisson's ratio materials. *Science, AAAS*, 238(4826):551, 1987.
- [70] I. Larrabide. *Processamento de imagens via derivada topológica e suas aplicações na modelagem e simulação computacional do sistema cardiovascular humano*. Phd thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, Brazil, 2007.
- [71] I. Larrabide, R.A. Feijóo, A.A. Novotny, and E. Taroco. Topological derivative: a tool for image processing. *Computers & Structures*, 86(13-14):1386–1403, 2008.
- [72] T. Lewinski and J. Sokołowski. Energy change due to the appearance of cavities in elastic solids. *International Journal of Solids and Structures*, 40(7):1765–1803, 2003.
- [73] J.L. Lions. *Some methods in the mathematical analysis of systems and their control*. Science Press, New York, 1981.
- [74] R.W. Little. *Elasticity*. Prentice-Hall, New Jersey, 1973.
- [75] J. Mandel. *Plasticité classique et viscoplasticité*. CISM Lecture Notes. Springer-Verlag, Udine, 1971.
- [76] K.Z. Markov. *Micromechanics modeling methods and simulations*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Springer, Boston, 2000.
- [77] M. Masmoudi, J. Pommier, and B. Samet. The topological asymptotic expansion for the Maxwell equations and some applications. *Inverse Problems*, 21(2):547–564, 2005.
- [78] K. Matsui, K. Terada, and K. Yuge. Two-scale finite element analysis of heterogeneous solids with periodic microstructure. *Computer and Structures*, 82(7-8):593–606, 2004.
- [79] J.C. Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*. Third ed. Dover Publication Inc., New York, 1954.
- [80] W.G. Mazja, S.A. Nasarow, and B.A. Plamenewski. *Asymptotische theorie elliptischer randwertaufgaben in singular gestörten gebieten, vol. 1 (English translation: Asymptotic theory of elliptic boundary value problems in singularly perturbed domains, vol. 1, Basel: Birkhäuser Verlag, 2000)*. Akademie-Verlag, Berlin, 1991.
- [81] J.C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1-4):109–143, 1999.

- [82] C. Miehe. Strain-driven homogenization of inelastic microstructures and composites based on an incremental variational formulation. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 55(11):1285–1322, 2002.
- [83] C. Miehe and A. Koch. Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains. *Archives of Applied Mechanics*, 72(4-5):300–317, 2002.
- [84] C. Miehe, J. Schotte, and J. Schröder. Computational micro-macro transitions and overall moduli in the analysis of polycrystals at large strains. *Computational Materials Science*, 16(1-4):372–382, 1999.
- [85] M. Moakher. Fourth-order cartesian tensors: old and new facts, notions and applications. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 61(2):181–203, 2008.
- [86] S.A. Nazarov and J. Sokołowski. Asymptotic analysis of shape functionals. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 82(2):125–196, 2003.
- [87] S.A. Nazarov and J. Sokołowski. The topological derivative of the Dirichlet integral due to formation of a thin ligament. *Siberian Mathematical Journal*, 45(2):341–355, 2004.
- [88] S. Nemat-Nasser. Averaging theorems in finite deformation plasticity. *Mechanics of Materials*, 31(8):493–523, 1999.
- [89] S. Nemat-Nasser and M. Hori. *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*. North-Holland, Amsterdam, 1993.
- [90] A.A. Novotny. *Análise de sensibilidade topológica*. Phd thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, Brazil, 2003.
- [91] A.A. Novotny, R.A. Feijóo, C. Padra, and E. Taroco. Derivada topológica via análise de sensibilidade à mudança de forma na otimização topológica. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 18(4):499–519, 2002.
- [92] A.A. Novotny, R.A. Feijóo, C. Padra, and E. Taroco. Topological sensitivity analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(7-8):803–829, 2003.
- [93] A.A. Novotny, R.A. Feijóo, C. Padra, and E. Taroco. Topological derivative for linear elastic plate bending problems. *Control and Cybernetics*, 34(1):339–361, 2005.
- [94] A.A. Novotny, R.A. Feijóo, E. Taroco, and C. Padra. Topological sensitivity analysis for three-dimensional linear elasticity problem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(41-44):4354–4364, 2007.
- [95] L. Obert and W.I. Duvall. *Rock mechanics and the design of structures in rock*. John Wiley & Sons, New York, 1967.
- [96] M. Ostoja-Starzewski. Material spatial randomness: from statistical to representative volume element. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 21(2):112–132, 2006.
- [97] M. Ostoja-Starzewski and J. Schulte. Bounding of effective thermal conductivities of multiscale materials by essential and natural boundary conditions. *Physical Review B*, 54(1):278–285, 1996.
- [98] D.R.J. Owen and E. Oñate. Proceedings of the eighth international conference on computational plasticity. In *COMPLAS VIII*, CIMNE, Barcelona, Spain, 2005.

- [99] W. Pabst, G. Tichá, E. Gregorová, and E. Týnová. Effective elastic properties of Alumina-Zirconia composite ceramics - part 5: tensile modulus of Alumina-Zirconia composite ceramics. *Ceramics-Silikáty*, 49(2):77–85, 2005.
- [100] G. Del Piero. Some properties of the set of fourth-order tensors, with application to elasticity. *Journal of Elasticity*, 9(3):245–261, 1979.
- [101] Z. Poniznik, V. Salit, M. Basista, and D. Gross. Effective elastic properties of interpenetrating phase composites. *Computational Materials Science*, 44(2):813–820, 2008.
- [102] D. Prall and R.S. Lakes. Properties of a chiral honeycomb with a Poisson’s ratio -1. *International Journal of Mechanical Sciences*, 39(3):305–314, 1997.
- [103] A. Reuss. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9:49–58, 1929.
- [104] R.P.A. Rocha and M.E. Cruz. Computation of the effective conductivity of unidirectional fibrous composites with an interfacial thermal resistance. *Numerical Heat Transfer, Part A: Application*, 39(2):179–203, 2001.
- [105] T. Sadowski. Proceedings of the IUTAM symposium on multiscale modelling of damage and fracture processes in composite materials. In *IUTAM*, Poland, 2005.
- [106] B. Samet, S. Amstutz, and M. Masmoudi. The topological asymptotic for the Helmholtz equation. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 42(5):1523–1544, 2003.
- [107] E. Sanchez-Palencia. Equations aux dérivées partielles dans un type de milieux hétéroènes. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences de Paris Serie A–B*, 272:A1410–A1413, 1971.
- [108] E. Sanchez-Palencia. Comportement local et macroscopique d’un type de milieux physiques hétéroènes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4):331–351, 1974.
- [109] E. Sanchez-Palencia. *Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127 of *Lecture Notes in Physics 127*. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [110] B.A. Schrefler and U. Perego. Proceedings of the eighth world congress on computational mechanics and fifth european congress on computational methods in applied sciences and engineering. In *WCCM8/ECCOMAS2008*, Venice, Italy, 2008.
- [111] O. Sigmund. Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem. *International Journal Solids and Structures*, 31(17):2313–2329, 1994.
- [112] E.C.N. Silva, J.S.O. Fonseca, and N. Kikuchi. Optimal design of periodic microstructures. *Computational Mechanics*, 19(5):397–410, 1997.
- [113] E.C.N. Silva, J.S.O. Fonseca, and N. Kikuchi. Optimal design of periodic piezocomposites. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 159(1-2):49–77, 1998.

- [114] E.C.N. Silva, S. Nishiwaki, J.S.O. Fonseca, and N. Kikuchi. Optimization methods applied to material and flexensional actuator design using the homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1-4):241–271, 1999.
- [115] J. Sokołowski. Optimality conditions for simultaneous topology and shape optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 42(4):1198–1221, 2003.
- [116] J. Sokołowski and A. Żochowski. On the topological derivatives in shape optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 37(4):1251–1272, 1999.
- [117] J. Sokołowski and A. Żochowski. Topological derivatives for elliptic problems. *Inverse Problems*, 15(1):123–134, 1999.
- [118] J. Sokołowski and A. Żochowski. Topological derivatives of shape functionals for elasticity systems. *Mechanics of Structures and Machines*, 29(3):333–351, 2001.
- [119] J. Sokołowski and A. Żochowski. Modelling of topological derivatives for contact problems. *Numerische Mathematik*, 102(1):145–179, 2005.
- [120] J. Sokołowski and A. Żochowski. Topological derivatives for obstacle problems. In *22nd IFIP TC 7 Conference on System Modeling and Optimization, IFIP Proceedings*, Turin, Italy, 2005.
- [121] D.C.D. Speirs, E.A. de Souza Neto, and D. Perić. An approach to the mechanical constitutive modelling of arterial tissue based on homogenization and optimization. *Journal of Biomechanics*, 41(12):2673–2680, 2008.
- [122] A.J.M. Spencer. A note on the decomposition of tensors into traceless symmetric tensors. *International Journal of Engineering Science*, 8(6):475–481, 1970.
- [123] P.M. Suquet. *Elements of homogenization for inelastic solid mechanics*, volume 272 of *Homogenization techniques for composite media, Lecture Notes in Physics 272*. Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- [124] K. Terada, I. Saiki, K. Matsui, and Y. Yamakawa. Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(31-32):3531–3563, 2003.
- [125] P.S. Theocaris, G.E. Stavroulakis, and P.D. Panagiotopoulos. Negative Poisson’s ratios in composites with star-shaped inclusions: a numerical homogenization approach. *Archive of Applied Mechanics*, 67(4):274–286, 1997.
- [126] T.C.T. Ting and Q.C. He. Decomposition of elasticity tensors and tensors that are structurally invariant in three dimensions. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 59(3):323–341, 2006.
- [127] S. Torquato. *Microstructure optimization*. Handbook of Materials Modeling. Springer Netherlands, Netherlands, 2005.
- [128] S. Torquato, S. Hyun, and A. Donev. Multifunctional composites: optimizing microstructures for simultaneous transport of heat and electricity. *Physical Review Letters*, 89(26):art. 266601, 2002.
- [129] C. Truesdell. *Rational thermodynamics*. McGraw-Hill, New York, 1969.

- [130] Y.O. Tu. The decomposition of an anisotropic elastic tensor. *Acta Crystallographica Section A*, 24(2):273–282, 1968.
- [131] V. Tvergaard. Proceedings of the IUTAM symposium on plasticity at the micro-scale. In *IUTAM*, Lyngby, Denmark, 2006.
- [132] W. Voigt. Über die beziehung zwischen den beiden elastizitätskonstanten isotroper körper. *Wiedemann Annalen*, 38:573–587, 1889.
- [133] J. Wang, J.K. Carson, M.F. North, and D.J. Cleland. A new approach to modelling the effective thermal conductivity of heterogeneous materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(17-18):3075–3083, 2006.
- [134] H.M. Yin, G.H. Paulino, W.G. Buttlar, and L.Z. Sun. Effective thermal conductivity of two-phase functionally graded particulate composites. *Journal of Applied Physics*, 98(6):art. no.063704, 2005.
- [135] Y.M. Yin, S.H. Park, and S.K. Youn. Design of microstructures of viscoelastic composites for optimal damping characteristics. *International Journal of Solids and Structures*, 37(35):4791–4810, 2000.
- [136] A. Żochowski. Optimal perforation design in 2-dimensional elasticity. *Mechanics of Structures and Machines*, 16(1):17–33, 1988.