



**Joaquim Alexandre
Mendes de
Pinho-da-Cruz**

**Caracterização Termomecânica de Materiais
Multifásicos Utilizando Procedimentos de
Homogeneização**

Thermomechanical Characterisation of Multiphase
Materials Using Homogenisation Procedures





**Joaquim Alexandre
Mendes de
Pinho-da-Cruz**

**Caracterização Termomecânica de Materiais
Multifásicos Utilizando Procedimentos de
Homogeneização**

**Thermomechanical Characterisation of Multiphase
Materials Using Homogenisation Procedures**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, realizada sob a orientação científica do Doutor Filipe Miguel Horta e Vale Teixeira-Dias, Professor Auxiliar do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro.

Apoio financeiro do POCTI no âmbito
do III Quadro Comunitário de Apoio.

Apoio financeiro da FCT e do FSE no
âmbito do III Quadro Comunitário de
Apoio.

o júri

presidente

Professor Doutor António Mendes dos Santos Moderno
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Professor Doutor Paulo Manuel Salgado Tavares de Castro
Professor Catedrático da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Professor Doutor Vítor José Babau Torres
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Professor Doutor Luís Filipe Martins Menezes
Professor Associado com Agregação da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Professor Doutor Alfredo Manuel Balacó de Morais
Professor Associado da Universidade de Aveiro

Professor Doutor Jorge Augusto Fernandes Ferreira
Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro

Professor Doutor Filipe Miguel Horta e Vale Teixeira-Dias
Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro

agradecimentos

Ao Professor Doutor Filipe Teixeira-Dias, pela rigorosa orientação deste trabalho, pela transmissão de ensinamentos preciosos e pela disponibilidade permanente. Um agradecimento muito especial pelo seu apoio e pela amizade em todos os momentos, especialmente nos mais difíceis.

Ao Mestre João Oliveira, pela preciosa e incansável colaboração que me prestou na elaboração deste trabalho, em particular na elaboração de grande parte das figuras nele presentes, assim como pela disponibilidade e pela amizade permanentemente demonstradas. Não posso também deixar de agradecer as longas noites de trabalho e de discussão científica que juntos passámos.

Ao Professor Doutor Luís Filipe Menezes e à Professora Doutora Marta Oliveira, pela disponibilidade constante e por todo o apoio e amizade que sempre demonstraram.

Ao Professor Doutor Gil Andrade-Campos, pela colaboração e pela amizade demonstrada.

Ao Mestre Hugo Calisto, pelo constante apoio e pela amizade demonstrada. Jamais esquecerei as longas e inúmeras noites de conversa, em que comigo partilhou o seu vasto e sólido saber cultural.

À Professora Doutora Mónica Oliveira e ao Professor Nélson Martins, pela amizade e apoio que desde sempre demonstraram.

Aos Engenheiros Vítor Miranda, Rui Igreja e Pedro Carvalho, pela amizade e apoio prestado.

Ao Professor Doutor Vítor Torres e ao Dr. Manuel Barroso, do Departamento de Física da Universidade de Aveiro, pelo facto de terem prontamente disponibilizado a utilização do *cluster* Tetis e pelo precioso apoio prestado durante os ensaios de cálculo paralelo e distribuído.

Aos colegas e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, pelo constante apoio prestado e pelo modo com que me acolheram.

À Fundação para a Ciência e a Tecnologia, e ao Fundo Social Europeu, por todo o apoio prestado através não só da bolsa de Investigação Científica SFRH/BD/3251/2000 mas também do projecto POCTI/EME/39403/2001, do Programa Operacional Ciência, Tecnologia, Inovação, no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio, FEDER.

À Manuela, por todos os sacrifícios e por toda a paciência e compreensão pelo tempo não-vivido em comum.

A todos os meus amigos, pelo apoio e encorajamento, e por todos os momentos de alegre convívio, sem esquecer a compreensão de algumas minhas ausências.

Aos meus pais e irmãos, pelo seu constante incentivo e pelo seu incondicional apoio.

A todos e a cada um em particular, a minha eterna gratidão.

palavras-chave

Materiais compósitos; método dos elementos finitos; termoelasticidade linear; homogeneização por expansão assintótica; elastoplasticidade, computação paralela e distribuída.

resumo

A simulação numérica, em particular a modelação por elementos finitos, desempenha um papel de importância crucial na análise do comportamento termomecânico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos com microestruturas complexas. A sua utilização leva geralmente à necessidade de se recorrer não só a malhas não-estruturadas de elementos finitos mas também a um elevado número de elementos finitos para a definição dos detalhes microestruturais. Em geral, este facto impossibilita, mesmo no contexto da termoelasticidade linear, a modelação numérica do comportamento termomecânico deste tipo de componentes estruturais, visto ser necessário utilizar uma grande quantidade de memória computacional e despendar tempos de computação excessivamente longos. Neste contexto, o recurso a metodologias de homogeneização pode resultar em benefícios computacionais significativos. Estas técnicas permitem a substituição de um meio heterogéneo por um meio homogéneo equivalente, possibilitando, deste modo, a obtenção de leis de comportamento macroestruturais a partir de informação relativa ao nível microestrutural.

A aplicação do método dos elementos finitos dá origem a sistemas de equações lineares, cuja resolução influencia peremptoriamente o desempenho computacional da simulação numérica. Em geral, a resolução de sistemas de equações lineares de dimensão considerável requer a utilização de técnicas de computação paralela. Por outro lado, a crescente necessidade de elevada capacidade de processamento em diversas áreas científicas tem levado a que se tenham vindo a constituir sistemas computacionais poderosos e economicamente viáveis, denominados *clusters* Beowulf. Neste contexto, o desenvolvimento e a implementação de metodologias conducentes à paralelização de um programa de simulação numérica por elementos finitos deverão permitir colmatar de um modo não-dispendioso, através da utilização de um *cluster* Beowulf, as elevadas exigências computacionais associadas à modelação quer do comportamento termomecânico de materiais compósitos quer do comportamento elastoplástico de materiais homogéneos.

Assim, no presente trabalho pretende-se desenvolver uma plataforma numérica totalmente paralelizada que permita não só a modelação do comportamento termoelástico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos utilizando procedimentos de homogeneização por expansão assintótica mas também a modelação quer do comportamento térmico em regime transitório não-linear de materiais compósitos quer do comportamento elastoplástico de materiais homogéneos.

keywords

Composite materials; finite element method; linear thermoelasticity; asymptotic expansion homogenisation; elastoplasticity; parallel and distributed computing.

abstract

Numerical simulation, and in particular finite element (FE) simulation, plays a crucial role in the analysis of the thermomechanical behaviour of structural elements built from composite materials with complex microstructures. In order to define microstructural details, the use of FE numerical simulation often leads to the need for unstructured meshes and large numbers of finite elements. This fact frequently makes it impossible to perform numerical analyses on the thermomechanical behaviour of such structural components, due to the fact that large amounts of memory are needed and long CPU times required. It is in this particular context that homogenisation methodologies may lead to significant computational benefits. With these techniques it is possible to replace a heterogeneous medium with the equivalent homogeneous medium, leading to the determination of macrostructural behaviour models from the information available at the microstructural level.

The solution of the systems of linear equations associated to the application of the finite element method influences the computational performance of the numerical simulation. In general terms, the solution of these systems of equations leads to the implementation of parallel computation. However, the growing need for higher processing performance has led to the development of powerful and economically viable computational systems, named Beowulf clusters. In this context, the development and implementation of parallel computation methodologies should lead to low-cost and high-performance numerical simulations both of the thermomechanical behaviour of composite materials and the elastoplastic behaviour of homogeneous materials.

The work here presented is related to the development of a fully parallelised numerical platform that enables the modelling of the thermoelastic behaviour of structural components built from composite materials using asymptotic expansion homogenisation procedures. This computational finite element analysis platform may also be used to model the non-linear transient thermal behaviour of composite materials and the elastoplastic behaviour of homogeneous materials.

“This is not the end.
It is not even the beginning of the end.
But it is, perhaps, the end of the beginning.”

Sir Winston Churchill, 1942

Conteúdo

I	Enquadramento	1
1	Introdução	3
1.1	Enquadramento	3
1.2	Objectivos	5
1.3	Guia de Leitura	6
1.4	Terminologia e Notação Utilizadas	9
II	Modelação Matemática e Formulação Numérica	11
2	Problema Térmico — Condução de Calor em Regime Transitório	13
2.1	Introdução	13
2.2	Formulação Diferencial do Problema Térmico	14
2.3	Formulação Integral Fraca do Problema Térmico	15
2.4	Semidiscretização Espacial por Elementos Finitos	16
2.5	Discretização e Integração Temporais do Problema Térmico	17
2.6	Integração Implícita da Equação Discretizada	20
2.7	CrITÉrios de Convergência e de Paragem	24
3	Problema Termomecânico — Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada	27
3.1	Introdução	27
3.2	Formulação Diferencial do Problema Termoelástico	28
3.3	Formulação Integral Fraca do Problema Termoelástico	30
3.4	Discretização Espacial por Elementos Finitos	31
4	Problema Mecânico — Elastoplasticidade Clássica	33
4.1	Introdução	33
4.2	Elastoplasticidade Clássica — Formulação Infinitesimal	34
4.2.1	Modelo de Elastoplasticidade	34
4.2.1.1	CrITÉrio de Plasticidade	35
4.2.1.2	Lei de Encruamento	36
4.2.1.3	Lei de Plasticidade	36
4.2.1.4	Condições de Coerência e de Carga-Descarga	37
4.2.2	Módulo Elastoplástico Tangente	38
4.3	Problema Elastoplástico	39
4.3.1	Formulação Diferencial do Problema Elastoplástico	39
4.3.2	Formulação Integral Fraca do Problema Elastoplástico	40
4.3.3	Discretização Espacial por Elementos Finitos	41
4.3.4	Integração Implícita da Equação Discretizada	42
4.3.5	CrITÉrios de Convergência e de Paragem	44
4.4	Elastoplasticidade Clássica — Formulação Discreta	46

4.4.1	Integração Implícita da Lei de Comportamento Elastoplástico	47
4.4.1.1	Algoritmo de Retorno Radial	48
4.4.2	Módulo Elastoplástico Coerente	51
5	Homogeneização por Expansão Assimptótica em Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada	55
5.1	Introdução	55
5.2	Formulação Diferencial do Problema de Homogeneização	56
5.3	Homogeneização por Expansão Assimptótica do Problema Térmico	59
5.3.1	Expansão Assimptótica do Campo de Temperaturas	59
5.3.2	Equações Diferenciais da Microescala	61
5.3.3	Equações Diferenciais da Macroescala	62
5.3.4	Correctores de Temperatura de Ordem Superior	65
5.4	Homogeneização por Expansão Assimptótica do Problema Termoelástico	66
5.4.1	Expansão Assimptótica do Campo de Deslocamentos	66
5.4.2	Equações Diferenciais da Microescala	68
5.4.3	Equações Diferenciais da Macroescala	69
5.4.4	Correctores de Deslocamento de Ordem Superior	71
5.5	Metodologia Convencional de Homogeneização	74
5.6	Metodologia Convencional de Localização	74
5.7	Observações Finais	76
6	Computação Paralela	77
6.1	Introdução	77
6.2	Arquiteturas de Computação Paralela	77
6.2.1	Taxionomia de Flynn	78
6.2.2	Taxionomia de Duncan	80
6.2.2.1	Arquiteturas Síncronas	81
6.2.2.2	Arquiteturas Assíncronas	82
6.3	Redes de Interligação	83
6.3.1	Redes Estáticas	83
6.3.2	Redes Dinâmicas	85
6.3.3	Técnicas de Encaminhamento e de Comutação de Mensagens	88
6.4	Desempenho dos Computadores Paralelos	89
6.4.1	Latência de Comunicação	90
6.4.2	<i>Speed-up</i> e Eficiência	90
6.4.3	Lei de Amdahl	91
6.4.4	Desempenho Sobrelinear	93
6.4.5	Granularidade e Escalabilidade	93
6.4.6	Lei de Gustafson	94
6.5	Arquiteturas MIMD	96
6.5.1	Multiprocessadores	96
6.5.2	Multicomputadores	98
6.5.2.1	O <i>Cluster</i> Beowulf	99
6.6	Programação de Computadores MIMD	100
6.6.1	Paralelismo Explícito e Paralelismo Implícito	100
6.6.2	Modelos de Programação de Computadores MIMD	101
6.6.2.1	Paralelismo de Dados	101
6.6.2.2	Partilha de Memória	101
6.6.2.3	Passagem de Mensagens	102
6.6.3	Paradigmas de Programação de Computadores MIMD	102
6.6.3.1	Paradigma Mestre-Escravo	102

6.6.3.2	Paradigma SPMD	103
6.6.3.3	Modelos Híbridos	103
6.7	Interface de Passagem de Mensagens — MPI	104
6.7.1	Rotinas de Gestão	105
6.7.2	Rotinas de Comunicação	106
6.7.2.1	Comunicação Ponto-a-Ponto	106
6.7.2.2	Comunicação Colectiva	108
7	Resolução de Sistemas de Equações Lineares	113
7.1	Introdução	113
7.2	Métodos Iterativos Estacionários	115
7.2.1	Método de Jacobi	115
7.2.2	Método de Gauss-Seidel	116
7.2.3	Método da Sobre-relaxação Sucessiva	116
7.2.4	Método da Sobre-relaxação Sucessiva Simétrica	117
7.3	Métodos Iterativos Não-Estacionários	117
7.4	Método do Gradiente Conjugado	118
7.5	Técnicas de Precondicionamento	121
7.5.1	Precondicionador de Jacobi	122
7.5.2	Precondicionador SSOR	123
7.5.3	Factorizações Incompletas de Cholesky	123
7.6	Método do Gradiente Conjugado Precondicionado	126
8	O Programa COMMA3D	127
8.1	Introdução	127
8.2	Elementos Finitos Implementados	127
8.3	Pré- e Pós-Processamento	128
8.3.1	O Programa GiD	128
8.3.2	O Programa SPHERECELL	128
8.3.3	A Sub-Rotina SLAVERY	130
8.4	Esquema de Armazenamento Matricial	132
8.5	Aplicação de Condições de Fronteira	133
8.5.1	Condições de Fronteira de Periodicidade	133
8.5.2	Condições de Fronteira de Valor Prescrito	135
8.6	Resolução do Sistema de Equações Lineares	135
8.7	Homogeneização por Expansão Assimptótica	136
8.7.1	Cálculo dos Correctores Υ , χ e Ψ	137
8.7.2	Condições de Fronteira de Periodicidade	137
8.7.3	Cálculo Numérico de \mathbf{k}^h , \mathbf{D}^h e β^h	138
8.7.4	Processo de Localização	138
8.7.5	Processo de Homogeneização em Termoelasticidade Linear	139
III	Apresentação, Validação e Discussão de Resultados	143
9	Propriedades Termomecânicas Lineares de Materiais Compósitos	145
9.1	Determinação de Propriedades Mecânicas de Materiais Compósitos	146
9.1.1	Estudo da Aplicabilidade de Malhas Não-Estruturadas de Elementos Finitos	146
9.1.2	Propriedades Mecânicas de Materiais Compósitos de Fibras Contínuas	161
9.1.3	Propriedades Mecânicas de Materiais Compósitos de Partículas Esféricas	168
9.2	Determinação de Propriedades Termoelásticas de Materiais Compósitos	186
9.3	Determinação de Propriedades Térmicas de Materiais Compósitos	196

10 Modelação do Comportamento Termoelástico de Materiais Compósitos	203
11 Modelação de Comportamento Elastoplástico em Provetes Entalhados	209
11.1 Introdução	209
11.2 Determinação do Factor de Concentração de Tensões — Análise Elástica	210
11.3 Determinação de Deformações Locais — Análise Elastoplástica	213
11.4 Análise de Desempenho	218
12 Considerações Finais	227
12.1 Introdução	227
12.2 Conclusões	227
12.3 Perspectivas de Trabalho Futuro	235
A Notação, Nomenclatura, Siglas e Acrónimos	237
A.1 Problema Térmico — Condução de Calor em Regime Transitório	237
A.2 Problema Termomecânico — Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada	239
A.3 Problema Mecânico — Elastoplasticidade Clássica	240
A.4 Homogeneização por Expansão Assimptótica em Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada	242
A.5 Computação Paralela	245
A.6 Resolução de Sistemas de Equações Lineares	245
A.7 O Programa COMMA3D	246
A.8 Propriedades Termomecânicas Lineares de Materiais Compósitos	247
A.9 Modelação do Comportamento Termoelástico de Materiais Compósitos	250
A.10 Modelação de Comportamento Elastoplástico em Provetes Entalhados	250
A.11 Siglas e Acrónimos	251
B Rotinas de Comunicação Ponto-a-Ponto	253
B.1 Rotinas de Comunicação Ponto-a-Ponto Bloqueante	253
B.1.1 Rotinas Bloqueantes de Envio Síncrono e de Recepção	253
B.1.2 Rotinas Bloqueantes de Envio Pronto e de Recepção	255
B.1.3 Rotinas Bloqueantes de Envio Armazenado e de Recepção	255
B.1.4 Rotinas Bloqueantes de Envio Padrão e de Recepção	256
B.2 Rotinas de Comunicação Ponto-a-Ponto Não-Bloqueante	258
Bibliografia	261

Lista de Figuras

2.1	Representação esquemática das condições de fronteira associadas ao problema térmico num corpo sólido Ω	14
2.2	Representação unidimensional do processo de eliminação do resíduo no método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas térmicos em regime transitório não-linear.	21
2.3	Representação esquemática do processo iterativo do método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas térmicos em regime transitório não-linear ($\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ constante).	23
3.1	Representação esquemática das condições de fronteira associadas ao problema termoelástico num corpo sólido Ω	29
4.1	Representação esquemática das condições de fronteira associadas ao problema elastoplástico num corpo sólido Ω	40
4.2	Representação unidimensional do processo de eliminação do resíduo no método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas mecânicos em regime de elastoplasticidade quase-estática.	43
4.3	Representação esquemática do processo iterativo do método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas mecânicos em regime de elastoplasticidade quase-estática.	45
4.4	Representação esquemática, no plano desviador Π , do algoritmo de retorno radial associado ao modelo de elastoplasticidade clássica.	50
4.5	Interpretação geométrica, no espaço das tensões principais, do algoritmo de retorno radial associado ao modelo de elastoplasticidade clássica.	50
5.1	Representação esquemática do material termoelástico heterogéneo Ω e da célula unitária Y associada à microescala, utilizados no processo de homogeneização assintótica, de que resulta, com $\varepsilon \rightarrow 0$, o material homogéneo Ω^h	57
5.2	Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assintótica do campo de temperaturas, para um caso unidimensional — o campo de temperaturas, em Ω , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em Ω^h , com as flutuações de primeira ordem advindas da Y -periodicidade do campo da microescala, em Y	64
5.3	Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assintótica do campo de deslocamentos, para um caso unidimensional — o campo de deslocamentos, em Ω , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em Ω^h , com as flutuações de primeira ordem advindas da Y -periodicidade do campo da microescala, em Y	72
5.4	Ilustração esquemática dos fluxos de informação associados às técnicas de homogeneização e de localização, que ocorrem entre a macroescala Ω e a microescala Y	75

6.1	Representação esquemática de uma arquitectura SISD.	78
6.2	Representação esquemática de uma arquitectura SIMD.	79
6.3	Representação esquemática de uma arquitectura MISD.	79
6.4	Representação esquemática de uma arquitectura MIMD.	80
6.5	Representação esquemática de algumas topologias de rede estática: (a) em anel, (b) em anel cordal, (c) de malha totalmente ligada, (d) em estrela, (e) de malha bidimensional e (f) de hipercubo.	84
6.6	Representação esquemática dos barramentos (a) partilhado e (b) múltiplo.	86
6.7	Representação esquemática dos <i>cross switches</i> (a) unilateral e (b) bilateral.	87
6.8	(a) Estados fundamentais de um comutador 2×2 e (b) rede Ómega [Hlavička 1997].	87
6.9	Representação esquemática da constituição da latência de comunicação de uma mensagem.	90
6.10	Ilustração esquemática da relação entre os tempos de execução sequencial e paralela, para a lei de Amdhal.	92
6.11	Ilustração da variação do <i>speed-up</i> com o número de processadores para diferentes valores de fracção intrinsecamente sequencial.	92
6.12	Ilustração esquemática da relação entre os tempos de execução sequencial e paralela, para a lei de Gustafson.	95
6.13	Representação esquemática do modelo UMA de um multiprocessador.	97
6.14	Representação esquemática do modelo NUMA de um multiprocessador.	97
6.15	Representação esquemática do modelo COMA de um multiprocessador.	98
6.16	Representação esquemática do modelo geral de um multicomputador (NORMA).	98
6.17	Representação esquemática do paradigma mestre-escravo [Silva e Buyya 1999].	103
6.18	Representação esquemática do paradigma SPMD [Silva e Buyya 1999].	104
6.19	Representação esquemática da passagem de mensagem através de comandos de envio e de recepção.	107
6.20	Representação esquemática da rotina <code>MPI_BARRIER</code>	109
6.21	Representação esquemática das principais rotinas de movimentação de dados para um grupo de quatro processos.	110
6.22	Representação esquemática da rotina <code>MPI_REDUCE</code> de computação global.	111
6.23	Representação esquemática da rotina <code>MPI_ALLREDUCE</code> de computação global.	111
6.24	Representação esquemática da rotina <code>MPI_SCAN</code> de computação global.	112
7.1	Representação dos critérios genéricos de selecção dos principais métodos iterativos não-estacionários.	118
8.1	Elementos finitos implementados: (a) tetraedro linear, (b) hexaedro linear, (c) tetraedro quadrático e (d) hexaedro quadrático.	129
8.2	Esquema de geração de partículas complementares do programa SPHERECELL— (a) célula representativa unitária com três partículas esféricas, (b) geração de uma partícula nos vértices da célula representativa unitária, (c) geração de uma partícula nas faces/arestas da célula representativa unitária e (d) ilustração da periodicidade geométrica da célula representativa unitária.	131
8.3	Representação esquemática da periodicidade de uma célula representativa unitária bidimensional — (a) geometria inicial e (b) geometria deformada.	132
8.4	Representação esquemática do significado físico da aplicação de condições de fronteira de periodicidade com o método (a) de penalidade e (b) dos multiplicadores de Lagrange.	134
8.5	Sistema de eixos coordenados e limites das coordenadas de uma célula representativa unitária paralelepípedica definida em Y	138

9.1	Representação esquemática (a) do material compósito reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas, e (b) da célula representativa unitária considerada.	146
9.2	Evolução das componentes não-nulas de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para uma célula representativa unitária de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro modelada com elementos finitos tetraédricos quadráticos.	149
9.3	Evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para os vários estudos de convergência efectuados.	150
9.4	Evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos finitos, para os vários estudos de convergência efectuados.	151
9.5	Evolução da variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para os vários estudos de convergência efectuados.	151
9.6	Célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro (47% vol.) — (a) geometria e malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos (c) lineares e (e) quadráticos, e (b) geometria e malhas estruturadas de elementos finitos hexaédricos (d) lineares e (f) quadráticos.	152
9.7	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com os vários tipos de elementos finitos, para uma célula representativa unitária de material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de boro (47% vol.).	153
9.8	Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com os vários tipos de elementos finitos, para uma célula representativa unitária de material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de boro (47% vol.).	154
9.9	Deslocamentos característicos da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos tetraédricos lineares — modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} e (c) χ_{33} , e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} e (f) χ_{13} , e para elementos finitos tetraédricos quadráticos — modos normais (g) χ_{11} , (h) χ_{22} e (i) χ_{33} , e modos de corte (j) χ_{12} , (k) χ_{23} e (l) χ_{13} .	156
9.10	Deslocamentos característicos da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos hexaédricos lineares — modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} e (c) χ_{33} , e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} e (f) χ_{13} , e para elementos finitos hexaédricos quadráticos — modos normais (g) χ_{11} , (h) χ_{22} e (i) χ_{33} , e modos de corte (j) χ_{12} , (k) χ_{23} e (l) χ_{13} .	157
9.11	Vectores das sollicitações mecânicas características da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos tetraédricos lineares — modos normais (a) \mathbf{F}_{11}^D , (b) \mathbf{F}_{22}^D e (c) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (d) \mathbf{F}_{12}^D , (e) \mathbf{F}_{23}^D e (f) \mathbf{F}_{13}^D , e para elementos finitos tetraédricos quadráticos — modos normais (g) \mathbf{F}_{11}^D , (h) \mathbf{F}_{22}^D e (i) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (j) \mathbf{F}_{12}^D , (k) \mathbf{F}_{23}^D e (l) \mathbf{F}_{13}^D .	158
9.12	Vectores das sollicitações mecânicas características da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos hexaédricos lineares — modos normais (a) \mathbf{F}_{11}^D , (b) \mathbf{F}_{22}^D e (c) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (d) \mathbf{F}_{12}^D , (e) \mathbf{F}_{23}^D e (f) \mathbf{F}_{13}^D , e para elementos finitos hexaédricos quadráticos — modos normais (g) \mathbf{F}_{11}^D , (h) \mathbf{F}_{22}^D e (i) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (j) \mathbf{F}_{12}^D , (k) \mathbf{F}_{23}^D e (l) \mathbf{F}_{13}^D .	159
9.13	Y-periodicidade dos deslocamentos característicos — ilustração do modo de corte χ_{12} utilizando 8 células representativas unitárias com malhas de elementos finitos tetraédricos (a) lineares e (b) quadráticos, e de elementos finitos hexaédricos (c) lineares e (d) quadráticos.	160

9.14	Células representativas unitárias do material compósito de matriz de resina epóxida reforçado com fibras contínuas de vidro — geometrias para fracções volúmicas de (a) 10%, (c) 20% (e) 30% (g) 40% (i) 50%, (k) 60%, (m) 70% e (o) 75% de reforço, e malhas de elementos finitos tetraédricos lineares para fracções volúmicas de (b) 10%, (d) 20% (f) 30% (h) 40% (j) 50%, (l) 60%, (n) 70% e (p) 75% de reforço. . .	162
9.15	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h de células representativas unitárias de matriz de resina epóxida, para diferentes fracções volúmicas de reforço de fibras contínuas de vidro.	163
9.16	Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h de células representativas unitárias de matriz de resina epóxida, para diferentes fracções volúmicas de reforço de fibras contínuas de vidro.	163
9.17	Variação do módulo de elasticidade longitudinal na direcção das fibras, E_{11} , com a fracção volúmica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias com matriz de resina epóxida.	165
9.18	Variação do módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras, E_{22} , com a fracção volúmica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias com matriz de resina epóxida.	166
9.19	Variação do módulo G_{12} de corte (elasticidade transversal) com a fracção volúmica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias com matriz de resina epóxida.	167
9.20	Variação do coeficiente ν_{12} de Poisson com a fracção volúmica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias de resina epóxida.	167
9.21	Geometrias das células representativas unitárias geradas com distribuições aleatórias de partículas esféricas, para fracções volúmicas de reforço de (a) 10%, (b) 20%, (c) 30%, (d) 40% e (e) 50%.	169
9.22	Evolução das componentes significativas de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício definido pela primeira célula representativa unitária apresentada na figura 9.21a.	170
9.23	Evolução da norma de \mathbf{D}^h e da variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício definido pela primeira célula representativa unitária apresentada na figura 9.21a.	171
9.24	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com elementos finitos tetraédricos lineares, para cinco células representativas unitárias de material compósito de alumínio com (a) 10% e (b) 20% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.	172
9.25	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com elementos finitos tetraédricos lineares, para cinco células representativas unitárias de material compósito de alumínio com (a) 30% e (b) 40% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.	173
9.26	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com elementos finitos tetraédricos lineares, para cinco células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.	174
9.27	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas às diversas células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.	175
9.28	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h médias, para células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.	176

9.29	Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h médias, para células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício. . . .	176
9.30	Representação esquemática de células representativas unitárias associadas aos modelos micromecânicos (a) de Voigt-Reuss, (b) de Hashin-Shtrikman e (c) de Ravichandran.	177
9.31	Variação do módulo de elasticidade longitudinal com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de alumínio. 180	
9.32	Resultados experimentais e de previsão analítica do módulo de elasticidade longitudinal, em conjunto com os limites superiores e inferiores de Voigt-Reuss, de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran, para um material compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.	181
9.33	Variação do coeficiente de Poisson com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de matriz de alumínio. 182	
9.34	Geometrias de células representativas unitárias geradas com distribuições aleatórias de partículas, para uma fracção volúmica de reforço de 30%, com (i) uma, (ii) duas, (iii) três, (iv) quatro, (v) cinco, (vi) seis, (vii) sete e (viii) oito partículas esféricas (PE). 183	
9.35	Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h , para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).	184
9.36	Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h , para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).	184
9.37	Resultados numéricos e de previsão analítica do módulo de elasticidade longitudinal em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).	185
9.38	Resultados numéricos e de previsão analítica do coeficiente de Poisson em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).	186
9.39	Deslocamentos característicos da célula representativa unitária de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (fracção volúmica de 30%) — modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} e (c) χ_{33} , e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} e (f) χ_{13}	187
9.40	Vectores das solitações mecânicas características da célula representativa unitária de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (fracção volúmica de 30%) — modos normais (a) \mathbf{F}_{11}^D , (b) \mathbf{F}_{22}^D e (c) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (d) \mathbf{F}_{12}^D , (e) \mathbf{F}_{23}^D e (f) \mathbf{F}_{13}^D	188
9.41	Y-periodicidade dos deslocamentos característicos — ilustração do modo normal χ_{33} , utilizando 8 células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (fracção volúmica de 30%).	189
9.42	Componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para células representativas unitárias de material compósito de cobre com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de diamante.	190
9.43	Perspectiva frontal das componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para células representativas unitárias de material compósito de cobre com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de diamante.	190
9.44	Variação do coeficiente de dilatação térmica com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de diamante, para um material compósito de matriz de cobre.	192

9.45	Componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.).	193
9.46	Perspectiva frontal das componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.).	193
9.47	Resultados numéricos e de previsão analítica do coeficiente de expansibilidade térmica em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.).	194
9.48	Campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva Ψ de uma célula representativa unitária de material compósito de cobre com 3 partículas esféricas de diamante (fracção volúmica de 30%) — representação (a) da configuração deformada da célula representativa unitária e (b) do campo vectorial —, e vectores das solicitações termoelastocaracterísticas F^β para (c) o material da matriz e (b) o material do reforço.	195
9.49	Ilustração da Y-periodicidade do campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva Ψ , utilizando 8 células representativas unitárias de material compósito de cobre com 3 partículas esféricas de diamante (fracção volúmica de 30%).	196
9.50	Componentes das matrizes de condutividade térmica k^h , para células representativas unitárias de material compósito de vidro de borossilicato com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de alumina.	197
9.51	Perspectiva frontal das componentes das matrizes de condutividade térmica k^h , para células representativas unitárias de material compósito de vidro de borossilicato com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de alumina.	198
9.52	Variação do coeficiente de condutividade térmica com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de alumina, para um material compósito de matriz de vidro de borossilicato.	199
9.53	Componentes das matrizes de condutividade térmica k^h , para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.).	200
9.54	Perspectiva frontal das componentes das matrizes de condutividade térmica k^h , para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.).	201
9.55	Resultados numéricos e de previsão analítica do coeficiente de condutividade térmica em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.).	201
9.56	Ilustração (a) do campo de deslocamentos termocaracterísticos Υ e (b) do campo de solicitações termocaracterísticas F^k da célula representativa unitária associada ao material compósito de vidro de borossilicato com 3 partículas esféricas de alumina (fracção volúmica de 30%).	202
9.57	Ilustração da Y-periodicidade do campo de deslocamentos termocaracterísticos Υ , utilizando 8 células representativas unitárias de material compósito de vidro de borossilicato com 3 partículas esféricas de alumina (fracção volúmica de 30%).	202
10.1	Malha estruturada de elementos finitos hexaédricos quadráticos obtida através de um estudo de convergência, para o problema de termoelasticidade.	204
10.2	Valores máximos de deslocamento radial d_{rr} , de fluxo superficial de calor por condução na direcção radial q_{rr} e de tensão equivalente de von Mises $\bar{\sigma}$ em função da fracção volúmica de reforço.	205

10.3	Representação esquemática do processo de localização de fluxos superficiais de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras de carboneto de silício.	206
10.4	Representação esquemática do processo de localização de fluxos superficiais de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.	206
10.5	Representação esquemática dos campos vectoriais de fluxo superficial de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras de carboneto de silício.	207
10.6	Representação esquemática dos campos vectoriais de fluxo superficial de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.	207
10.7	Representação esquemática do processo de localização da tensão equivalente, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras de carboneto de silício.	208
10.8	Representação esquemática do processo de localização da tensão equivalente, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.	208
11.1	Representação esquemática bidimensional da geometria e das condições de fronteira na modelação numérica do provete entalhado.	211
11.2	Evolução do factor de concentração de tensões com o número de graus de liberdade, para os esquemas de integração completa e de integração reduzida selectiva.	211
11.3	Evolução da variação relativa do factor de concentração de tensões com o número de graus de liberdade, para os esquemas de integração completa e de integração reduzida selectiva.	212
11.4	Malha de elementos finitos obtida através do estudo de convergência e detalhe da zona da raiz do entalhe.	212
11.5	Representação esquemática da interpretação gráfica da aplicação dos métodos de Neuber e da densidade de energia da deformação equivalente ao cálculo das tensões e deformações locais no regime de deformação plástica localizada, para um carregamento monótono de tracção.	215
11.6	Representação esquemática do estado de tensão na zona da raiz de um entalhe, para o carregamento monótono de tracção de um provete entalhado.	216
11.7	Resultados de previsão numérica e de previsão analítica, e resultados experimentais da deformação local ϵ , para diferentes níveis de tensão nominal S	217
11.8	Evolução dos resíduos relativos, R_r , no processo iterativo de resolução do sistema de equações lineares, sem preconditionamento e com os preconditionadores implementados.	219
11.9	Pormenor da evolução dos resíduos relativos, R_r , no processo iterativo de resolução do sistema de equações lineares, sem preconditionamento e com os preconditionadores implementados.	219
11.10	Representação de um <i>cluster</i> do tipo Beowulf, constituído por 1 nó mestre e 8 nós escravos.	220
11.11	Evolução do <i>speed-up</i> com o número de processadores, para os vários preconditionadores.	221
11.12	Evolução, com o número de processadores, da fracção temporal de processamento das tarefas de leitura e iniciação (LI), construção e montagem da rigidez do sistema (CAR) e resolução do sistema (RS), para o preconditionador JAC.	221
11.13	Evolução, com o número de processadores, da fracção temporal de processamento das tarefas de leitura e iniciação (LI), construção e montagem da rigidez do sistema (CAR) e resolução do sistema (RS), para o preconditionador SSOR.	222

11.14	Evolução, com o número de processadores, da fracção temporal de processamento das tarefas de leitura e iniciação (LI), construção e montagem da rigidez do sistema (CAR) e resolução do sistema (RS), para o preconditionador IC(0).	222
11.15	Representação das partições de domínio obtida com o programa Metis, para (a) 1 e (b) 2 processadores.	223
11.16	Representação das partições de domínio obtida com o programa Metis, para (a) 3, (b) 4, (c) 5 e (d) 6 processadores.	224
11.17	Representação das partições de domínio obtida com o programa Metis, para (a) 7 e (b) 8 processadores.	225
11.18	Evolução da eficiência com o número de processadores, para os vários tipos de preconditionador.	225
11.19	Evolução, com o número de processadores, do tempo total despendido na resolução do problema elastoplástico, para os vários tipos de preconditionador.	226
B.1	Representação esquemática de envio síncrono e recepção bloqueantes de mensagem.	254
B.2	Representação esquemática de envio pronto e recepção bloqueantes de mensagem.	255
B.3	Representação esquemática de envio armazenado e recepção bloqueantes de mensagem.	256
B.4	Representação esquemática de envio padrão e recepção bloqueantes de mensagem (dimensão não-superior ao valor-limiar).	257
B.5	Representação esquemática de envio padrão e recepção bloqueantes de mensagem (dimensão superior ao valor-limiar).	257
B.6	Representação esquemática de envio padrão e recepção não-bloqueantes de mensagem (dimensão não-superior ao valor-limiar).	259
B.7	Representação esquemática de envio padrão e recepção não-bloqueantes de mensagem (dimensão superior ao valor-limiar).	260

Lista de Tabelas

2.1	Métodos de integração temporal e valores de Λ correspondentes.	19
2.2	Algoritmo de Newton-Raphson para resolução implícita de problemas térmicos em regime transitório não-linear.	23
4.1	Algoritmo de Newton-Raphson para resolução implícita de problemas mecânicos em regime de elastoplasticidade quase-estática.	45
4.2	Algoritmo de integração implícita da lei de comportamento elastoplástico — algoritmo de retorno radial — para o problema de elastoplasticidade quase-estática. . .	52
6.1	Propriedades topológicas de redes de comunicação estáticas.	83
7.1	Algoritmo do método do gradiente conjugado.	120
7.2	Algoritmo da factorização \mathbf{CC}^T incompleta de Cholesky.	124
7.3	Algoritmo da factorização \mathbf{LDL}^T incompleta de Cholesky.	125
7.4	Algoritmo do método do gradiente conjugado preconditionado.	126
8.1	Algoritmo geral de cálculo térmico linear.	139
8.2	Algoritmo geral de cálculo termoelástico linear — módulo TE.	140
8.3	Algoritmo simplificado do procedimento de homogeneização por expansão assimp-tótica — módulo HEA.	141
9.1	Propriedades mecânicas elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro.	147
9.2	Características numéricas das malhas de elementos finitos utilizadas no estudo de convergência, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro.	148
9.3	Resultados obtidos por previsão numérica, por previsão analítica e de modo experi-mental, para as propriedades elásticas do material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de boro (47% vol.).	154
9.4	Propriedades elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de resina epóxida reforçado com fibras contínuas de vidro. . .	161
9.5	Características numéricas das malhas de elementos finitos utilizadas no estudo de convergência, para o material compósito de matriz de resina epóxida reforçado com fibras contínuas de vidro.	161
9.6	Propriedades mecânicas elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.	168
9.7	Propriedades termomecânicas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de cobre reforçado com partículas esféricas de diamante.	186

9.8	Propriedades termomecânicas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com partículas esféricas de alumina.	196
9.9	Composição química do vidro de borossilicato (% em massa).	197
10.1	Propriedades termomecânicas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de alumínio.	204
11.1	Resultados experimentais da curva tensão-deformação obtida a partir de provetes não-entalhados da liga de alumínio AlMgSi1.	217
11.2	Propriedades mecânicas da liga de alumínio AlMgSi1.	217
11.3	Indicadores de desempenho do algoritmo de resolução do sistema de equações lineares com e sem condicionamento.	218

Parte I

Enquadramento

Capítulo 1

Introdução

Procede-se à introdução do presente trabalho dando ênfase a alguns aspectos que justificam a sua realização e procede-se a uma descrição sucinta quer do seu conteúdo quer da sua estruturação.

Apresentam-se os objectivos do trabalho, justificando-os face aos desenvolvimentos nas áreas quer da modelação do comportamento termomecânico de materiais compósitos quer do desenvolvimento e da implementação de metodologias de optimização do desempenho numérico de programas de elementos finitos. Por fim, tecem-se algumas considerações relativas à terminologia adoptada.

1.1 Enquadramento

Actualmente, muitos dos materiais aplicados em engenharia são multifásicos, nos quais se incluem os materiais compósitos. Estes são constituídos por dois ou mais materiais que diferem quer em forma quer em composição química. Ao contrário do que se verifica quando um material homogéneo não-restringido mecanicamente¹ é sujeito a uma variação de temperatura — o material deforma-se, mas os níveis de tensão mantêm-se nulos —, no caso de o material ser multifásico, a heterogeneidade existente ao nível microestrutural leva ao aparecimento de tensões de origem térmica, que advêm da diferença entre os coeficientes de expansibilidade térmica das suas fases constituintes. Em situações de carregamento termomecânico, a combinação das tensões de origem térmica com as tensões de origem mecânica pode levar a fenómenos de cedência ou de ruptura do material. Neste contexto, atendendo a que vários componentes estruturais constituídos por materiais compósitos são sujeitos a carregamentos termomecânicos consideráveis não só durante o seu fabrico/processamento mas também ao longo da sua vida útil, é crucial conhecerem-se as propriedades termomecânicas efectivas destes materiais, para que se possa proceder correctamente à avaliação do comportamento termomecânico dos referidos componentes estruturais.

A determinação das propriedades termomecânicas efectivas de materiais compósitos é geralmente efectuada recorrendo quer a modelos analíticos quer a simulação numérica. Com base em modelos analíticos, é possível não só obter valores efectivos das propriedades termomecânicas de materiais compósitos (*e.g.* [Maxwell 1873, Rayleigh 1892, Landauer 1952, Kerner 1956, Shapery 1968,

¹À excepção do movimento de corpo rígido.

Ashton *et al.* 1969, Fahmy e Ragai 1970]) mas também determinar minorantes e majorantes desses valores efectivos (*e.g.* [Voigt 1889, Rayleigh 1892, Reuss 1929, Hashin e Shtrikman 1963, Hill 1963, Ravichandran 1994]). Os modelos analíticos podem ser utilizados para materiais compósitos associados a microestruturas com geometrias simples, usualmente formadas por inclusões esféricas ou cilíndricas. No entanto, o carácter restritivo dos fundamentos físicos subjacentes às metodologias analíticas pode levar a uma degradação da qualidade das previsões obtidas para materiais compósitos com microestruturas com geometrias complexas. Neste contexto, a simulação numérica, em particular a modelação por elementos finitos, desempenha um papel de importância crucial na análise do comportamento termomecânico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos com microestruturas complexas. No entanto, a sua utilização leva geralmente à necessidade de se recorrer não só a malhas não-estruturadas de elementos finitos mas também a um elevado número de elementos finitos para a definição dos detalhes microestruturais. Em geral, este facto impossibilita, mesmo no contexto da termoelasticidade linear, a modelação numérica do comportamento termomecânico deste tipo de componentes estruturais, visto ser necessário utilizar uma grande quantidade de memória computacional e despende tempos de computação excessivamente longos. Neste contexto, o recurso a metodologias de homogeneização pode resultar em benefícios computacionais significativos. Estas técnicas permitem a substituição de um meio heterogéneo por um meio homogéneo equivalente, possibilitando, deste modo, a obtenção de leis de comportamento macroestruturais a partir de informação relativa ao nível microestrutural.

O conceito da homogeneização de propriedades físicas remonta ao século XIX [Poisson 1824, Maxwell 1873, Rayleigh 1892]. No entanto, os primeiros trabalhos referentes à teoria matemática da homogeneização datam do final dos anos 60 do século XX [Spanolo 1968, Sanchez-Palencia 1970, De Giorgi e Spagnolo 1973]. Desde então diversas técnicas de homogeneização têm vindo a surgir, das quais se destaca a homogeneização por expansão assintótica [Bensoussan *et al.* 1978, Sanchez-Palencia 1980, Lions 1981, Bakhvalov e Panasenko 1989, Oleĭnik *et al.* 1992]. A homogeneização por expansão assintótica consiste numa técnica expedita de abordagem a problemas de modelação de fenómenos físicos em meios com estrutura periódica, em particular do comportamento termomecânico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos. Além de permitir a obtenção de valores médios (homogeneizados) para as propriedades termomecânicas de um determinado material compósito, a homogeneização por expansão assintótica consiste na estratégia mais versátil para proceder à separação da macro- e da microescala em análises baseadas na utilização de células representativas unitárias. De facto, em vez de se resolver unicamente o problema de uma célula representativa unitária (microescala), procede-se à introdução explícita de coordenadas macroscópicas e microscópicas na formulação do problema, permitindo a utilização do método dos elementos finitos na micro- e na macroescala, numa técnica denominada homogeneização por expansão assintótica em duas escalas. Esta técnica tem vindo a ser utilizada no cálculo do comportamento macroestrutural de materiais multifásicos em diversos domínios, tais como, por exemplo, a biomecânica [Hollister *et al.* 1991, Hollister *et al.* 1994], a elasticidade [Guedes e Kikuchi 1990, Meguid e Kalamkarov 1994, Chung *et al.* 2001], o escoamento em meios porosos [Amaziane *et al.* 1991, Dimitrienko 1998a, Dimitrienko 1998b], a geomecânica [Kawamoto e Kyoya 1993], a magnetoelasticidade [Bytner e Gambin 1993], as misturas sólido-fluido [Terada *et al.* 1998], a nanotecnologia [Song e Youn 2006, Kalamkarov *et al.* 2006], a optimização topológica em estruturas [Bendsøe e Kikuchi 1988], a piezoelectricidade [Pastor 1997, Castillero *et al.* 1997, Castillero *et al.* 1998], a plasticidade [Suquet 1987, Guedes e Kikuchi 1990], a supercondução [Berlyand 1998], a termoelasticidade [Francfort 1983, Gałka *et al.* 1994], a termopiezoelectricidade [Gałka *et al.* 1996], a termoelastoplasticidade [Cheng 1992], a viscoelasticidade [Koishi *et al.* 1997, Yi *et al.* 1998], *etc.* A homogeneização por expansão assintótica pode ainda ser aplicada, como um processo iterativo, a problemas com três ou mais escalas distintas [Bensoussan *et al.* 1978]. Nesta situação, a sua aplicação sucessiva a duas escalas resulta no denominado método multiescala generalizado de homogeneização por expansão assintótica.

A metodologia de homogeneização por expansão assintótica assenta em dois princípios fundamentais: (i) os deslocamentos (ou outra variável primária, tal como, por exemplo, a temperatura

ou a velocidade de escoamento) podem ser caracterizados por uma série assintótica e (ii) as características da microestrutura são definidas na célula unitária, representativa da periodicidade na microescala. Por outro lado, as principais vantagens desta metodologia consistem no facto de (i) conduzir a uma redução bastante significativa do número de graus de liberdade associados à modelação numérica por elementos finitos e (ii) permitir a caracterização dos campos microestruturais. Na realidade, ao contrário dos restantes métodos de homogeneização, esta técnica permite, em particular no que se refere à termoelasticidade, a obtenção de equações explícitas que possibilitam a determinação dos níveis microestruturais de fluxo superficial de calor por condução, de tensão e de deformação. Este processo é designado por localização e, em termos genéricos, corresponde ao processo inverso da homogeneização. Por fim, refira-se que em análises que envolvem materiais compósitos com microestrutura não-periódica são utilizadas diferentes técnicas de homogeneização, tais como, por exemplo, a convergência-G [Spanolo 1968] — para problemas simétricos e não-periódicos —, a convergência-H [Murat e Tartar 1997] — para problemas não-simétricos e não-periódicos — e a convergência- Γ [Dal Maso 1993] — para problemas que admitem uma caracterização variacional. No entanto, estas técnicas não permitem a obtenção de valores homogeneizados para as propriedades termomecânicas de um determinado material compósito, possibilitando apenas que se estimem limites superiores e limites inferiores para os valores homogeneizados das propriedades efectivas.

A aplicação do método dos elementos finitos dá origem a sistemas de equações lineares, cuja resolução influencia peremptoriamente o desempenho computacional da simulação numérica. Em geral, a resolução de sistemas de equações lineares de dimensão considerável requer a utilização de técnicas de computação paralela. Por outro lado, a crescente necessidade de elevada capacidade de processamento em diversas áreas científicas tem levado a que se tenham vindo a constituir sistemas computacionais poderosos e economicamente viáveis, denominados *clusters* Beowulf. Para este facto contribuíram, de modo decisivo, a evolução do desempenho dos processadores, a diminuição do custo quer das tecnologias de rede quer dos próprios processadores e o acesso gratuito a sistemas operativos, tais como, por exemplo, o Linux [Torvalds e Diamond 2001].

Em termos genéricos, o *cluster* Beowulf consiste num aglomerado de computadores convencionais que se encontram interligados por uma rede local de alta velocidade e que permitem o acesso seguro a recursos computacionais de alto desempenho. De entre as suas inúmeras vantagens destacam-se a sua elevada capacidade de processamento, o baixo custo e o elevado grau de tolerância a falhas. Neste contexto, o desenvolvimento e a implementação de metodologias conducentes à paralelização de um programa de simulação numérica por elementos finitos deverão permitir colmatar de um modo não-dispendioso, através da utilização de um *cluster* Beowulf, as elevadas exigências computacionais associadas à modelação quer do comportamento termomecânico de materiais compósitos quer do comportamento elastoplástico de materiais homogéneos.

1.2 Objectivos

Atendendo às considerações genéricas tecidas na secção anterior, o principal objectivo do presente trabalho consiste no desenvolvimento de um programa de cálculo numérico por elementos finitos que sirva de base a uma plataforma que permita a modelação numérica do comportamento termomecânico de materiais compósitos. Neste contexto, este trabalho consiste numa fase inicial de desenvolvimento e de implementação de algumas técnicas numéricas e de alguns modelos de comportamento. Assim, o presente trabalho visa:

- 1) O desenvolvimento de um módulo de cálculo numérico por elementos finitos que permita a simulação do comportamento termomecânico (linear) de materiais compósitos e, com base neste módulo, proceder:
 - i) À caracterização das propriedades termomecânicas de materiais compósitos, partindo das suas particularidades e topologias microestruturais;

- ii) À determinação da influência de factores, tais como, por exemplo, as propriedades termomecânicas e a distribuição dos materiais constituintes, nas propriedades efectivas de materiais compósitos;
 - iii) À aplicação de modelos de homogeneização de natureza quer numérica quer analítica para caracterizar as propriedades termomecânicas de materiais compósitos;
 - iv) À validação dos resultados numéricos de homogeneização com base em resultados de natureza quer analítica quer experimental;
 - v) Ao desenvolvimento de metodologias numéricas que permitam otimizar o processo numérico de aplicação de condições de fronteira de periodicidade a modelos de célula representativa unitária;
- 2) A implementação de modelos de comportamento que permitam a simulação numérica de processos não-lineares não só de condução transitória de calor mas também de elastoplasti-
cidade;
- 3) O desenvolvimento, a implementação e a validação de metodologias numéricas que permi-
tam a optimização do desempenho do programa de cálculo numérico por elementos finitos,
nomeadamente a sua paralelização.

Assim, no presente trabalho pretende-se desenvolver uma plataforma numérica totalmente paraleli-
zada que permita não só a modelação do comportamento termoelástico de componentes estruturais
constituídos por materiais compósitos utilizando procedimentos de homogeneização por expansão
assimptótica mas também a modelação quer do comportamento térmico em regime transitório não-
linear de materiais compósitos quer do comportamento elastoplástico de materiais homogéneos.
Em última instância, esta plataforma deverá servir de base a uma plataforma mais completa, que
permita a modelação numérica do comportamento termomecânico não-linear de materiais compó-
sitos utilizando procedimentos de homogeneização (*cf.* citação inicial).

1.3 Guia de Leitura

A presente dissertação encontra-se organizada em três partes distintas. A primeira e presente parte,
intitulada **Enquadramento**, é constituída por um único capítulo em que se referem os principais
aspectos que justificam o trabalho desenvolvido e se descreve não só o seu conteúdo mas também
a sua estrutura.

Capítulo 1 — Procede-se à introdução do presente trabalho dando ênfase a alguns aspectos que
justificam a sua realização e procede-se a uma descrição sucinta quer do seu conteúdo quer
da sua estruturação. Apresentam-se os objectivos do trabalho, justificando-os face aos de-
senvolvimentos nas áreas quer da modelação do comportamento termomecânico de materiais
compósitos quer do desenvolvimento e da implementação de metodologias de optimização
do desempenho numérico de programas de elementos finitos. Por fim, tecem-se algumas
considerações relativas à terminologia adoptada.

A segunda parte deste trabalho, intitulada **Modelação Matemática e Formulação Numérica**,
é constituída por sete capítulos relacionados não só com os modelos matemáticos considerados mas
também com os formalismos das suas implementações numéricas. São ainda descritos os principais
aspectos relacionados não só com a computação paralela mas também com os métodos de resolução
numérica de sistemas esparsos de equações lineares. Apresenta-se, ainda, a descrição do programa
de simulação desenvolvido.

Capítulo 2 — Apresenta-se a equação geral da condução de calor em meios sólidos na forma dife-
rencial. Com base no princípio das temperaturas virtuais e no método dos resíduos pesados
procede-se à semidiscretização espacial e à integração temporal da equação geral da condução

de calor, respectivamente. Posteriormente, tecem-se algumas considerações acerca dos diversos esquemas de integração numérica. Discutem-se as especificidades associadas ao regime transitório e apresenta-se o algoritmo de integração implícita associado ao regime transitório não-linear. Referem-se, de modo sucinto, as especificidades associadas aos regimes estacionários linear e não-linear. Por fim, apresentam-se os critérios de convergência considerados no processo iterativo.

Capítulo 3 — Tecem-se algumas considerações gerais acerca do problema geral de termoelasticidade linear, que combina a teoria da elasticidade linear com a condução de calor para situações de regime transitório. Refere-se a sua relação com os problemas de termoelasticidade desacoplada e de termoelasticidade quase-estática desacoplada. Apresenta-se a equação diferencial do problema quase-estático de elasticidade linear associado ao problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada (linear). Com base no princípio dos deslocamentos virtuais, obtém-se a formulação integral fraca deste problema, procedendo-se à sua discretização espacial por elementos finitos.

Capítulo 4 — Aborda-se o problema de elastoplasticidade quase-estática assumindo pequenas transformações. Inicialmente, apresenta-se a formulação infinitesimal do modelo de elastoplasticidade considerado. Em seguida, apresenta-se a formulação do problema de elastoplasticidade quase-estática. Com base no princípio dos deslocamentos virtuais, obtém-se a sua formulação integral fraca, procedendo-se, posteriormente, à sua discretização espacial por elementos finitos. Discutem-se as especificidades associadas quer à integração implícita da equação de equilíbrio discretizada pelo método iterativo de Newton-Raphson quer aos critérios de convergência e de paragem utilizados. Por fim, apresenta-se o algoritmo adoptado para a integração implícita da lei de comportamento elastoplástico e procede-se à formulação do módulo elastoplástico coerente associado ao modelo de elastoplasticidade considerado.

Capítulo 5 — Abordam-se os principais aspectos relativos à aplicação da técnica da homogeneização assintótica ao problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada em regime linear. Tecem-se algumas considerações acerca da natureza dos termos de ordem superior associados à expansão assintótica dos campos de temperaturas e de deslocamentos. Por fim, referem-se algumas considerações sobre o processo de localização em termoelasticidade quase-estática desacoplada.

Capítulo 6 — Apresentam-se e discutem-se, de modo sucinto, os principais aspectos relacionados com a computação paralela. Abordam-se as principais arquitecturas de computação paralela, as redes de interligação utilizadas, o desempenho dos computadores paralelos, a programação de computadores paralelos e a interface de passagem de mensagens MPI.

Capítulo 7 — Referem-se, de um modo sucinto, os principais métodos de resolução numérica de sistemas esparsos de equações lineares associados à computação científica, nomeadamente à análise numérica por elementos finitos. Tecem-se algumas considerações gerais acerca dos métodos directos e dos métodos iterativos. Apresentam-se alguns métodos iterativos estacionários e métodos iterativos não-estacionários. Posteriormente, tecem-se algumas considerações acerca do método do gradiente conjugado e de algumas técnicas de condicionamento. Por fim, apresenta-se o método do gradiente conjugado condicionado.

Capítulo 8 — Referem-se algumas das principais características do programa desenvolvido no decurso deste trabalho. Apresentam-se os tipos de elemento finito implementados. Descrevem-se sumariamente a interface gráfica de modelação geométrica utilizada e as ferramentas que permitem proceder quer à geração de células representativas unitárias quer à atribuição de condições de fronteira de periodicidade. Abordam-se algumas das questões relacionadas com o esquema de armazenamento matricial utilizado e com a aplicação de condições de fronteira de periodicidade e de valor prescrito. São referidos alguns aspectos relativos à resolução

do sistema de equações lineares. Por fim, abordam-se questões relativas à implementação numérica do método de homogeneização por expansão assintótica e apresenta-se o algoritmo global de cálculo numérico em termoelasticidade linear, considerando o procedimento de homogeneização por expansão assintótica.

A última parte, designada por **Apresentação, Validação e Discussão de Resultados**, é constituída pelos últimos quatro capítulos. Nestes, descrevem-se os modelos geométricos adoptados para a realização dos ensaios numéricos, bem como os modelos de previsão analítica utilizados. Apresentam-se, ainda, alguns resultados numéricos obtidos com o programa de simulação desenvolvido e procede-se, sempre que possível, à sua validação com base na comparação com resultados de previsão analítica e resultados experimentais.

Capítulo 9 — Aplicam-se o método numérico de homogeneização por expansão assintótica e alguns métodos analíticos na determinação de propriedades efectivas mecânicas e térmicas de materiais compósitos, quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas. Estes resultados são comparados com resultados de previsão de natureza numérica e de natureza analítica, e com resultados experimentais. Abordam-se, ainda, alguns aspectos relativos à modelação numérica do comportamento termoelástico de materiais compósitos com base na técnica de homogeneização por expansão assintótica.

Capítulo 10 — Com base no método de homogeneização por expansão assintótica, modela-se numericamente o comportamento termoelástico de um cilindro oco de comprimento infinito, considerando a prescrição de temperaturas nas suas superfícies interna e externa. Analisa-se o efeito da fracção volúmica de reforço, quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas, nos valores máximos dos campos de deslocamento radial, de fluxo superficial de calor por condução na direcção radial e de tensão equivalente de von Mises. Com base no procedimento de localização, procede-se à determinação dos campos microestruturais de fluxo superficial de calor por condução e de tensão equivalente.

Capítulo 11 — Com base em análises elásticas por elementos finitos, determina-se o factor de concentração de tensões de um provete com entalhe circular, utilizando hexaedros lineares e recorrendo quer à integração completa quer à integração reduzida selectiva **B**. Os resultados numéricos são comparados com um valor de previsão analítica. Obtêm-se valores de deformação elastoplástica para vários carregamentos nominais de tracção, através não só da modelação numérica não-linear por elementos finitos mas também de resultados analíticos obtidos recorrendo à regra de Neuber e ao método da densidade de energia da deformação equivalente. Por fim, o desempenho computacional de simulações numéricas é avaliado utilizando um *cluster* Beowulf. Analisam-se, para os diferentes tipos de condicionamento utilizados no método do gradiente conjugado, não só as evoluções do *speed-up* e da eficiência associados ao processo de cálculo paralelo mas também alguns aspectos relacionados com a evolução dos resíduos numéricos.

Capítulo 12 — Descrevem-se, de um modo detalhado, as principais conclusões deste trabalho. Apresentam-se, ainda, algumas perspectivas de desenvolvimento futuro do trabalho realizado.

Por fim, incluem-se dois apêndices, com os quais se complementam as restantes secções da presente dissertação.

Apêndice A — Descrevem-se a notação, a nomenclatura, as siglas e os acrónimos utilizados no presente trabalho. As definições da simbologia encontram-se agrupadas de acordo com os vários capítulos do presente trabalho, sendo ainda apresentado separadamente um conjunto de siglas e acrónimos.

Apêndice B — Analisam-se detalhadamente os principais aspectos relativos ao processo de passagem de mensagens em cálculo paralelo e distribuído utilizando rotinas de comunicação ponto-a-ponto, quer bloqueante quer não-bloqueante.

1.4 Terminologia e Notação Utilizadas

De modo a simplificar a terminologia e a notação utilizadas neste trabalho, foram tomadas algumas decisões no que concerne à escrita da presente dissertação:

1. Recorre-se à utilização de termos técnicos em língua estrangeira sempre que não exista um termo próprio em português ou sempre que a utilização do termo português possa induzir o leitor em erro. Os termos técnicos em língua estrangeira são apresentados em itálico;
2. Quando se utilizam termos técnicos em que a terminologia portuguesa é menos usual que a terminologia estrangeira, faz-se, sempre que se julgue conveniente, referência ao termo em língua estrangeira em nota de rodapé;
3. De modo a permitir uma leitura o mais estanque possível dos vários capítulos do presente trabalho, procede-se, por vezes, à apresentação, em nota de rodapé, de informação que numa leitura sequencial do trabalho poderá ser considerada supérflua;
4. Em certas situações em que não haja a possibilidade de criar ambiguidades, utiliza-se a mesma notação para designar entidades distintas. Sempre que se julgue conveniente, a ocorrência desta situação é deliberadamente referida em nota de rodapé.

Parte II

Modelação Matemática e Formulação Numérica

Capítulo 2

Problema Térmico — Condução de Calor em Regime Transitório

Apresenta-se a equação geral da condução de calor em meios sólidos na forma diferencial. Com base no princípio das temperaturas virtuais e no método dos resíduos pesados procede-se à semidiscretização espacial e à integração temporal da equação geral da condução de calor, respectivamente. Posteriormente, tecem-se algumas considerações acerca dos diversos esquemas de integração numérica. Discutem-se as especificidades associadas ao regime transitório e apresenta-se o algoritmo de integração implícita associado ao regime transitório não-linear. Referem-se, de modo sucinto, as especificidades associadas aos regimes estacionários linear e não-linear. Por fim, apresentam-se os critérios de convergência considerados no processo iterativo.

2.1 Introdução

Existem inúmeras áreas da ciência e da engenharia que envolvem a consideração de fenómenos de transmissão de energia em forma de calor¹. No entanto, as fortes não-linearidades de comportamento associadas a geometria e a condições de fronteira complexas inviabilizam geralmente uma abordagem analítica destes fenómenos. Por outro lado, o carácter exponencial do desenvolvimento das tecnologias informáticas permite a acessibilidade a computadores com capacidades de cálculo e velocidades de processamento impensáveis há poucos anos. A este facto aliam-se as potencialidades do cálculo computacional paralelo. Estas permitem uma utilização ainda mais eficiente dos computadores. Neste contexto, os métodos numéricos constituem a opção natural para se proceder à resolução de problemas complexos e, em particular, dos problemas de transmissão de calor. De entre os vários métodos numéricos existentes destaca-se o método dos elementos finitos, não só pela sua versatilidade mas também pelas suas potencialidades.

¹O calor constitui, tal como o trabalho, um modo de transmissão de energia e não uma entidade física. No entanto, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, doravante este será referido como se de uma entidade se tratasse.

2.2 Formulação Diferencial do Problema Térmico

A transmissão de calor em meios sólidos faz-se no seu interior, por condução, ou através da sua fronteira. A equação que descreve a transmissão de calor num meio sólido² $\Omega \in \mathbb{R}^3$ no intervalo de tempo $]0, t_f]$ corresponde, considerando um referencial cartesiano ortonormado, a

$$\rho c \dot{T} + \operatorname{div}(\mathbf{q}_k) - Q = 0 \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f]. \quad (2.1)$$

ρ e c são a massa e o calor específicos, respectivamente. \dot{T} é a taxa de variação temporal do campo de temperaturas T . \mathbf{q}_k é o vector de fluxos superficiais (*i.e.* por unidade de área) de calor por condução e Q representa a taxa temporal de geração de calor por unidade de volume.

Assumindo que a condução de calor no material segue a lei de Fourier [Fourier 1822], tem-se que

$$\mathbf{q}_k = -\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T) \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f]. \quad (2.2)$$

\mathbf{k} e $\operatorname{grad}(T)$ são o tensor de condutividade térmica e o gradiente do campo de temperaturas, respectivamente. Substituindo a equação 2.2 em 2.1, obtém-se

$$\rho c \dot{T} - \operatorname{div}[\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] - Q = 0 \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f]. \quad (2.3)$$

A resolubilidade da equação 2.3 exige a imposição da condição inicial e das condições de fronteira associadas ao problema térmico. A condição inicial do problema térmico corresponde à definição, no domínio Ω , do campo inicial de temperaturas

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega. \quad (2.4)$$

Em geral, para o problema térmico podem considerar-se condições de fronteira de Dirichlet, de Neumann e de Robin [Snyder e Wilkerson 1987]. Estas são definidas nas superfícies Γ_D , Γ_N e $\Gamma_R = \Gamma_{R1} \cup \Gamma_{R2}$, respectivamente, com $\Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_R = \Gamma$ e $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \Gamma_D \cap \Gamma_R = \Gamma_N \cap \Gamma_R = \emptyset$, tal como se ilustra na figura 2.1.

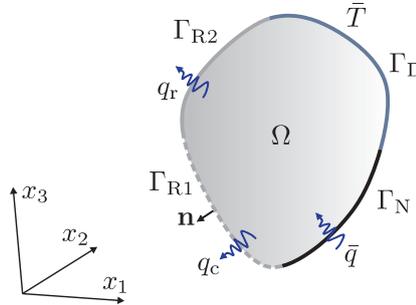


Figura 2.1: Representação esquemática das condições de fronteira associadas ao problema térmico num corpo sólido Ω .

As condições de fronteira de Dirichlet correspondem a

$$T = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_D \times]0, t_f], \quad (2.5)$$

em que \bar{T} é a temperatura prescrita na superfície Γ_D . Por outro lado, as condições de fronteira de Neumann, definidas por³

$$-\bar{q} = [-\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \quad \text{em } \Gamma_N \times]0, t_f], \quad (2.6)$$

²O meio sólido ocupa o conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ . A resolução do problema térmico corresponde à determinação de T em $\Omega \times]0, t_f]$, sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ o fecho de Ω .

³O sinal negativo associado à condição de fronteira de fluxo superficial prescrito advém da convenção de que \bar{q} é positivo quando a transferência de calor se efectua do exterior para o interior do domínio Ω considerado (*cf.* figura 2.1).

representam a prescrição do fluxo superficial de calor \bar{q} na superfície Γ_N . \mathbf{n} é um versor normal exterior à superfície Γ . Por fim, as condições de fronteira de Robin

$$q_c = [-\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} = h_c(T - T_\infty) \quad \text{em } \Gamma_{R1} \times]0, t_f] \quad \text{e} \quad (2.7)$$

$$q_r = [-\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} = \kappa_r(T - T_r) \quad \text{em } \Gamma_{R2} \times]0, t_f] \quad (2.8)$$

correspondem a condições de fronteira de convecção e de radiação nas superfícies⁴ Γ_{R1} e Γ_{R2} , respectivamente. h_c e T_∞ são o coeficiente de convecção e a temperatura do meio ambiente, respectivamente. O coeficiente de radiação é definido por

$$\kappa_r = \gamma_r(T'^2 + T_r'^2)(T' + T_r'), \quad (2.9)$$

em que T' e T_r' são as temperaturas absolutas da superfície Γ_{R2} e da superfície da fonte de radiação, respectivamente. O coeficiente γ_r depende quer da constante de Stefan-Boltzman quer das emissividades e dos factores de forma das superfícies intervenientes na troca de calor por radiação [Incropera e DeWitt 1990, Bathe 1996].

Atenda-se ao facto de a expressão 2.8 corresponder a uma modelação simplificada do fenómeno de radiação. De facto, esta não contempla fenómenos mais complexos, tais como, por exemplo, trocas de calor por radiação entre superfícies da mesma região, ou entre uma região e a sua vizinhança. Refira-se, ainda, que na abordagem apresentada do problema térmico não foram considerados quaisquer fenómenos de convecção no meio Ω , de mudança de fase, de acoplamento termomecânico, de contacto térmico ou de transmissão de calor entre múltiplos materiais⁵.

A resolução numérica do problema térmico associado à equação diferencial 2.3 com base no método dos elementos finitos requer a obtenção da sua formulação integral fraca.

2.3 Formulação Integral Fraca do Problema Térmico

No presente trabalho utiliza-se o princípio das temperaturas virtuais⁶ [Bathe 1996] para se obter a formulação integral fraca do problema térmico.

Seja δT um campo arbitrário de temperaturas virtuais contínuo e suficientemente regular em Ω para $t \in]0, t_f]$, com $\delta T = 0$ em $\Gamma_D \times]0, t_f]$. Neste contexto, multiplicando a equação de equilíbrio 2.3 pelo campo δT e integrando no domínio Ω , obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta T \left[\rho c \dot{T} - \text{div} [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] - Q \right] d\Omega = 0. \quad (2.10)$$

Devido à natureza arbitrária do campo de temperaturas virtuais tem-se que a formulação integral forte 2.10 é equivalente à formulação diferencial (forte) 2.3. Substituindo na equação 2.10 a identidade

$$\delta T \text{div} [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] = \text{div} [\delta T \mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] - \text{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \quad (2.11)$$

e reorganizando os seus termos, obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta T \rho c \dot{T} d\Omega + \int_{\Omega} \text{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] d\Omega = \int_{\Omega} \delta T Q d\Omega + \int_{\Omega} \text{div} [\delta T \mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] d\Omega. \quad (2.12)$$

⁴Por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, as superfícies Γ_{R1} e Γ_{R2} são consideradas disjuntas, *i.e.* tais que $\Gamma_{R1} \cap \Gamma_{R2} = \emptyset$ (*cf.* figura 2.1). No entanto, numa situação geral, os fenómenos de convecção e de radiação podem coexistir simultaneamente em Γ_R , sendo $\Gamma_{R1} \cap \Gamma_{R2} \neq \emptyset$.

⁵No caso de existirem n materiais distintos em Ω , o problema térmico consiste em n equações análogas à equação 2.1. Todavia, para além das condições de fronteira já consideradas, deverão impor-se, ainda, condições de continuidade de temperaturas e de fluxos superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios definidos por cada material. A formulação do problema térmico de transmissão de calor entre múltiplos materiais pode ser consultada em [Lewis *et al.* 96].

⁶Este princípio é análogo ao princípio dos deslocamentos virtuais, utilizado na mecânica dos sólidos.

A aplicação do teorema da divergência ao último termo do segundo membro da equação 2.12 resulta em

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} [\delta T \mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \, d\Omega = \int_{\Gamma} \delta T [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma. \quad (2.13)$$

No entanto, sendo $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{R1} \cup \Gamma_{R2}$ e $\delta T = 0$ em Γ_D , tem-se que

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \delta T [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma &= \int_{\Gamma_N} \delta T [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_{R1}} \delta T [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \\ &\quad + \int_{\Gamma_{R2}} \delta T [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.14)$$

A substituição das equações 2.6 a 2.8, 2.13 e 2.14 na equação 2.12 resulta em

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta T \rho c \dot{T} \, d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \, d\Omega &= \int_{\Omega} \delta T Q \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \delta T \bar{q} \, d\Gamma \\ &\quad - \int_{\Gamma_{R1}} \delta T h_c (T - T_{\infty}) \, d\Gamma - \int_{\Gamma_{R2}} \delta T \kappa_r (T - T_r) \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Reorganizando algebricamente a equação anterior, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta T \rho c \dot{T} \, d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \, d\Omega &+ \int_{\Gamma_{R1}} \delta T h_c T \, d\Gamma + \int_{\Gamma_{R2}} \delta T \kappa_r T \, d\Gamma \\ &= \int_{\Omega} \delta T Q \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \delta T \bar{q} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_{R1}} \delta T h_c T_{\infty} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_{R2}} \delta T \kappa_r T_r \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.16)$$

A equação integral de equilíbrio de fluxos de calor 2.16 corresponde ao princípio das temperaturas virtuais para o problema térmico associado à equação 2.3. Segundo este princípio, para que T — um campo de temperaturas contínuo e suficientemente regular em Ω , com $T = \bar{T}$ em $\Gamma_D \times]0, t_f]$ — seja a solução do problema térmico, a equação 2.16 deverá verificar-se, em qualquer instante $t \in]0, t_f]$, para qualquer campo arbitrário de temperaturas virtuais δT contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta T = 0$ em $\Gamma_D \times]0, t_f]$.

Uma vez determinada a formulação fraca do problema térmico procede-se à sua semidiscretização espacial por elementos finitos.

2.4 Semidiscretização Espacial por Elementos Finitos

Procedendo à decomposição do domínio Ω numa malha de elementos finitos, aproxima-se o campo global de temperaturas por

$$T(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \mathbf{T}(t) \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f] \quad \text{e} \quad (2.17)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{N}}_{\Gamma}(\mathbf{x}) \mathbf{T}(t) \quad \text{em } \Gamma \times]0, t_f]. \quad (2.18)$$

$\tilde{\mathbf{N}}$ e $\tilde{\mathbf{N}}_{\Gamma}$ constituem as matrizes globais de funções de forma (*i.e.* de interpolação) no domínio Ω e na superfície Γ , respectivamente. \mathbf{T} é o vector das temperaturas nodais, em que as componentes relativas aos nós associados a Γ_D correspondem a valores de temperatura prescrita. A derivação de ambos os membros da equação 2.17 em relação ao tempo permite aproximar o campo global das taxas de variação temporal de temperatura por

$$\dot{T}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \dot{\mathbf{T}}(t) \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f], \quad (2.19)$$

em que $\dot{\mathbf{T}}$ é o vector das taxas nodais de variação temporal de temperatura. Por outro lado, na discretização espacial assume-se que o campo global de temperaturas virtuais é aproximado por

$$\delta T(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{T}(t) \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f] \quad \text{e} \quad (2.20)$$

$$\delta T(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{N}}_{\Gamma}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{T}(t) \quad \text{em } \Gamma \times]0, t_f], \quad (2.21)$$

em que $\delta\mathbf{T}$ corresponde ao vector das temperaturas virtuais nodais, sendo nulas as componentes relativas aos nós associados a $\Gamma_{\mathbf{D}}$. Neste contexto, a substituição das equações 2.17 a 2.21 na equação 2.16 permite obter, atendendo à arbitrariedade do campo de temperaturas virtuais e utilizando notação matricial, a equação semidiscretizada⁷

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{f}. \quad (2.22)$$

\mathbf{C} e \mathbf{K} correspondem às matrizes de capacidade e de rigidez térmicas, respectivamente. \mathbf{K} é constituída pelos termos de condutividade térmica, \mathbf{K}_k , de convecção, \mathbf{K}_c , e de radiação, \mathbf{K}_r . \mathbf{Q} é o vector dos termos de geração de calor. \mathbf{f} é o vector dos fluxos prescritos e dos termos de convecção e de radiação associados às temperaturas exteriores do meio envolvente. Estas matrizes e estes vectores correspondem a

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{N}}^T \rho c \tilde{\mathbf{N}} d\Omega, \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{K}_k + \mathbf{K}_c + \mathbf{K}_r \\ &= \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{k} \tilde{\mathbf{M}} d\Omega + \int_{\Gamma_{R1}} \tilde{\mathbf{N}}_F^T h_c \tilde{\mathbf{N}}_F d\Gamma + \int_{\Gamma_{R2}} \tilde{\mathbf{N}}_F^T \kappa_r \tilde{\mathbf{N}}_F d\Gamma, \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\mathbf{Q} = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{N}}^T Q d\Omega \quad e \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &= \mathbf{f}_N + \mathbf{f}_{PN} + \mathbf{f}_{R1} + \mathbf{f}_{R2} \\ &= \int_{\Gamma_N} \tilde{\mathbf{N}}_F^T \bar{q} d\Gamma + \sum_{k=1}^{n_q} (\bar{\mathbf{P}}_N)_k + \int_{\Gamma_{R1}} \tilde{\mathbf{N}}_F^T h_c T_{\infty} d\Gamma + \int_{\Gamma_{R2}} \tilde{\mathbf{N}}_F^T \kappa_r T_r d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.26)$$

$\tilde{\mathbf{M}}$ é a matriz global das derivadas parciais das funções de forma, *i.e.* de interpolação do campo do gradiente de temperaturas. O vector \mathbf{f}_{PN} representa o vector de fluxos pontuais⁸ (nodais), constituído por n_q fluxos prescritos $\bar{\mathbf{P}}_N$.

Em geral, a equação 2.22 pode ser resolvida por técnicas de análise modal ou por métodos de integração temporal. No entanto, a utilização das técnicas de análise modal restringe-se usualmente à resolução de problemas transitórios lineares em que se pretende obter, para um intervalo de tempo considerável, uma solução dominada por apenas alguns dos modos próprios principais [Cook *et al.* 2002]. Nas restantes situações são geralmente utilizados os métodos de integração temporal.

2.5 Discretização e Integração Temporais do Problema Térmico

O processo de discretização temporal consiste em considerar que a evolução temporal do processo se faz por incrementos discretos de tempo, Δt , e não de modo contínuo. Posteriormente à discretização temporal do problema procede-se a um processo recursivo — o método de integração temporal — em que, partindo da condição inicial, se obtêm as soluções para os instantes subsequentes. Os vários métodos de integração temporal podem ser baseados em um ou mais passos de tempo [Hogge 1981, Zienkiewicz e Taylor 1998]. No presente trabalho, procede-se à integração temporal do problema térmico recorrendo a um método baseado num só passo de tempo.

⁷ A equação 2.22 diz-se semidiscretizada por aproximar a equação diferencial 2.3 de modo discreto no espaço, mas de modo contínuo no tempo (*cf.* equações 2.17 a 2.21). Deste modo, diz-se que a equação 2.22 define um problema semidiscretizado [Zienkiewicz 1981, Zienkiewicz e Taylor 1998].

⁸ Os fluxos pontuais (nodais) correspondem a fluxos aplicados em subsuperfícies infinitesimais de Γ_N . Estes foram omitidos, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, na formulação diferencial do problema térmico.

Sendo a equação 2.22 uma equação diferencial de primeira ordem em \mathbf{T} , consideram-se funções de forma de primeira ordem (*i.e.* lineares) no tempo. Deste modo, variando o vector de temperaturas nodais de \mathbf{T}_t para $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ no intervalo de tempo Δt , tem-se que, para cada componente de \mathbf{T} , as funções de forma temporais N_t e $N_{t+\Delta t}$ correspondem a

$$N_t(\tau) = 1 - \frac{\tau}{\Delta t} \quad \text{e} \quad (2.27)$$

$$N_{t+\Delta t}(\tau) = \frac{\tau}{\Delta t}, \quad (2.28)$$

em que τ é um parâmetro temporal, tal que $0 \leq \tau \leq \Delta t$. Neste contexto, assume-se que, entre os instantes de tempo t e $t + \Delta t$, o vector das temperaturas nodais varia linearmente de acordo com

$$\mathbf{T}(\tau) = \mathbf{T}_t + \frac{\tau}{\Delta t} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t), \quad (2.29)$$

em que $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ corresponde ao termo que se pretende determinar. De acordo com as equações 2.27 e 2.28, tem-se que as taxas de variação temporal das funções de forma temporais N_t e $N_{t+\Delta t}$ são

$$\dot{N}_t(\tau) = -\frac{1}{\Delta t} \quad \text{e} \quad (2.30)$$

$$\dot{N}_{t+\Delta t}(\tau) = \frac{1}{\Delta t}, \quad (2.31)$$

respectivamente, pelo que o vector das taxas nodais de variação temporal de temperatura corresponde a

$$\dot{\mathbf{T}}(\tau) = \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t). \quad (2.32)$$

Substituindo as equações 2.29 e 2.32 na equação 2.22, obtém-se

$$\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t) + \mathbf{K} \mathbf{T}_t + \frac{\tau}{\Delta t} \mathbf{K} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t) = \mathbf{Q} + \mathbf{f}, \quad (2.33)$$

que corresponde à discretização temporal da equação 2.22.

A aplicação do método dos resíduos pesados à equação 2.33 no intervalo de tempo definido por $\tau \in [0, \Delta t]$ resulta em

$$\int_0^{\Delta t} W(\tau) \left[\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t) + \mathbf{K} \mathbf{T}_t + \frac{\tau}{\Delta t} \mathbf{K} (\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t) - (\mathbf{Q} + \mathbf{f}) \right] d\tau = \mathbf{0}, \quad (2.34)$$

em que W é a função de peso. Admitindo que \mathbf{C} e \mathbf{K} são constantes nesse intervalo de tempo, obtém-se

$$\left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \Lambda \mathbf{K} \right) \mathbf{T}_{t+\Delta t} - \left[\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} - (1 - \Lambda) \mathbf{K} \right] \mathbf{T}_t - (\bar{\mathbf{Q}} + \bar{\mathbf{f}}) = \mathbf{0}, \quad (2.35)$$

em que o parâmetro Λ de ponderação de avanço da integração temporal e $\bar{\mathbf{Q}} + \bar{\mathbf{f}}$ correspondem a

$$\Lambda = \frac{1}{\Delta t} \frac{\int_0^{\Delta t} W(\tau) \tau d\tau}{\int_0^{\Delta t} W(\tau) d\tau} \quad \text{e} \quad (2.36)$$

$$\bar{\mathbf{Q}} + \bar{\mathbf{f}} = \frac{\int_0^{\Delta t} W(\tau) (\mathbf{Q} + \mathbf{f}) d\tau}{\int_0^{\Delta t} W(\tau) d\tau}, \quad (2.37)$$

respectivamente. Assumindo uma variação linear para $\mathbf{Q} + \mathbf{f}$ no intervalo de tempo definido por $\tau \in [0, \Delta t]$, *i.e.* considerando para $\mathbf{Q} + \mathbf{f}$ as mesmas funções de forma temporais que para \mathbf{T} , tem-se que

$$(\mathbf{Q} + \mathbf{f})(\tau) = (\mathbf{Q}_t + \mathbf{f}_t) + \frac{\tau}{\Delta t} [(\mathbf{Q}_{t+\Delta t} + \mathbf{f}_{t+\Delta t}) - (\mathbf{Q}_t + \mathbf{f}_t)]. \quad (2.38)$$

A substituição das equações 2.37 e 2.38 em 2.35 resulta em

$$\left(\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C} + \Lambda\mathbf{K}\right)\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C} - (1 - \Lambda)\mathbf{K}\right]\mathbf{T}_t - (1 - \Lambda)(\mathbf{Q}_t + \mathbf{f}_t) - \Lambda(\mathbf{Q}_{t+\Delta t} + \mathbf{f}_{t+\Delta t}) = \mathbf{0}. \quad (2.39)$$

As características do método de integração temporal dependem do valor seleccionado para o parâmetro de ponderação de avanço da integração temporal, Λ , da equação 2.39. Na tabela 2.1 são apresentados os métodos de integração temporal mais frequentemente utilizados, bem como os correspondentes valores de $\Lambda \in [0, 1]$ (*cf.* equação 2.36).

Tabela 2.1: Métodos de integração temporal e valores de Λ correspondentes.

Método de integração temporal	Λ
Explícito (<i>Forward Difference Method</i>)	0
Semi-implícito de Crank-Nicolson (<i>Central Difference Method</i>)	1/2
Semi-implícito de Galerkin (<i>Galerkin's Method</i>)	2/3
Implícito (<i>Backward Difference Method</i>)	1

De entre os métodos apresentados, o de integração temporal explícito ($\Lambda = 0$) é aquele que permite a obtenção da solução da equação 2.39 de um modo mais simples. A equação discretizada do problema térmico associada ao método de integração explícito corresponde, de acordo com a equação 2.39, a

$$\left(\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C}\right)\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \left(\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C} - \mathbf{K}\right)\mathbf{T}_t - (\mathbf{Q}_t + \mathbf{f}_t) = \mathbf{0}. \quad (2.40)$$

Embora este método conduza a soluções de modo imediato, apresenta a desvantagem de não só obrigar à utilização de incrementos de tempo reduzidos mas também de a solução numérica poder afastar-se da real, devido à acumulação de erros. Por outro lado, os métodos semi-implícitos ou de gradiente progressivo permitem a utilização de incrementos de tempo significativamente maiores. No entanto, apenas o método implícito permite a obtenção de uma solução incondicionalmente estável em problemas térmicos não-lineares [Cook *et al.* 2002]. Este facto advém da garantia de equilíbrio do sistema em qualquer instante: utiliza-se um ciclo iterativo no cálculo incremental para que, partindo de uma configuração t de equilíbrio, se atinja uma configuração de chegada $t + \Delta t$ também de equilíbrio. Este ciclo iterativo é realizado no intervalo $[t, t + \Delta t]$, assegurando-se quer a convergência da solução quer o equilíbrio correcto do sistema.

Neste contexto, no presente trabalho utiliza-se um método de integração temporal implícito para a resolução da equação discretizada do problema térmico. Considerando a equação 2.39 com $\Lambda = 1$, obtém-se

$$\left(\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C} + \mathbf{K}\right)\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \left(\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C}\right)\mathbf{T}_t - (\mathbf{Q}_{t+\Delta t} + \mathbf{f}_{t+\Delta t}) = \mathbf{0}. \quad (2.41)$$

Deste modo, a equação discretizada do problema térmico associada a um método de integração implícito corresponde a

$$\mathbf{K}_G\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{F}_{t+\Delta t} = \mathbf{0}, \quad (2.42)$$

em que

$$\mathbf{K}_G = \frac{1}{\Delta t}\mathbf{C} + \mathbf{K} \quad (2.43)$$

é a matriz global de rigidez térmica e

$$\mathbf{F}_{t+\Delta t} = \left(\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C}\right)\mathbf{T}_t + \mathbf{Q}_{t+\Delta t} + \mathbf{f}_{t+\Delta t} \quad (2.44)$$

corresponde ao vector de fluxos equivalentes.

Por fim, refira-se que devido ao facto de na definição da matriz de capacidade térmica, \mathbf{C} , se utilizarem as mesmas funções de interpolação quer para a temperatura quer para a sua taxa temporal, a matriz \mathbf{C} é dita coerente (*cf.* equação 2.23). É também possível utilizar uma matriz reduzida de capacidade térmica. Neste caso, a capacidade térmica dos vários elementos finitos é concentrada nos seus nós, obtendo-se assim uma matriz diagonal de capacidade térmica. A sua utilização revela-se adequada e económica num esquema de integração explícito. No entanto, verifica-se que esta técnica pode levar a uma diminuição da precisão dos resultados obtidos [Cook *et al.* 2002, Zienkiewicz e Taylor 1998]. Por outro lado, a diagonalização de matrizes de capacidade térmica associadas a elementos finitos de ordem superior, além de não possuir suporte físico, pode originar, em certos algoritmos, efeitos adversos, tais como, por exemplo, a existência de elementos negativos nas suas diagonais [Zienkiewicz e Taylor 1997]. Neste contexto, neste trabalho optou-se unicamente pela utilização da matriz coerente de capacidade térmica.

Uma descrição detalhada dos principais aspectos relacionados com os processos de discretização e integração temporais do problema térmico pode ser consultada, por exemplo, em [Campos 2005].

2.6 Integração Implícita da Equação Discretizada

Numa análise em regime transitório em que as componentes de \mathbf{K}_G e de $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ não dependam da temperatura e não haja trocas por radiação, a equação 2.42 é linear. Assim, partindo da condição inicial, a evolução temporal do processo prossegue por incrementos discretos de tempo, Δt , podendo a solução $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ ser obtida de modo directo, de acordo com as equações 2.24, 2.26 e 2.41, a partir da equação

$$\left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \mathbf{K}_k + \mathbf{K}_c \right) \mathbf{T}_{t+\Delta t} = \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \right) \mathbf{T}_t + \mathbf{Q} + \mathbf{f}_N + \mathbf{f}_{PN} + \mathbf{f}_{R1}. \quad (2.45)$$

No entanto, nas situações em que as componentes de \mathbf{K}_G ou de $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ dependam da temperatura, constata-se que a equação 2.42 é não-linear. A não-linearidade manifesta-se no facto de, após se obter o vector das temperaturas nodais $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ e se proceder à actualização da matriz \mathbf{K}_G e do vector $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$, a equação 2.42 não se verificar. Deste modo, a não-linearidade da equação 2.42 resulta num resíduo

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{K}_G \mathbf{T}_{t+\Delta t} \neq \mathbf{0}. \quad (2.46)$$

Este facto advém de, na dedução da equação 2.41, se ter admitido, no incremento de tempo Δt , a invariância quer de \mathbf{C} quer de \mathbf{K} e a variação linear de $\mathbf{Q} + \mathbf{f}$.

Deste modo, em vez de se resolver o problema transitório não-linear de modo unicamente incremental, procede-se em cada incremento à resolução de um subproblema em que a solução é inicialmente aproximada de modo linear e posteriormente corrigida, se for necessário, recorrendo a um método iterativo. Neste contexto, define-se o resíduo

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}) = \mathbf{F}(\mathbf{T}) - \mathbf{K}_G(\mathbf{T})\mathbf{T}. \quad (2.47)$$

Seja o estado de equilíbrio térmico (*cf.* equação 2.3) definido, no instante t , por \mathbf{T}_t , $\mathbf{K}_G|_t = \mathbf{K}_G(\mathbf{T}_t)$ e $\mathbf{F}_t = \mathbf{F}(\mathbf{T}_t)$, ao qual corresponde o resíduo

$$\mathbf{R}_t = \mathbf{F}_t - \mathbf{K}_G|_t \mathbf{T}_t = \mathbf{0}. \quad (2.48)$$

O processo incremental consiste em considerar um novo estado para os fluxos equivalentes, definido por $\mathbf{F}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_t + \Delta \mathbf{F}_{t+\Delta t}$, e determinar $\Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}$ a partir da relação linear

$$\mathbf{K}_G|_{t+\Delta t} \Delta \mathbf{T}_{t+\Delta t} - \Delta \mathbf{F}_{t+\Delta t} = \mathbf{0}. \quad (2.49)$$

No entanto, devido à natureza não-linear do problema, o valor obtido para $\mathbf{T}_{t+\Delta t} = \mathbf{T}_t + \Delta\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ será tal que

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{K}_G|_{t+\Delta t} \mathbf{T}_{t+\Delta t} \neq \mathbf{0}. \quad (2.50)$$

O resíduo da equação 2.50 deverá ser, então, minimizado por recurso a um método iterativo. No método iterativo de Newton-Raphson assume-se um comportamento linear para o resíduo na vizinhança da solução previamente obtida. O desenvolvimento linear do resíduo na vizinhança de \mathbf{T} para a iteração $i + 1$, $i \in \mathbb{N}_0$, de um instante incremental $t + \Delta t$ corresponde⁹ a

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{R}_{t+\Delta t}^i + \left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (2.51)$$

Conforme se ilustra esquematicamente na figura 2.2, com o método iterativo de Newton-Raphson procura-se melhorar a aproximação à solução, considerando que

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{0}, \quad (2.52)$$

em que as temperaturas nodais são actualizadas de acordo com

$$\mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}^i + \delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (2.53)$$

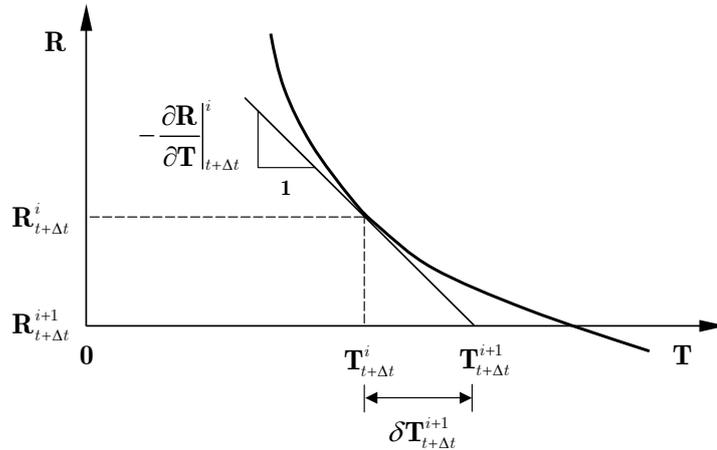


Figura 2.2: Representação unidimensional do processo de eliminação do resíduo no método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas térmicos em regime transitório não-linear.

De acordo com a figura 2.2, a matriz tangente à curva do resíduo — a matriz jacobiana de \mathbf{R} — corresponde, para $\mathbf{T} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}^i$, a

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i = \frac{\mathbf{0} - \mathbf{R}_{t+\Delta t}^i}{\mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1} - \mathbf{T}_{t+\Delta t}^i}. \quad (2.54)$$

⁹Atenda-se ao facto de, em termos matematicamente rigorosos, o desenvolvimento linear associado à expressão 2.51 dever envolver, de acordo com a equação 2.47, uma derivada total e não uma derivada parcial. De facto, sendo o vector resíduo função unicamente do vector das temperaturas nodais, *i.e.* $\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{T})$, o desenvolvimento linear deveria envolver $d\mathbf{R}/d\mathbf{T}$ em vez de $\partial\mathbf{R}/\partial\mathbf{T}$. No entanto, por uma questão de conformidade com a notação utilizada usualmente na bibliografia (*e.g.* [Zienkiewicz e Taylor 1998]), esta última notação é adoptada, sem perda de generalidade, no presente trabalho.

Assim, as equações 2.53 e 2.54 permitem concluir que a equação da correcção iterativa das temperaturas nodais em regime transitório não-linear corresponde a

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1} = -\mathbf{R}_{t+\Delta t}^i. \quad (2.55)$$

No entanto, de acordo com a equação 2.47 tem-se que

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i = \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i - \left. \frac{\partial \mathbf{K}_G}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i \mathbf{T}_{t+\Delta t}^i - \mathbf{K}_G|_{t+\Delta t}^i. \quad (2.56)$$

A equação 2.56 define a matriz jacobiana de \mathbf{R} associada a uma linearização exacta do princípio das temperaturas virtuais em torno do último estado de temperaturas referente ao ciclo iterativo. No entanto, a utilização do método de Newton-Raphson em problemas térmicos resulta, geralmente, numa matriz jacobiana de \mathbf{R} não-simétrica [Zienkiewicz 1981]. Deste modo, é usual substituí-la, no processo iterativo, por uma sua aproximação simetrizada. Uma possibilidade consiste em não se considerar, em cada iteração, a influência, na matriz jacobiana de \mathbf{R} , da variação, com a temperatura, quer do vector de fluxos equivalente quer da matriz global de rigidez térmica [Bathe 1996]. Neste contexto, a aproximação simetrizada da matriz jacobiana de \mathbf{R} resulta, de acordo com a equação 2.56, em

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{t+\Delta t}^i = -\mathbf{K}_G|_{t+\Delta t}^i. \quad (2.57)$$

De acordo com as equações 2.47, 2.55 e 2.57 obtém-se a seguinte equação de correcção iterativa das temperaturas nodais em regime transitório não-linear:

$$\mathbf{K}_G|_{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{F}_{t+\Delta t}^i - \mathbf{K}_G|_{t+\Delta t}^i \mathbf{T}_{t+\Delta t}^i, \quad (2.58)$$

que corresponde a uma linearização aproximada do princípio das temperaturas virtuais em torno do último estado de temperaturas referente ao ciclo iterativo. Deste modo, verifica-se que a matriz tangente associada ao processo iterativo corresponde à matriz global de rigidez térmica \mathbf{K}_G .

No processo iterativo definem-se

$$\mathbf{F}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{F}_t + \Delta \mathbf{F}_{t+\Delta t}, \quad (2.59)$$

$$\mathbf{T}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{T}_t, \quad (2.60)$$

$$\mathbf{K}_G|_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{K}_G|_t \quad \text{e} \quad (2.61)$$

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{F}_{t+\Delta t}^0 - \mathbf{K}_G|_{t+\Delta t}^0 \mathbf{T}_{t+\Delta t}^0 \quad (2.62)$$

como valores iniciais do vector de fluxos equivalentes, do vector das temperaturas nodais, da matriz tangente de rigidez térmica e do resíduo (vectorial), respectivamente. Posteriormente procede-se à determinação da variação das temperaturas nodais, recorrendo à equação 2.58, actualizando-se então o valor das temperaturas nodais, de acordo com a relação 2.53. Em seguida, com base no valor actualizado das temperaturas nodais calculam-se quer a matriz tangente associada ao processo iterativo, com base na relação 2.43, quer o resíduo, de acordo com a relação 2.47. Este procedimento deverá ser repetido até que se atinja a convergência (*e.g.* $\|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}\|$ menor que um valor predefinido). Na figura 2.3 representa-se¹⁰ um esquema unidimensional do processo iterativo do método de Newton-Raphson para um problema térmico em que a solução num determinado incremento é atingida em três iterações.

O algoritmo de Newton-Raphson para problemas térmicos em regime transitório não-linear encontra-se ilustrado na tabela 2.2.

¹⁰Por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, assume-se na representação da figura 2.3 que $\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ é constante.

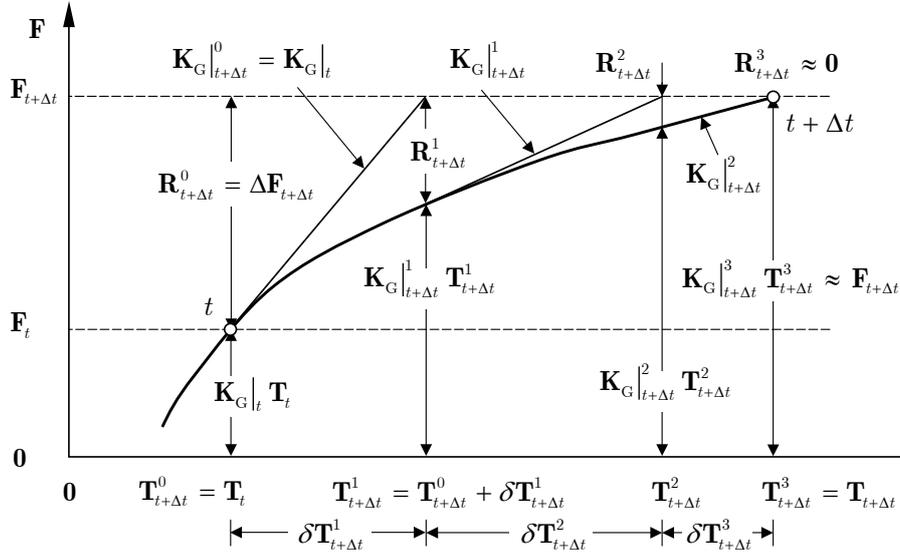


Figura 2.3: Representação esquemática do processo iterativo do método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas térmicos em regime transitório não-linear ($\mathbf{F}_{t+\Delta t}$ constante).

Tabela 2.2: Algoritmo de Newton-Raphson para resolução implícita de problemas térmicos em regime transitório não-linear.

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Iniciação de variáveis: <ol style="list-style-type: none"> 1.1 $\mathbf{F}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{F}_t + \Delta \mathbf{F}_{t+\Delta t}$ 1.2 $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{T}_t$ 1.3 $\mathbf{K}_G _{t+\Delta t}^0 = \mathbf{K}_G _t$ 1.4 $\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{F}_{t+\Delta t}^0 - \mathbf{K}_G _{t+\Delta t}^0 \mathbf{T}_{t+\Delta t}^0$ 2. REPETIR — Ciclo iterativo em $i = 0, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 2.1 Cálculo de $\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}$ por $\mathbf{K}_G _{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{R}_{t+\Delta t}^i$ 2.2 Actualização da temperatura: $\mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}^i + \delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}$ 2.3 Cálculo de $\mathbf{K}_G _{t+\Delta t}^{i+1}$ e $\mathbf{F}_{t+\Delta t}^{i+1}$ para $\mathbf{T} = \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}$ 2.4 Cálculo do resíduo $\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{F}_{t+\Delta t}^{i+1} - \mathbf{K}_G _{t+\Delta t}^{i+1} \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+1}$ <p>ATÉ convergência OU paragem</p> |
|--|

Por fim, refira-se que o regime estacionário corresponde a uma hipótese aceitável, sempre que as condições de fronteira sofram evoluções quase-estáticas e sejam insignificantes os efeitos de inércia térmica. Numericamente, esta condição corresponde a considerar uma matriz de capacidade térmica $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{0}$ ou um incremento de tempo $\Delta t \rightarrow +\infty$. Neste caso não faz sentido falar em integração temporal, uma vez que se assume uma invariância temporal das variáveis envolvidas no problema térmico. Deste modo, a solução \mathbf{T} do problema térmico linear em regime estacionário obtém-se, de acordo com a equação 2.45, directamente a partir de

$$(\mathbf{K}_k + \mathbf{K}_c) \mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{f}_N + \mathbf{f}_{PN} + \mathbf{f}_{R1}. \quad (2.63)$$

Não obstante, no caso de existirem não-linearidades associadas às propriedades materiais é necessário utilizar um processo incremental em que se discretiza o nível de carga térmica (pseudotempo t'). Deste modo, a equação 2.42 resulta em

$$\mathbf{K} \mathbf{T}_{t'+\Delta t'} - (\mathbf{Q}_{t'+\Delta t'} + \mathbf{f}_{t'+\Delta t'}) = \mathbf{0}. \quad (2.64)$$

Assim, tal como no caso não-linear transitório, em vez de se resolver o problema não-linear original de uma só vez, procede-se à resolução de subproblemas em que a solução é inicialmente aproximada de modo linear e posteriormente corrigida, se for necessário, recorrendo a um método iterativo.

Procedendo a uma análise idêntica à que foi efectuada para o regime transitório, obtém-se a seguinte equação de correcção iterativa das temperaturas nodais em regime estacionário não-linear:

$$\mathbf{K}|_{t'+\Delta t'}^i \delta \mathbf{T}_{t'+\Delta t'}^{i+1} = \mathbf{Q}|_{t'+\Delta t'}^i + \mathbf{f}|_{t'+\Delta t'}^i - \mathbf{K}|_{t'+\Delta t'}^i \mathbf{T}_{t'+\Delta t'}^i. \quad (2.65)$$

Deste modo, o algoritmo geral de Newton-Raphson para problemas térmicos em regime estacionário não-linear obtém-se do algoritmo para o regime transitório (*cf.* tabela 2.2) a partir da substituição directa de \mathbf{K}_G , \mathbf{F} e t por \mathbf{K} , $\mathbf{Q} + \mathbf{f}$ e t' , respectivamente.

2.7 Critérios de Convergência e de Paragem

A utilização eficiente do método iterativo de Newton-Raphson exige que se recorra a critérios de convergência e, eventualmente, de paragem. Estes critérios devem ser seleccionados com extremo cuidado, visto o equilíbrio do sistema e a precisão dos resultados deles dependerem. Neste trabalho consideram-se dois tipos distintos de critérios de convergência:

1. Critérios baseados na magnitude das correcções da variável que controla o processo (*e.g.* a temperatura no processo térmico);
2. Critérios baseados na magnitude do resíduo.

Neste contexto, consideraram-se os seguintes critérios baseados na magnitude das correcções da variável que controla o processo:

$$\|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^{i+2}\| \leq \varepsilon_{\text{tol}} \|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^1\| \quad \text{e} \quad (2.66)$$

$$\text{máx} \left(|\delta T_{t+\Delta t}^{i+2}|_k \right) \leq \varepsilon_{\text{tol}} \|\delta \mathbf{T}_{t+\Delta t}^1\|. \quad (2.67)$$

$\|\cdot\|$ designa a norma euclidiana de um vector e $i \in \mathbb{N}_0$. ε_{tol} é um parâmetro¹¹ de tolerância pre-definido e $k = 1, \dots, N_{\text{nós}}$, em que $N_{\text{nós}}$ corresponde ao número de componentes do vector $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$.

Por outro lado, considerou-se o seguinte critério baseado na magnitude do resíduo:

$$\|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1}\| \leq \varepsilon_{\text{tol}} \|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0\|. \quad (2.68)$$

¹¹Nesta secção faz-se, por uma questão de simplificação, referência a um único parâmetro de tolerância, ε_{tol} . No entanto, atenda-se ao facto de, na prática, se poderem considerar diferentes valores de ε_{tol} para cada um dos critérios.

As condições 2.66 e 2.67 verificam quando é que as sucessivas iterações se traduzem em variações insignificantes da variável de controlo. No entanto, embora estas condições sejam de fácil implementação e envolvam um esforço computacional reduzido, não se revelam eficazes em situações em que o esquema iterativo possa convergir (ou divergir) de um modo muito lento. Por outro lado, a condição 2.68 controla a magnitude do resíduo, verificando quando é que a sua norma se torna suficientemente pequena. A simplicidade da implementação deste critério advém do facto de o vector $\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1}$ ser obtido em cada iteração. No entanto, este critério revela-se insensível à taxa de variação do resíduo. Neste contexto, a utilização simultânea dos diferentes tipos de critério (*cf.* inequações 2.66 a 2.68) permite um controlo mais versátil e eficaz da convergência de um processo iterativo.

Por outro lado, de modo a evitar situações em que a não-convergência ou a convergência lenta do processo iterativo resulte num tempo despendido em cálculo computacional excessivo, foram considerados dois tipos distintos de critério de paragem. O primeiro critério de paragem adoptado neste trabalho consiste na finalização do ciclo iterativo, assim que o número de iterações efectuadas, N , atinja o número máximo de iterações admissível:

$$N = N_{\text{máx}}. \quad (2.69)$$

Com base na magnitude do resíduo, foi também implementado um critério de paragem que visa a finalização do ciclo iterativo sempre que se verifiquem oscilações numéricas de magnitude excessiva ou, inclusive, a divergência da solução, isto é,

$$\|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1}\| \geq \frac{1}{\varepsilon_{\text{tol}}} \|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0\|. \quad (2.70)$$

Capítulo 3

Problema Termomecânico — Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada

Tecem-se algumas considerações gerais acerca do problema geral de termoelasticidade linear, que combina a teoria da elasticidade linear com a condução de calor para situações de regime transitório. Refere-se a sua relação com os problemas de termoelasticidade desacoplada e de termoelasticidade quase-estática desacoplada. Apresenta-se a equação diferencial do problema quase-estático de elasticidade linear associado ao problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada (linear). Com base no princípio dos deslocamentos virtuais, obtém-se a formulação integral fraca deste problema, procedendo-se à sua discretização espacial por elementos finitos.

3.1 Introdução

Várias aplicações de engenharia envolvem a consideração de fenómenos de termoelasticidade. Não raras vezes, estes fenómenos podem ser modelados com base na hipótese da sua linearidade. Assim, a utilização quer do método dos elementos finitos quer de metodologias de homogeneização pode revelar-se uma ferramenta particularmente útil e versátil para a modelação dos fenómenos de termoelasticidade linear. Em particular, as equações que descrevem o balanço de energia e a conservação de quantidade de movimento para o problema geral de termoelasticidade linear num meio sólido¹ $\Omega \in \mathbb{R}^3$ no intervalo de tempo $]0, t_f]$ correspondem, assumindo pequenas deformações

¹O meio sólido ocupa o conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ . A resolução do problema geral de termoelasticidade linear corresponde à determinação de \mathbf{u} e T em $\bar{\Omega} \times]0, t_f]$, sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ o fecho de Ω . A formulação detalhada do problema geral de termoelasticidade linear pode ser consultada, por exemplo, em [Boley e Weiner 1997, Fung e Tong 2001].

e considerando um referencial cartesiano ortonormado, a [Fung e Tong 2001]

$$\rho c \dot{T} - \text{div} [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] - Q + T\boldsymbol{\beta} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} = 0 \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f] \quad \text{e} \quad (3.1)$$

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f} - \rho \mathbf{a} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega \times]0, t_f], \quad (3.2)$$

respectivamente. ρ e c são a massa específica e o calor específico (definido a deformação constante). \dot{T} é a taxa de variação temporal do campo de temperaturas T . \mathbf{k} e $\text{grad}(T)$ são o tensor de condutividade térmica e o gradiente do campo de temperaturas, respectivamente. Q representa a taxa temporal de geração de calor por unidade de volume. $\boldsymbol{\beta}$ e $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ são os tensores dos módulos térmicos e das taxas de variação temporal do campo de deformações $\boldsymbol{\epsilon}$, respectivamente. $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões de Cauchy. \mathbf{f} e \mathbf{a} são os vectores das forças volúmicas e das acelerações, respectivamente.

Neste contexto, o problema geral de termoelasticidade linear combina a teoria da elasticidade linear com a condução de calor para situações de regime transitório, pelo que a sua resolução se revela matematicamente complexa [Boley e Weiner 1997]. No entanto, na maioria das aplicações da termoelasticidade a problemas de engenharia é possível introduzir duas hipóteses simplificativas nas equações 3.1 e 3.2 sem se levar ao aparecimento de erros significativos na sua solução. A primeira hipótese simplificativa consiste em não considerar o termo $T\boldsymbol{\beta} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}$, de dissipação termoelástica (*vd.* equação 3.1). Este termo pode ser desprezado na generalidade dos problemas de termoelasticidade linear, exceptuando aqueles em que o fenómeno de dissipação termoelástica seja o objecto de estudo [Boley e Weiner 1997], tal como, por exemplo, no estudo da fricção interna em metais. Por outro lado, a segunda hipótese simplificativa consiste em não considerar o termo $\rho \mathbf{a}$ de inércia mecânica (*vd.* equação 3.2). A consideração de apenas a primeira hipótese ou de ambas conduz aos ditos problemas de termoelasticidade desacoplada e de termoelasticidade quase-estática desacoplada, respectivamente. Por oposição, o problema geral de termoelasticidade linear é usualmente denominado de problema de termoelasticidade acoplada. Em termos gerais, as duas hipóteses simplificativas são admissíveis para o estudo de um determinado sistema no caso de o seu tempo característico térmico e de o tempo de aplicação de cargas térmicas (*e.g.* a taxa temporal de geração de calor volúmica, Q) serem bastante superiores ao tempo característico mecânico do sistema. Uma análise mais detalhada destes assuntos pode ser consultada em [Boley e Weiner 1997].

O problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada consiste em dois problemas distintos: um problema linear de condução de calor que, em termos de comportamento exclusivamente térmico, pode ser quase-estático (*cf.* equação 2.63) ou transitório (*cf.* equação 2.45), e um problema quase-estático de elasticidade linear, usualmente denominado de problema de termoelasticidade² (linear) (*cf.* [Fung e Tong 2001]). Em termos práticos, nesta situação procede-se à resolução do problema de condução de calor, sendo o campo de temperaturas resultante utilizado, posteriormente, no problema de termoelasticidade.

3.2 Formulação Diferencial do Problema Termoelástico

A equação que descreve o problema termoelástico num meio sólido³ $\Omega \in \mathbb{R}^3$, assumindo pequenas deformações e um processo quase-estático, corresponde, considerando um referencial cartesiano ortonormado, a

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega. \quad (3.3)$$

²Por uma questão de simplificação de exposição, a denominação de termoelasticidade (linear) será utilizada no seguimento deste trabalho para referir o problema quase-estático de elasticidade linear associada ao problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada.

³O meio sólido ocupa o conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ . A resolução do problema termoelástico corresponde à determinação de \mathbf{u} em $\bar{\Omega}$, sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ o fecho de Ω .

As relações deformações-deslocamentos linearizadas e as relações constitutivas — lei de Duhamel-Neumann — correspondem a

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\text{grad}(\mathbf{u}) + [\text{grad}(\mathbf{u})]^T \right] \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (3.4)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon} - \Delta T \boldsymbol{\beta} \quad \text{em } \Omega, \quad (3.5)$$

respectivamente, em que

$$\Delta T = T - T_0 \quad \text{e} \quad (3.6)$$

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{D} : \boldsymbol{\alpha}. \quad (3.7)$$

\mathbf{u} é o vector de deslocamentos. \mathbf{D} e $\boldsymbol{\alpha}$ são os tensores de elasticidade e de expansibilidade térmica, respectivamente. T_0 é a temperatura de referência.

A resolubilidade da equação 3.3 exige a imposição de condições de fronteira associadas ao problema termoelástico. Em geral, para o problema termoelástico consideram-se condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann⁴ definidas nas superfícies Γ_D e Γ_N , respectivamente, com $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$ e $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ ⁵, tal como se ilustra na figura 3.1.

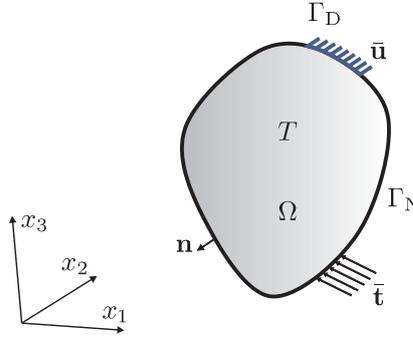


Figura 3.1: Representação esquemática das condições de fronteira associadas ao problema termoelástico num corpo sólido Ω .

As condições de fronteira de Dirichlet correspondem a

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{em } \Gamma_D, \quad (3.8)$$

em que $\bar{\mathbf{u}}$ é o deslocamento prescrito na superfície Γ_D . Por outro lado, as condições de fronteira de Neumann, definidas por

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{em } \Gamma_N, \quad (3.9)$$

representam a prescrição de força superficial $\bar{\mathbf{t}}$ na superfície Γ_N . \mathbf{n} é um versor normal exterior à superfície Γ . Refira-se, ainda, que, por uma questão de simplificação, na abordagem apresentada do problema termoelástico não foi considerada a existência de múltiplos materiais⁶.

A resolução numérica por elementos finitos do problema termoelástico associado à equação diferencial 3.3 com base no método dos elementos finitos requer a obtenção da sua formulação fraca (integral).

⁴Tal como para o problema térmico, é possível definir condições de fronteira de Robin para o problema de termoelasticidade. Fisicamente, estas correspondem à existência de uma fundação elástica em contacto com uma parte da fronteira Γ . Porém, dada a natureza peculiar deste tipo de condição de fronteira, não se consideram, sem perda de generalidade, condições de fronteira de Robin no problema termoelástico.

⁵Por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, as superfícies Γ_D e Γ_N são consideradas disjuntas, *i.e.* tais que $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ (*cf.* figura 3.1). No entanto, numa situação geral, as prescrições de deslocamento e de força superficial podem coexistir simultaneamente em diferentes graus de liberdade de um determinado ponto da fronteira Γ , sendo $\Gamma_D \cap \Gamma_N \neq \emptyset$.

⁶No caso de existirem n materiais distintos, o problema termoelástico consiste em n equações análogas à equação 3.3. Todavia, para além das condições de fronteira já consideradas, deverão impor-se ainda condições de continuidade de deslocamento e de força superficial em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios.

3.3 Formulação Integral Fraca do Problema Termoelástico

No presente trabalho utiliza-se o princípio dos deslocamentos virtuais⁷ para se obter a formulação integral fraca do problema termoelástico.

Seja $\delta \mathbf{u}$ um campo arbitrário de deslocamentos virtuais contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D . Neste contexto, efectuando o produto (tensorial) escalar da equação de equilíbrio 3.3 pelo campo $\delta \mathbf{u}$ e integrando no domínio Ω , obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot [\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f}] \, d\Omega = 0. \quad (3.10)$$

Devido à natureza arbitrária do campo de deslocamentos virtuais tem-se que a formulação integral forte 3.10 é equivalente à formulação diferencial (forte) 3.3. Substituindo na equação 3.10 a identidade

$$\delta \mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \operatorname{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \operatorname{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \quad (3.11)$$

e reorganizando os seus termos, obtém-se

$$\int_{\Omega} \operatorname{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega. \quad (3.12)$$

A aplicação do teorema da divergência ao último termo do segundo membro da equação 3.12 resulta em

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega = \int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (3.13)$$

No entanto, sendo $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ e $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D , tem-se que

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma = \int_{\Gamma_N} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (3.14)$$

A substituição das equações 3.9, 3.13 e 3.14 na equação 3.12 resulta em

$$\int_{\Omega} \operatorname{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (3.15)$$

Por outro lado, atendendo à simetria de $\boldsymbol{\sigma}$, tem-se que

$$\operatorname{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} = \delta \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.16)$$

em que

$$\delta \boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{grad}(\delta \mathbf{u}) + [\operatorname{grad}(\delta \mathbf{u})]^T \right] \quad (3.17)$$

é o campo de deformações virtuais. A substituição das equações 3.5 e 3.16 na expressão 3.15 resulta, após a reorganização algébrica dos seus termos, em

$$\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\epsilon} : \mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon} \, d\Omega = \int_{\Omega} \Delta T \, \delta \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\beta} \, d\Omega + \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (3.18)$$

A equação integral 3.18 corresponde ao princípio dos deslocamentos virtuais para o problema termoelástico associado à equação 3.3. Segundo este princípio, para que \mathbf{u} — um campo de deslocamentos contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ em Γ_D — seja a solução do problema termoelástico, a equação 3.18 deverá verificar-se para qualquer campo arbitrário de deslocamentos virtuais $\delta \mathbf{u}$ contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D .

Após se ter obtido a formulação fraca do problema termoelástico procede-se à sua discretização espacial por elementos finitos.

⁷Este princípio corresponde ao princípio dos trabalhos virtuais.

3.4 Discretização Espacial por Elementos Finitos

Procedendo à decomposição do domínio Ω numa malha de elementos finitos, aproxima-se o campo global de deslocamentos por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{U} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (3.19)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_\Gamma(\mathbf{x}) \mathbf{U} \quad \text{em } \Gamma. \quad (3.20)$$

\mathbf{N} e \mathbf{N}_Γ constituem as matrizes globais de funções de forma (*i.e.* de interpolação) no domínio Ω e na superfície Γ , respectivamente. \mathbf{U} é o vector dos deslocamentos nodais, em que as componentes relativas aos nós associados a Γ_D correspondem a valores de deslocamento prescrito.

Por outro lado, na discretização espacial assume-se que o campo global de deslocamentos virtuais é aproximado por

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{U} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (3.21)$$

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_\Gamma(\mathbf{x}) \delta \mathbf{U} \quad \text{em } \Gamma, \quad (3.22)$$

em que $\delta \mathbf{U}$ corresponde ao vector dos deslocamentos virtuais nodais, sendo nulas as componentes relativas aos nós associados a Γ_D . Neste contexto, a substituição das equações 3.4, 3.17, 3.19, 3.21 e 3.22 na equação 3.18 permite obter, atendendo à arbitrariedade do campo de deslocamentos virtuais e utilizando notação matricial, a equação discretizada de equilíbrio termoelástico:

$$\mathbf{K}_u \mathbf{U} = \mathbf{F}. \quad (3.23)$$

\mathbf{K}_u e \mathbf{F} são a matriz de rigidez e o vector de forças externas, respectivamente, que correspondem a

$$\mathbf{K}_u = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega \quad \text{e} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{F}_T + \mathbf{F}_f + \mathbf{F}_N + \mathbf{R}_N \\ &= \int_{\Omega} \Delta T \mathbf{B}^T \boldsymbol{\beta} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}_\Gamma^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma + \sum_{k=1}^{n_r} (\bar{\mathbf{R}}_N)_k. \end{aligned} \quad (3.25)$$

\mathbf{B} é a matriz global das derivadas parciais das funções de forma. \mathbf{F}_T e \mathbf{F}_f correspondem aos vectores de forças de dilatação térmica e de forças distribuídas no volume Ω , respectivamente. \mathbf{F}_N é o vector de forças distribuídas na superfície Γ_N . \mathbf{R}_N representa o vector de forças pontuais⁸ (nodais), constituído por n_r forças prescritas $\bar{\mathbf{R}}_N$.

⁸As forças pontuais (nodais) correspondem a forças aplicadas em subsuperfícies infinitesimais de Γ_N . Estas foram omitidas, sem perda de generalidade, na formulação diferencial do problema termoelástico por uma questão de simplificação.

Capítulo 4

Problema Mecânico — Elastoplasticidade Clássica

Aborda-se o problema de elastoplasticidade quase-estática assumindo pequenas transformações. Inicialmente, apresenta-se a formulação infinitesimal do modelo de elastoplasticidade considerado. Em seguida, apresenta-se a formulação do problema de elastoplasticidade quase-estática. Com base no princípio dos deslocamentos virtuais, obtém-se a sua formulação integral fraca, procedendo-se, posteriormente, à sua discretização espacial por elementos finitos. Discutem-se as especificidades associadas quer à integração implícita da equação de equilíbrio discretizada pelo método iterativo de Newton-Raphson quer aos critérios de convergência e de paragem utilizados. Por fim, apresenta-se o algoritmo adoptado para a integração implícita da lei de comportamento elastoplástico e procede-se à formulação do módulo elastoplástico coerente associado ao modelo de elastoplasticidade considerado.

4.1 Introdução

Em projectos de componentes estruturais admite-se geralmente que as solicitações impostas conduzem a um comportamento elástico dos materiais que os constituem. Todavia, em certas situações é necessário prever o comportamento dos componentes no caso de ocorrerem deformações em regime de elastoplasticidade. Por outro lado, várias aplicações de engenharia envolvem a consideração de fenómenos de elastoplasticidade (*e.g.* processos tecnológicos de fabrico). Por vezes, estes fenómenos podem ser modelados com base na hipótese da ocorrência de pequenas transformações, *i.e.* de pequenas deformações e de pequenas rotações. Neste contexto, a utilização do método dos elementos finitos pode revelar-se uma ferramenta particularmente útil e versátil para a modelação dos fenómenos de elastoplasticidade.

4.2 Elastoplasticidade Clássica — Formulação Infinitesimal

A análise do comportamento dos materiais em regime elastoplástico pode ser efectuada com base em duas teorias distintas:

- Teoria incremental — considera-se que a deformação plástica depende da trajectória de carregamento, relacionando-se o tensor das tensões com o tensor dos incrementos de deformação plástica;
- Teoria da deformação total — consideram-se relações entre os tensores das tensões e das deformações (totais). Esta teoria foi originalmente proposta por Hencky [Hencky 1924].

De um modo geral, verifica-se que o estado de deformação plástica dos materiais depende da trajectória do carregamento, pelo que os resultados obtidos com base nestas duas teorias podem diferir significativamente para carregamentos de natureza não-proporcional. Atendendo a esta limitação da teoria da deformação total, neste trabalho aborda-se a análise do fenómeno da elastoplasticidade na perspectiva da teoria incremental.

Neste contexto, com base na teoria da elasticidade linear e na teoria clássica da plasticidade [Khan e Huang 1995, Simo e Hughes 1998], nesta secção apresentam-se, de modo sucinto, os principais aspectos relacionados com o modelo de comportamento elastoplástico adoptado, que no presente trabalho se designa modelo de elastoplasticidade clássica. Procede-se, posteriormente, à obtenção do módulo elastoplástico tangente relativo ao modelo de elastoplasticidade considerado.

4.2.1 Modelo de Elastoplasticidade

Considerando que o fenómeno de elastoplasticidade decorre num contexto de pequenas transformações, torna-se lícito assumir a decomposição aditiva do tensor das deformações totais ϵ nas componentes elástica ϵ^e e plástica ϵ^p :

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^p, \quad (4.1)$$

em que as relações deformações-deslocamentos linearizadas correspondem, em termos do vector de deslocamentos \mathbf{u} , a

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left[\text{grad}(\mathbf{u}) + [\text{grad}(\mathbf{u})]^T \right]. \quad (4.2)$$

O comportamento elástico é descrito pela relação constitutiva

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : \epsilon^e, \quad (4.3)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões de Cauchy e \mathbf{D} é o tensor de elasticidade. Admitindo que o comportamento elástico é linear e isotrópico, tem-se que o tensor de elasticidade corresponde a

$$\mathbf{D} = \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G \left(\mathfrak{S} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right). \quad (4.4)$$

κ é o módulo de incompressibilidade¹ e G é o módulo de elasticidade transversal. $\mathbf{1}$ é o tensor identidade de segunda ordem e \mathfrak{S} é um tensor identidade não-geral² de quarta ordem, definidos por

$$\mathbf{1} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad e \quad (4.5)$$

$$\mathfrak{S} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l, \quad (4.6)$$

¹Do inglês: *bulk modulus*.

²Atenda-se ao facto de o tensor \mathfrak{S} corresponder a um tensor identidade única e exclusivamente no contexto da sua multiplicação tensorial de dupla contracção, neste trabalho denotada por “:”, por um tensor de segunda ordem simétrico. Na realidade, a multiplicação tensorial de dupla contracção de \mathfrak{S} por um tensor geral de segunda ordem resulta na componente simétrica deste último e não no próprio tensor de segunda ordem [Gangi 2000].

respectivamente. $i, j, k, l = 1, \dots, 3$, δ_{ij} é o símbolo de delta de Kronecker e \mathbf{e}_n , $n = 1, \dots, 3$, denota o enésimo versor do referencial cartesiano ortonormado associado à descrição das entidades tensoriais.

A descrição do comportamento elastoplástico com base na teoria clássica da plasticidade requer, ainda, a definição das seguintes entidades [Khan e Huang 1995, Simo e Hughes 1998]:

1. Critério de plasticidade — é responsável pela definição não só do estado de tensão de um determinado ponto material mas também da transição entre os comportamentos elástico e plástico (superfície de limite de elasticidade);
2. Lei de encruamento — regula, assim que se inicia a deformação plástica, a evolução da superfície de limite de elasticidade de acordo com a evolução da deformação plástica;
3. Lei de plasticidade — relaciona, aquando da ocorrência do fenómeno de plastificação, o tensor das tensões com a evolução do tensor das deformações plásticas;
4. Condição de coerência — obriga a que, aquando da ocorrência de um carregamento envolvendo o fenómeno de plastificação, a evolução da superfície de limite de elasticidade seja tal que nela permaneçam todos os pontos representativos de estados de tensão associados ao desenvolvimento de deformação plástica;
5. Condições de carga-descarga — permitem determinar, após se ter dado início a deformação plástica e em conjunto com a condição de coerência, se a natureza da deformação é ou elástica ou plástica.

Neste contexto, no presente trabalho adoptou-se, por uma questão de simplicidade, um modelo de elastoplasticidade baseado no critério de plasticidade de von Mises [von Mises 1913], com uma lei de plasticidade associada, uma lei de encruamento isotrópico linear, a condição de coerência de Prager e as condições de carga-descarga de Kuhn-Tucker [Kuhn e Tucker 1951]. Este modelo permite uma abordagem simplificada do comportamento de materiais metálicos envolvendo o desenvolvimento de deformação plástica. De facto, não são contemplados vários fenómenos mais complexos, tais como, por exemplo, viscoplasticidade, termoplasticidade, dano, transformações finitas, *etc.* No entanto, não obstante a sua simplicidade, atenda-se ao facto de este modelo ser frequentemente utilizado na modelação do comportamento elastoplástico de materiais metálicos [Doghri 2000].

4.2.1.1 Critério de Plasticidade

O critério de plasticidade de von Mises é um dos mais utilizados na análise de fenómenos de plasticidade em materiais metálicos. A sua vasta utilização deve-se ao facto de a sua natureza, simultaneamente isotrópica e desviadora, se encontrar em conformidade com as constatações experimentais de que, em geral, (i) os materiais metálicos policristalinos são isotrópicos e (ii) a aplicação de uma pressão hidrostática a um material metálico não dá origem a fenómenos de plasticidade. Este critério pode ser definido pela condição

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \varphi_e) = \bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}) - \sigma_Y(\varphi_e) = 0. \quad (4.7)$$

$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma})$ é a tensão equivalente de von Mises, definida por

$$\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s}(\boldsymbol{\sigma}) : \mathbf{s}(\boldsymbol{\sigma})}, \quad (4.8)$$

em que $\mathbf{s} = \mathbf{s}(\boldsymbol{\sigma})$ é o tensor das tensões desviadoras, que corresponde a

$$\mathbf{s}(\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1} \quad (4.9)$$

ou, de modo equivalente, a

$$\mathbf{s}(\boldsymbol{\sigma}) = \left(\mathfrak{S} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) : \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.10)$$

Considerando a norma de Frobenius

$$\|\cdot\| = \sqrt{\cdot : \cdot}, \quad (4.11)$$

a tensão equivalente de von Mises pode, ainda, ser expressa por

$$\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\mathbf{s}(\boldsymbol{\sigma})\|. \quad (4.12)$$

A tensão σ_Y é o limite de elasticidade em tracção simples e φ_e é um parâmetro escalar de encruamento. A equação escalar $f(\boldsymbol{\sigma}, \varphi_e) = 0$ define, no espaço das tensões, a superfície de limite de elasticidade, encontrando-se a inequação $f(\boldsymbol{\sigma}, \varphi_e) < 0$ associada ao domínio elástico. Por outro lado, a condição $f(\boldsymbol{\sigma}, \varphi_e) = 0$ pode corresponder a situações relativas a fenómenos quer de elasticidade quer de plasticidade. Atenda-se ao facto de não serem admissíveis quaisquer estados para os quais se verifique a desigualdade $f(\boldsymbol{\sigma}, \varphi_e) > 0$ [Simo e Hughes 1998].

4.2.1.2 Lei de Encruamento

Considera-se uma evolução da lei de encruamento em que o parâmetro escalar de encruamento, φ_e , corresponde a

$$\bar{\epsilon}^P = \int_0^t \dot{\epsilon}^P dt. \quad (4.13)$$

$\bar{\epsilon}^P$ representa a deformação plástica equivalente³. t é o pseudotempo⁴ e $\dot{\epsilon}^P$ é a taxa pseudotemporal de deformação plástica equivalente, definida por

$$\dot{\epsilon}^P = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\epsilon}^P\|, \quad (4.14)$$

em que $\dot{\epsilon}^P$ é tensor das taxas pseudotemporais de deformação plástica. Neste contexto, a lei de encruamento isotrópico linear é definida por

$$\sigma_Y(\bar{\epsilon}^P) = \sigma_Y^0 + H \bar{\epsilon}^P, \quad (4.15)$$

em que a tensão σ_Y^0 é o valor inicial do limite de elasticidade em tracção simples e $H \in \mathbb{R}^+$ é o módulo de encruamento isotrópico. O encruamento isotrópico caracteriza-se pela expansão uniforme da superfície de limite de elasticidade no espaço das tensões, à medida que decorre o fenómeno de plasticidade.

4.2.1.3 Lei de Plasticidade

A lei de plasticidade associada⁵ é considerada como válida na teoria da deformação plástica para a generalidade dos materiais metálicos [Genevois 1992]. Esta lei pode ser definida por

$$\dot{\epsilon}^P = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}}, \quad (4.16)$$

em que o escalar $\dot{\lambda}$ é designado multiplicador plástico. No caso de o multiplicador plástico ser positivo, *i.e.* quando se verifica a ocorrência de deformação plástica, a equação 4.16 traduz o facto

³É também possível caracterizar a evolução da lei de encruamento com base num outro parâmetro escalar de encruamento, denominado trabalho plástico total. No entanto, para modelos de plasticidade baseados no critério de plasticidade de von Mises, os dois parâmetros de encruamento dão origem aos mesmos resultados [Hinton *et al.* 1992].

⁴Na Secção 2.6 utilizaram-se os caracteres t e t' para denotar o tempo e o pseudotempo, respectivamente. No entanto, por uma questão de simplificação da notação utilizada e atendendo à natureza quase-estática do problema elastoplástico considerado, no presente capítulo adopta-se o carácter t para denotar o pseudotempo.

⁵Uma lei de plasticidade diz-se associada no caso de se utilizar o mesmo potencial para descrever o comportamento plástico em termos quer da superfície de limite de elasticidade quer da deformação plástica [Stoughton 2002].

de o tensor das taxas pseudotemporais de deformação plástica ser normal e exterior à superfície de limite de elasticidade. Por esta razão, a equação 4.16 é usualmente denominada lei da normalidade.

Da derivação de ambos os membros da equação 4.7 em ordem a $\boldsymbol{\sigma}$, tendo em consideração a regra da cadeia utilizada na derivação de funções e atendendo às equações 4.8 e 4.10, resulta, de acordo não só com o carácter desviador de \mathbf{s} mas também com a equação 4.16, que

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^P = \dot{\lambda} \frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\mathbf{s}}. \quad (4.17)$$

Atendendo ao facto de o tensor \mathbf{s} ser desviador, verifica-se, de acordo com a equação 4.17, que

$$\text{tr}(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0, \quad (4.18)$$

o que revela o carácter isocórico da deformação plástica. Por outro lado, de acordo com a expressão 4.12, a equação 4.17 pode ser representada na forma

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^P = \dot{\lambda} \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.19)$$

em que $\hat{\mathbf{n}}$ é um tensor unitário normal e exterior à superfície de limite de elasticidade. Assim, a substituição da equação 4.19 na expressão 4.14 permite verificar que

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^P = \dot{\lambda}. \quad (4.20)$$

A partir das equações 4.16 e 4.19 pode concluir-se, ainda, que

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{n}}. \quad (4.21)$$

4.2.1.4 Condições de Coerência e de Carga-Descarga

A condição de coerência de Prager consiste em

$$\dot{\lambda} \dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0, \quad (4.22)$$

em que $\dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P)$ é a taxa de variação pseudotemporal de $f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P)$. Por outro lado, as condições de carga-descarga de Kuhn-Tucker correspondem a

$$\dot{\lambda} \geq 0, \quad (4.23)$$

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) \leq 0 \quad \text{e} \quad (4.24)$$

$$\dot{\lambda} f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0. \quad (4.25)$$

Tal como foi anteriormente referido, as relações 4.22 a 4.25 permitem determinar, assim que se verifique o início da ocorrência de deformação plástica, se a natureza da deformação é ou elástica ou plástica. De acordo com estas relações, o comportamento do material será⁶:

- Elástico \Leftarrow $f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) < 0 \Rightarrow \dot{\lambda} = 0$ (deformação elástica);
- Elástico \Leftarrow $f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0$ e $\dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) < 0 \Rightarrow \dot{\lambda} = 0$ (descarga elástica);
- Elástico \Leftarrow $f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0$, $\dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0$ e $\dot{\lambda} = 0$ (carga neutra);
- Plástico \Leftarrow $f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0$, $\dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0$ e $\dot{\lambda} > 0$ (carga plástica).

Realce-se o facto de não serem admissíveis quaisquer evoluções para as quais se verifiquem simultaneamente as condições $f(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) = 0$ e $\dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^P) > 0$ [Simo e Hughes 1998].

⁶Por uma questão de simplificação de exposição, para a descrição do comportamento elástico utiliza-se uma linha vertical no sentido disjuntivo e não no sentido usual de conjunção.

4.2.2 Módulo Elastoplástico Tangente

Em termos infinitesimais, atendendo ao carácter incremental da plasticidade, consideram-se as equações 4.1 e 4.3 na forma de taxas pseudotemporais, obtendo-se

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^e + \dot{\epsilon}^p \quad e \quad (4.26)$$

$$\dot{\sigma} = \mathbf{D} : \dot{\epsilon}^e, \quad (4.27)$$

respectivamente. Assim, a substituição das equações 4.16 e 4.26 na expressão 4.27 resulta em

$$\dot{\sigma} = \mathbf{D} : \left(\dot{\epsilon} - \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \sigma} \right). \quad (4.28)$$

Por outro lado, a taxa de variação pseudotemporal de $f(\sigma, \bar{\epsilon}^p)$ corresponde, atendendo à regra da cadeia utilizada na derivação de funções e considerando, com $\varphi_e = \bar{\epsilon}^p$, as equações 4.7, 4.15 e 4.20, a

$$\dot{f}(\sigma, \dot{\lambda}) = \frac{\partial f}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} - H \dot{\lambda}. \quad (4.29)$$

Atendendo ao facto de $\dot{f}(\sigma, \bar{\epsilon}^p)$ ser nula no regime de deformação plástica, substituindo a equação 4.28 na expressão 4.29 e resolvendo em ordem a $\dot{\lambda}$, obtém-se

$$\dot{\lambda} = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{D} : \dot{\epsilon}}{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \sigma} + H}, \quad (4.30)$$

em que a não-singularidade da expressão é garantida pelo facto de o denominador ser estritamente positivo [Simo e Hughes 1998].

Atenda-se ao facto de o multiplicador plástico, por um lado, ser nulo no caso de um comportamento elástico e, por outro lado, corresponder à equação 4.30 no caso de um comportamento plástico. Neste contexto, da substituição da equação 4.30 na expressão 4.28 resulta que

$$\dot{\sigma} = \mathbf{D}^{\text{ep}} : \dot{\epsilon} \quad (4.31)$$

ou, de modo equivalente⁷, que

$$d\sigma = \mathbf{D}^{\text{ep}} : d\epsilon, \quad (4.32)$$

em que o tensor \mathbf{D}^{ep} , denominado módulo elastoplástico tangente, corresponde a

$$\mathbf{D}^{\text{ep}} = \mathbf{D} - \varrho \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{D} \otimes \mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \sigma}}{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \sigma} + H}, \quad (4.33)$$

sendo o parâmetro ϱ definido por

$$\varrho = \begin{cases} 0 & \Leftarrow \dot{\lambda} = 0 \\ 1 & \Leftarrow \dot{\lambda} > 0 \end{cases}. \quad (4.34)$$

Deste modo, o módulo elastoplástico tangente \mathbf{D}^{ep} permite relacionar quer os tensores das taxas pseudotemporais de tensão e de deformação (*cf.* equação 4.31) quer os incrementos (infinitesimais) dos tensores das tensões e das deformações (*cf.* equação 4.32).

⁷Devido ao facto de não se considerarem quaisquer efeitos viscosos, a equação 4.31 é homogénea em t , *i.e.* é invariante relativamente à escala do pseudotempo. Deste modo, as suas representações na forma de taxa pseudotemporal (equação 4.31) e na forma incremental (equação 4.32) são equivalentes [Khan e Huang 1995]. Refira-se que esta equivalência entre as representações na forma de taxa pseudotemporal e na forma incremental se mantém válida para as restantes equações desta secção que envolvam taxas pseudotemporais (*e.g.* equação 4.16).

De acordo com as equações 4.4 e 4.21 verifica-se, atendendo aos caracteres desviador e simétrico de $\hat{\mathbf{n}}$ (cf. equações 4.17 e 4.19), que

$$\mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = 2G \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}}. \quad (4.35)$$

Deste modo, a substituição das relações 4.21 e 4.35 na equação 4.33 permite simplificar a representação de \mathbf{D}^{ep} , obtendo-se

$$\mathbf{D}^{\text{ep}} = \mathbf{D} - \bar{\varrho} \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.36)$$

em que

$$\bar{\varrho} = \begin{cases} 0 & \Leftarrow \dot{\lambda} = 0 \\ \frac{2G}{1 + \frac{H}{3G}} & \Leftarrow \dot{\lambda} > 0 \end{cases}. \quad (4.37)$$

4.3 Problema Elastoplástico

4.3.1 Formulação Diferencial do Problema Elastoplástico

A equação que descreve o problema elastoplástico num meio sólido⁸ $\Omega \in \mathbb{R}^3$, assumindo um processo quase-estático e pequenas transformações, corresponde, considerando um referencial cartesiano ortonormado, a

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega. \quad (4.38)$$

$\boldsymbol{\sigma}$ e \mathbf{f} são o tensor das tensões de Cauchy e o vector das forças volúmicas, respectivamente.

As relações deformações-deslocamentos linearizadas para o problema elastoplástico correspondem, em Ω , à equação 4.2. Neste contexto, no presente problema tem-se, de acordo com o exposto na Secção 4.2, que, em geral, o tensor das tensões de Cauchy, $\boldsymbol{\sigma}$, depende não-linearmente do vector de deslocamentos, \mathbf{u} .

A resolubilidade da equação 4.38 exige a imposição de condições de fronteira associadas ao problema elastoplástico. Em geral, para o problema elastoplástico consideram-se condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann⁹ definidas nas superfícies Γ_{D} e Γ_{N} , respectivamente, com $\Gamma_{\text{D}} \cup \Gamma_{\text{N}} = \Gamma$ e $\Gamma_{\text{D}} \cap \Gamma_{\text{N}} = \emptyset$ ¹⁰, tal como se ilustra na figura 4.1.

As condições de fronteira de Dirichlet correspondem a

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{em } \Gamma_{\text{D}}, \quad (4.39)$$

em que $\bar{\mathbf{u}}$ é o deslocamento prescrito na superfície Γ_{D} . Por outro lado, as condições de fronteira de Neumann, definidas por

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{em } \Gamma_{\text{N}}, \quad (4.40)$$

representam a prescrição de força superficial $\bar{\mathbf{t}}$ na superfície Γ_{N} . \mathbf{n} é um versor normal exterior à superfície Γ . Refira-se ainda que, por uma questão de simplificação, na abordagem apresentada do problema elastoplástico não foi considerada a existência de múltiplos materiais¹¹.

⁸O meio sólido ocupa o conjunto aberto $\bar{\Omega} \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ . A resolução do problema elastoplástico corresponde à determinação de \mathbf{u} em $\bar{\Omega}$, sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ o fecho de Ω .

⁹Tal como para o problema de termoelasticidade (vd. Secção 3.2), é possível definir condições de fronteira de Robin para o problema de elastoplasticidade. Fisicamente, estas correspondem à existência de uma fundação elástica em contacto com uma parte da fronteira Γ . Porém, dada a natureza peculiar deste tipo de condição de fronteira, não se consideram, sem perda de generalidade, condições de fronteira de Robin no problema elastoplástico.

¹⁰Por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, as superfícies Γ_{D} e Γ_{N} são consideradas disjuntas, i.e. tais que $\Gamma_{\text{D}} \cap \Gamma_{\text{N}} = \emptyset$ (cf. figura 4.1). No entanto, numa situação geral, as prescrições de deslocamento e de força superficial podem coexistir simultaneamente em diferentes graus de liberdade de um determinado ponto da fronteira Γ , sendo $\Gamma_{\text{D}} \cap \Gamma_{\text{N}} \neq \emptyset$.

¹¹No caso de existirem n materiais distintos, o problema elastoplástico é constituído por n equações análogas à equação 4.38. Todavia, para além das condições de fronteira já consideradas, deverão impor-se ainda condições de continuidade de deslocamentos e de forças superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios.

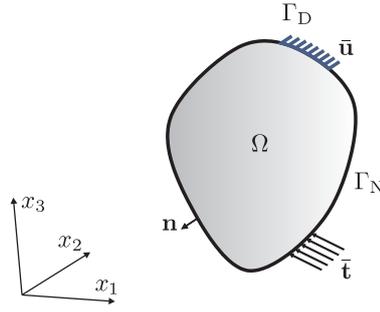


Figura 4.1: Representação esquemática das condições de fronteira associadas ao problema elastoplástico num corpo sólido Ω .

A resolução numérica por elementos finitos do problema elastoplástico associado à equação diferencial 4.38 com base no método dos elementos finitos requer a obtenção da sua formulação integral fraca.

4.3.2 Formulação Integral Fraca do Problema Elastoplástico

No presente trabalho utiliza-se o princípio dos deslocamentos virtuais para se obter a formulação integral fraca do problema elastoplástico.

Seja $\delta \mathbf{u}$ um campo arbitrário de deslocamentos virtuais contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D . Neste contexto, efectuando o produto (tensorial) escalar da equação de equilíbrio 4.38 pelo campo $\delta \mathbf{u}$ e integrando no domínio Ω , obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot [\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f}] \, d\Omega = 0. \quad (4.41)$$

Devido à natureza arbitrária do campo de deslocamentos virtuais tem-se que a formulação integral forte 4.41 é equivalente à formulação diferencial (forte) 4.38. Substituindo na equação 4.41 a identidade

$$\delta \mathbf{u} \cdot \text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \quad (4.42)$$

e reorganizando os seus termos, obtém-se

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Omega} \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega. \quad (4.43)$$

A aplicação do teorema da divergência ao último termo do segundo membro da equação 4.43 resulta em

$$\int_{\Omega} \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega = \int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (4.44)$$

No entanto, sendo $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ e $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D , tem-se que

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma = \int_{\Gamma_N} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (4.45)$$

A substituição das equações 4.40, 4.44 e 4.45 na equação 4.43 resulta em

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (4.46)$$

Por outro lado, atendendo à simetria de $\boldsymbol{\sigma}$, tem-se que

$$\text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} = \delta \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.47)$$

em que

$$\delta\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\text{grad}(\delta\mathbf{u}) + [\text{grad}(\delta\mathbf{u})]^T \right] \quad (4.48)$$

é o campo de deformações virtuais. A substituição da equação 4.47 na expressão 4.46 resulta em

$$\int_{\Omega} \delta\boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int_{\Omega} \delta\mathbf{u} \cdot \mathbf{f} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \delta\mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} d\Gamma. \quad (4.49)$$

A equação integral 4.49 corresponde ao princípio dos deslocamentos virtuais para o problema elastoplástico associado à equação 4.38. Segundo este princípio, para que \mathbf{u} — um campo de deslocamentos contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ em Γ_D — seja a solução do problema elastoplástico, a equação 4.49 deverá verificar-se para qualquer campo arbitrário de deslocamentos virtuais $\delta\mathbf{u}$ contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta\mathbf{u} = 0$ em Γ_D . Atenda-se ao facto de, ao serem assumidas pequenas transformações, *i.e.* transformações infinitesimais, a equação integral 4.49 resulta geometricamente linear. Deste modo, as configurações do volume Ω e da superfície Γ_N são consideradas invariantes, pelo que qualquer não-linearidade associada à equação 4.49 advém única e exclusivamente da natureza não-linear da relação entre a tensão e a deformação ou, de acordo com a equação 4.2, entre a tensão e o deslocamento (não-linearidade material).

Após se ter obtido a formulação fraca do problema elastoplástico procede-se à sua discretização espacial por elementos finitos.

4.3.3 Discretização Espacial por Elementos Finitos

Procedendo à decomposição do domínio Ω numa malha de elementos finitos, aproxima-se o campo global de deslocamentos por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{U} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.50)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_{\Gamma}(\mathbf{x}) \mathbf{U} \quad \text{em } \Gamma. \quad (4.51)$$

\mathbf{N} e \mathbf{N}_{Γ} constituem as matrizes globais de funções de forma (*i.e.* de interpolação) no domínio Ω e na superfície Γ , respectivamente. \mathbf{U} é o vector dos deslocamentos nodais, em que as componentes relativas aos nós associados a Γ_D correspondem a valores de deslocamento prescrito.

Por outro lado, na discretização espacial assume-se que o campo global de deslocamentos virtuais é aproximado por

$$\delta\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta\mathbf{U} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.52)$$

$$\delta\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_{\Gamma}(\mathbf{x}) \delta\mathbf{U} \quad \text{em } \Gamma, \quad (4.53)$$

em que $\delta\mathbf{U}$ corresponde ao vector dos deslocamentos virtuais nodais, sendo nulas as componentes relativas aos nós associados a Γ_D . Neste contexto, a substituição das equações 4.48, 4.52 e 4.53 na equação 4.49 permite obter, atendendo à arbitrariedade do campo de deslocamentos virtuais e utilizando notação matricial, a equação discretizada de equilíbrio elastoplástico, isto é,

$$\mathbf{I} = \mathbf{F}. \quad (4.54)$$

\mathbf{I} e \mathbf{F} são os vectores de forças internas e de forças externas, respectivamente, que correspondem a

$$\mathbf{I} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega \quad \text{e} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{F}_f + \mathbf{F}_N + \mathbf{R}_N \\ &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}_{\Gamma}^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma + \sum_{k=1}^{n_r} (\bar{\mathbf{R}}_N)_k. \end{aligned} \quad (4.56)$$

\mathbf{B} é a matriz global das derivadas parciais das funções de forma. \mathbf{F}_f e \mathbf{F}_N correspondem aos vectores de forças distribuídas no volume Ω e na superfície Γ_N , respectivamente. \mathbf{R}_N representa o vector de forças pontuais¹² (nodais), constituído por n_r forças prescritas \mathbf{R}_N .

4.3.4 Integração Implícita da Equação Discretizada

De acordo com o que foi anteriormente referido (*vd.* Secção 2.6), no regime estacionário não faz sentido falar em integração temporal, uma vez que se assume uma invariância temporal das variáveis envolvidas no problema numérico em questão. No entanto, a natureza não-linear do comportamento elastoplástico requer a utilização de um processo incremental em que se discretiza o nível de carga mecânica (pseudotempo). Assim, em vez de se resolver o problema não-linear original de uma só vez, procede-se à resolução de subproblemas em que a solução é inicialmente aproximada de modo linear e posteriormente corrigida, se for necessário, recorrendo a um método iterativo. Neste contexto, com base nos vectores de forças internas, $\mathbf{I}(\mathbf{U})$, e de forças externas¹³, \mathbf{F} , define-se o resíduo

$$\mathbf{R}(\mathbf{U}) = \mathbf{F} - \mathbf{I}(\mathbf{U}). \quad (4.57)$$

Neste contexto, sejam \mathbf{F}_t e $\mathbf{I}_t = \mathbf{I}(\mathbf{U}_t)$ os vectores que definem o estado de equilíbrio mecânico num pseudo-instante t (*cf.* equação 4.38). A este estado corresponde o resíduo

$$\mathbf{R}_t = \mathbf{F}_t - \mathbf{I}_t = \mathbf{0}, \quad (4.58)$$

em que $\mathbf{R}_t = \mathbf{R}(\mathbf{U}_t)$. O processo incremental consiste em definir um novo estado de carga mecânica, $\mathbf{F}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_t + \Delta\mathbf{F}_{t+\Delta t}$, e determinar $\mathbf{U}_{t+\Delta t} = \mathbf{U}_t + \Delta\mathbf{U}_{t+\Delta t}$ tal que

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{I}_{t+\Delta t} = \mathbf{0}. \quad (4.59)$$

No entanto, a natureza não-linear do problema inviabiliza, de um modo geral, a obtenção directa da solução, pelo que o resíduo da equação 4.59 deverá então ser minimizado recorrendo a um método iterativo. Tal como foi anteriormente referido (*vd.* Secção 2.6), no método iterativo de Newton-Raphson assume-se um comportamento linear para o resíduo na vizinhança da solução previamente obtida. O desenvolvimento linear do resíduo na vizinhança de \mathbf{U} para a iteração $i+1$, $i \in \mathbb{N}_0$, de um pseudo-instante incremental $t + \Delta t$ corresponde a

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{R}_{t+\Delta t}^i + \left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.60)$$

Conforme se ilustra esquematicamente na figura 4.2, com o método iterativo de Newton-Raphson procura-se melhorar a aproximação à solução, considerando que

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{0}, \quad (4.61)$$

em que os deslocamentos nodais são actualizados de acordo com

$$\mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{U}_{t+\Delta t}^i + \delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.62)$$

¹²As forças pontuais (nodais) correspondem a forças aplicadas em subsuperfícies infinitesimais de Γ_N . Estas foram omitidas, sem perda de generalidade, na formulação diferencial do problema elastoplástico por uma questão de simplificação.

¹³Atenda-se ao facto de, com base na hipótese de linearidade geométrica e, em particular, da invariância da configuração da superfície Γ_N , resultar que o vector de forças externas \mathbf{F} é independente do vector de deslocamentos nodais \mathbf{U} .

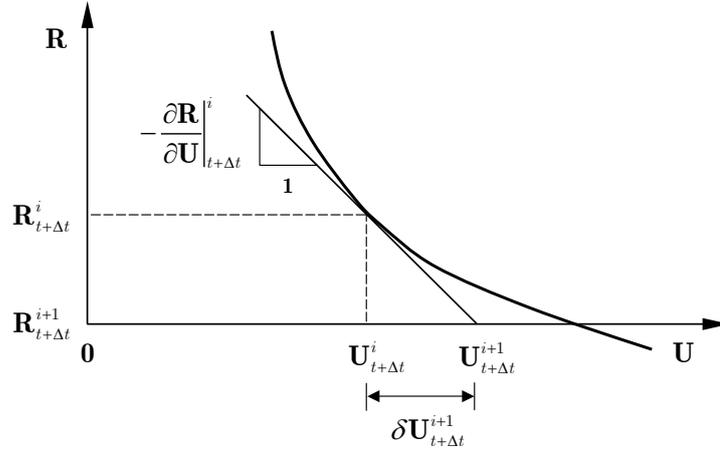


Figura 4.2: Representação unidimensional do processo de eliminação do resíduo no método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas mecânicos em regime de elastoplasticidade quase-estática.

De acordo com a figura 4.2, a matriz tangente à curva do resíduo — a matriz jacobiana de \mathbf{R} — corresponde, para $\mathbf{U} = \mathbf{U}_{t+\Delta t}^i$, a

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i = \frac{\mathbf{0} - \mathbf{R}_{t+\Delta t}^i}{\mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1} - \mathbf{U}_{t+\Delta t}^i}. \quad (4.63)$$

Assim, as equações 4.62 e 4.63 permitem concluir que a equação da correcção iterativa dos deslocamentos nodais corresponde a

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1} = -\mathbf{R}_{t+\Delta t}^i. \quad (4.64)$$

No entanto, de acordo com a equação 4.57 tem-se que

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i = \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i - \left. \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i, \quad (4.65)$$

A equação 4.65 define a matriz jacobiana de \mathbf{R} associada a uma linearização exacta do princípio dos deslocamentos virtuais em torno do último estado de deslocamentos referente ao ciclo iterativo. Assim, de acordo com as expressões 4.57, 4.64 e 4.65 obtém-se a seguinte equação de correcção iterativa dos deslocamentos nodais:

$$\mathbf{K}_{\mathbf{T}}|_{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{I}_{t+\Delta t}^i, \quad (4.66)$$

em que a matriz tangente associada ao processo iterativo corresponde a

$$\mathbf{K}_{\mathbf{T}}|_{t+\Delta t}^i = \left. \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i. \quad (4.67)$$

Substituindo a expressão 4.55 na equação 4.67, considerando a regra da cadeia utilizada na derivação de funções e atendendo ao facto de o problema ser geometricamente linear, obtém-se

$$\mathbf{K}_{\mathbf{T}}|_{t+\Delta t}^i = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \right|_{t+\Delta t}^i \left. \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{t+\Delta t}^i d\Omega. \quad (4.68)$$

Atendendo à relação deformação-deslocamento:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^i = \mathbf{B}\mathbf{U}_{t+\Delta t}^i, \quad (4.69)$$

a equação 4.68 corresponde, atendendo quer à expressão 4.32 quer à invariância de \mathbf{B} , a

$$\mathbf{K}_T|_{t+\Delta t}^i = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D}^{\text{ep}}|_{t+\Delta t}^i \mathbf{B} d\Omega, \quad (4.70)$$

em que

$$\mathbf{D}^{\text{ep}}|_{t+\Delta t}^i = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \right|_{t+\Delta t}^i \quad (4.71)$$

é a matriz elastoplástica tangente associada à iteração $i + 1$ do pseudo-instante incremental $t + \Delta t$. Para que a convergência do método de Newton-Raphson seja quadrática, a matriz elastoplástica tangente deve ser substituída pela matriz elastoplástica (tangente) coerente¹⁴. Estas matrizes correspondem, em termos tensoriais, ao módulo elastoplástico tangente (*vd.* equação 4.33) e ao módulo elastoplástico coerente, respectivamente. Os algoritmos numéricos relativos ao cálculo quer do vector de forças internas, \mathbf{I} , quer da matriz tangente associada ao processo iterativo, \mathbf{K}_T , serão abordados, de modo oportuno, em secções subsequentes.

No processo iterativo definem-se

$$\mathbf{F}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_t + \Delta \mathbf{F}_{t+\Delta t}, \quad (4.72)$$

como o vector de forças externas, e

$$\mathbf{I}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{I}_t, \quad (4.73)$$

$$\mathbf{U}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{U}_t, \quad (4.74)$$

$$\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{I}_{t+\Delta t}^0 \quad \text{e} \quad (4.75)$$

$$\mathbf{K}_T|_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{K}_T|_t \quad (4.76)$$

como valores iniciais do vector de forças internas, do vector de deslocamentos nodais, do resíduo (vectorial) e da matriz tangente de rigidez, respectivamente. Posteriormente, procede-se à determinação da variação dos deslocamentos nodais recorrendo à equação 4.66, actualizando-se então o valor dos deslocamentos nodais, de acordo com a relação 4.62. Em seguida, com base no valor actualizado dos deslocamentos nodais calculam-se quer o novo vector de forças internas, de acordo com a relação 4.55, quer a nova matriz tangente associada ao processo iterativo, com base na relação¹⁵ 4.70. Este procedimento deverá ser repetido até que se atinja a convergência (*e.g.* $\|\delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}\|$ menor que um valor predefinido). Na figura 4.3 representa-se um esquema unidimensional do processo iterativo do método de Newton-Raphson para um problema elastoplástico em que a solução num determinado incremento é atingida em três iterações.

O algoritmo de Newton-Raphson para problemas mecânicos de elastoplasticidade quase-estática encontra-se ilustrado na tabela 4.1.

4.3.5 Critérios de Convergência e de Paragem

De acordo com o que foi referido na Secção 2.7, a utilização eficiente do método iterativo de Newton-Raphson exige que se recorra a critérios de convergência e de paragem. Neste contexto, para o problema de elastoplasticidade quase-estática consideram-se dois tipos distintos de critérios de convergência:

¹⁴Do inglês: *consistent*.

¹⁵Tal como foi referido, para que a convergência do método de Newton-Raphson seja quadrática, a matriz elastoplástica coerente deverá substituir a matriz elastoplástica tangente na equação 4.70.

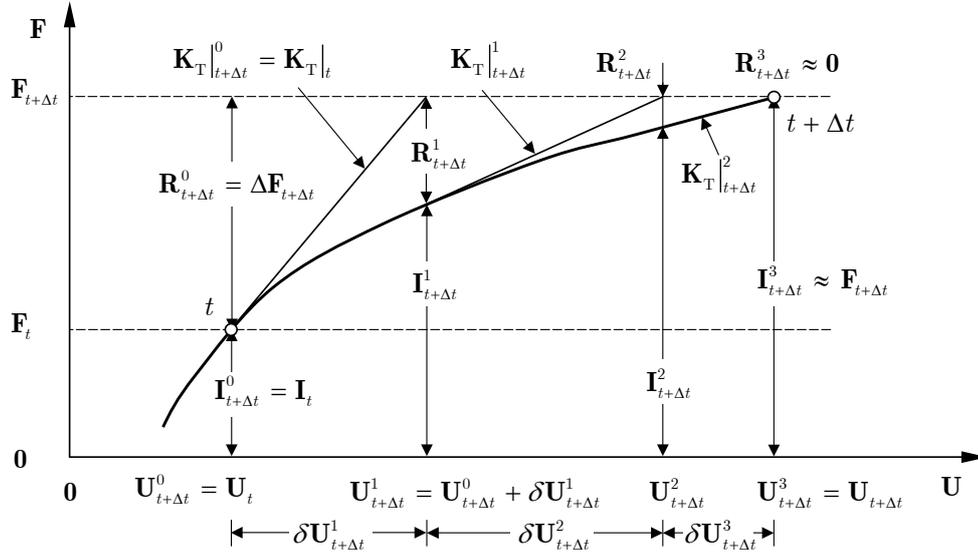


Figura 4.3: Representação esquemática do processo iterativo do método de Newton-Raphson, na resolução implícita de problemas mecânicos em regime de elastoplasticidade quase-estática.

Tabela 4.1: Algoritmo de Newton-Raphson para resolução implícita de problemas mecânicos em regime de elastoplasticidade quase-estática.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Iniciação de variáveis: <ol style="list-style-type: none"> 1.1 $\mathbf{F}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}_t + \Delta \mathbf{F}_{t+\Delta t}$ 1.2 $\mathbf{I}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{I}_t$ 1.3 $\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{I}_{t+\Delta t}^0$ 1.4 $\mathbf{U}_{t+\Delta t}^0 = \mathbf{U}_t$ 1.5 $\mathbf{K}_T _{t+\Delta t}^0 = \mathbf{K}_T _t$ 2. REPETIR — Ciclo iterativo em $i = 0, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 2.1 Cálculo de $\delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}$ por $\mathbf{K}_T _{t+\Delta t}^i \delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{R}_{t+\Delta t}^i$ 2.2 Actualização dos deslocamentos: $\mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{U}_{t+\Delta t}^i + \delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}$ 2.3 Cálculo de $\mathbf{I}_{t+\Delta t}^{i+1}$ e $\mathbf{K}_T _{t+\Delta t}^{i+1}$ para $\mathbf{U} = \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}$ 2.4 Cálculo do resíduo $\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{I}_{t+\Delta t}^{i+1}$ <p>ATÉ convergência OU paragem</p>
--

1. Critérios baseados na magnitude das correcções da variável que controla o processo (*e.g.* a magnitude dos deslocamentos no processo mecânico);
2. Critérios baseados na magnitude do resíduo.

Assim, foram considerados os seguintes critérios baseados na magnitude das correcções da variável que controla o processo:

$$\|\delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+2}\| \leq \varepsilon_{\text{tol}} \|\delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^1\| \quad \text{e} \quad (4.77)$$

$$\text{máx} \left(|\delta U_{t+\Delta t}^{i+2}|_k \right) \leq \varepsilon_{\text{tol}} \|\delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^1\|. \quad (4.78)$$

$\|\cdot\|$ designa a norma euclidiana de um vector e $i \in \mathbf{N}_0$. ε_{tol} é um parâmetro¹⁶ de tolerância predefinido e $k = 1, \dots, N_{\text{nós}}$, em que $N_{\text{nós}}$ corresponde ao número de componentes do vector $\mathbf{U}_{t+\Delta t}$.

Por outro lado, considerou-se o seguinte critério baseado na magnitude do resíduo:

$$\|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1}\| \leq \varepsilon_{\text{tol}} \|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0\|. \quad (4.79)$$

Analogamente ao que foi anteriormente referido na Secção 2.7, tem-se que as condições 4.77 e 4.78 verificam quando é que as sucessivas iterações se traduzem em variações insignificantes da variável de controlo. No entanto, embora estas condições sejam de fácil implementação e envolvam um esforço computacional reduzido, não se revelam eficazes em situações em que o esquema iterativo possa convergir (ou divergir) de um modo muito lento. Por outro lado, a condição 4.79 controla a magnitude do resíduo, verificando quando é que a sua norma se torna suficientemente pequena. A simplicidade da implementação deste critério advém do facto de o vector $\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1}$ ser obtido em cada iteração. Todavia, este critério revela-se insensível à taxa de variação do resíduo. Neste contexto, a utilização simultânea dos diferentes tipos de critério (*cf.* inequações 4.77 a 4.79) permite um controlo mais versátil e eficaz da convergência de um processo iterativo.

Por outro lado, de modo a evitar situações em que a não-convergência ou a convergência lenta do processo iterativo resulte num tempo despendido em cálculo computacional excessivo, foram considerados dois tipos distintos de critério de paragem. O primeiro critério de paragem adoptado neste trabalho consiste na finalização do ciclo iterativo, assim que o número de iterações efectuadas, N , atinja o número máximo de iterações admissível:

$$N = N_{\text{máx}}. \quad (4.80)$$

Com base na magnitude do resíduo, foi também implementado um critério de paragem que visa a finalização do ciclo iterativo sempre que se verifiquem oscilações numéricas de magnitude excessiva ou, inclusive, a divergência da solução, isto é,

$$\|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^{i+1}\| \geq \frac{1}{\varepsilon_{\text{tol}}} \|\mathbf{R}_{t+\Delta t}^0\|. \quad (4.81)$$

4.4 Elastoplasticidade Clássica — Formulação Discreta

No processo iterativo de Newton-Raphson (*vd.* tabela 4.1), após a determinação da correcção iterativa dos deslocamentos nodais $\delta \mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}$ (*cf.* equação 4.66) e a actualização dos deslocamentos nodais $\mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}$ (*cf.* equação 4.62), verificou-se ser necessário proceder, em cada iteração, ao cálculo quer do vector de forças internas, $\mathbf{I}_{t+\Delta t}^{i+1}$, quer da matriz tangente de rigidez associada ao processo iterativo, $\mathbf{K}_T|_{t+\Delta t}^{i+1}$. A obtenção do vector de forças internas requer, de acordo com a equação 4.55, a

¹⁶De acordo com o referido na Secção 2.7, nesta secção faz-se, por uma questão de simplificação, referência a um único parâmetro de tolerância, ε_{tol} , podendo, na prática, serem considerados diferentes valores de ε_{tol} para cada um dos critérios.

integração (pseudotemporal) da lei de comportamento elastoplástico. O cálculo da matriz tangente de rigidez na iteração $i + 1$ do pseudo-instante incremental $t + \Delta t$ envolve a consideração, de acordo com a equação 4.70 para $i \leftarrow i + 1$, da matriz elastoplástica tangente. No entanto, para que a convergência do método de Newton-Raphson seja quadrática, é necessário substituir a matriz elastoplástica tangente pela matriz elastoplástica coerente (*cf.* Secção 4.3.4).

Neste contexto, nas secções seguintes são abordados, de modo sucinto, o algoritmo de integração adoptado e a formulação do módulo elastoplástico coerente associado ao modelo de elastoplasticidade clássica.

4.4.1 Integração Implícita da Lei de Comportamento Elastoplástico

A integração pseudotemporal da lei de comportamento elastoplástico pode ser efectuada recorrendo a vários métodos baseados em um ou mais passos de tempo [Hogge 1981, Zienkiewicz e Taylor 1998]. No presente trabalho, procede-se à integração pseudotemporal do problema elastoplástico recorrendo a um dos métodos baseados num só passo de tempo. De entre estes, destacam-se a lei generalizada dos trapézios e a lei generalizada do ponto médio [Ortiz e Popov 1985]. Estes métodos podem ser, em conformidade com o que foi referido na Secção 2.5, explícitos, semi-implícitos ou implícitos. No caso de serem implícitos, os métodos da lei generalizada dos trapézios e da lei generalizada do ponto médio degeneram¹⁷ no denominado algoritmo de retorno radial. Devido à sua natureza implícita, este algoritmo, inicialmente proposto por Wilkins [Wilkins 1964] e posteriormente desenvolvido por Krieg e Krieg [Krieg e Krieg 1977], apresenta a característica de ser incondicionalmente estável. Neste contexto, neste trabalho adopta-se o algoritmo de retorno radial para se proceder à integração pseudotemporal da lei de comportamento elastoplástico.

Na prática, a consideração de método implícito de integração pseudotemporal leva a que as equações do modelo de elastoplasticidade sejam expressas em termos de incrementos de pseudo-tempo e não das taxas pseudotemporais correspondentes. Por outro lado, o processo de integração implícita é utilizado, em cada iteração do processo iterativo de Newton-Raphson, para o cálculo do vector de forças internas. Aquando do processo iterativo de Newton-Raphson, após a actualização dos deslocamentos nodais $\mathbf{U}_{t+\Delta t}^{i+1}$, é possível determinar, de acordo com a equação 4.69 para $i \leftarrow i + 1$, o incremento do tensor das deformações, $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1} - \boldsymbol{\epsilon}_t$. Neste contexto, o processo de integração implícita consiste num algoritmo numérico, simbolicamente designado F , que permite, para a iteração $i + 1$, $i \in \mathbb{N}_0$, de um pseudo-instante incremental $t + \Delta t$, a determinação do tensor das tensões $\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}$ a partir do conhecimento do incremento actual do tensor (local¹⁸) das deformações $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}$ e dos valores prévios (de equilíbrio) dos tensores das deformações $\boldsymbol{\epsilon}_t$ e das deformações plásticas $\boldsymbol{\epsilon}_t^p$, e da deformação plástica equivalente $\bar{\epsilon}_t^p$. Deste modo, o processo de integração implícita pode ser simbolicamente representado pela relação¹⁹

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = F \left(\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}, \boldsymbol{\epsilon}_t, \boldsymbol{\epsilon}_t^p, \bar{\epsilon}_t^p \right). \quad (4.82)$$

A necessidade de se utilizar o processo de integração implícita deve-se ao facto de não se conhecer, *a priori*, a fracção de natureza plástica do incremento actual do tensor das deformações $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}$. Neste contexto, numa primeira fase — previsão elástica — assume-se que o incremento actual do tensor das deformações é totalmente elástico, sendo o estado de tensão calculado com base na lei de comportamento elástico. Posteriormente, verifica-se, com base no critério de plasticidade, se o estado de tensão obtido se encontra na superfície de limite de elasticidade ou no seu interior.

¹⁷Na realidade, os métodos da lei generalizada dos trapézios e da lei generalizada do ponto médio coincidem para um modelo de elastoplasticidade baseado no critério de plasticidade de von Mises, com uma lei de plasticidade associada e uma lei de encruamento isotrópico linear [Ortiz e Popov 1985].

¹⁸Numericamente, o processo de integração implícita é efectuada ao nível dos pontos (de integração) de Gauss dos elementos finitos. Deste modo, este processo tem uma natureza intrinsecamente local, em contraste com o processo de resolução da equação de equilíbrio baseada no método de Newton-Raphson, que, ao estender-se à totalidade da estrutura em análise, apresenta uma natureza global.

¹⁹Atenda-se ao facto de, no processo de integração implícita, o tensor das tensões $\boldsymbol{\sigma}_t$ ser, de acordo com as equações 4.1 e 4.3, uma variável dependente [Simo e Hughes 1998].

Em caso afirmativo, a hipótese de o incremento actual do tensor das deformações ser totalmente elástico é verdadeira, sendo correcto o estado de tensão obtido. Em caso negativo, o hipotético estado de tensão encontra-se no exterior da superfície de limite de elasticidade, o que, de acordo com a teoria da plasticidade, não é admissível. Isto significa que ocorreu o fenómeno de plasticidade, sendo necessário prosseguir para uma segunda fase do processo numérico — correcção plástica —, em que o novo estado (admissível) de tensão é determinado com base num processo de retorno à superfície de limite de elasticidade.

4.4.1.1 Algoritmo de Retorno Radial

Considerando a relação 4.1, a equação 4.3 corresponde, para a iteração $i + 1$, $i \in \mathbb{N}_0$, de um pseudo-instante incremental $t + \Delta t$, a

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{D} : \left[(\boldsymbol{\epsilon}_t + \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}) - \left(\boldsymbol{\epsilon}_t^p + \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1} \right) \right]. \quad (4.83)$$

O processo de previsão elástica consiste, tal como foi referido, em considerar que o incremento do tensor das deformações $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}$ é totalmente elástico, pelo que os incrementos do tensor das deformações plásticas, $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1}$, e da deformação plástica equivalente, $\Delta \bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1}$, são nulos. Assim, o estado de tensão elástica é caracterizado pelo tensor das tensões-tentativa²⁰, definido por

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1} = \mathbf{D} : \left[(\boldsymbol{\epsilon}_t + \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}) - \boldsymbol{\epsilon}_t^p \right]. \quad (4.84)$$

No caso de se verificar a condição

$$f \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1}, \bar{\epsilon}_t^p \right) = \bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1} \right) - \sigma_Y \left(\bar{\epsilon}_t^p \right) \leq 0, \quad (4.85)$$

a hipótese de o incremento do tensor das deformações $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}$ ser totalmente elástico é verdadeira, pelo que, em termos de actualização de variáveis, se tem

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1}, \quad (4.86)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1} = \boldsymbol{\epsilon}_t^p \quad \text{e} \quad (4.87)$$

$$\bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1} = \bar{\epsilon}_t^p. \quad (4.88)$$

No entanto, se, pelo contrário, se tem que

$$f \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1}, \bar{\epsilon}_t^p \right) = \bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1} \right) - \sigma_Y \left(\bar{\epsilon}_t^p \right) > 0, \quad (4.89)$$

então a hipótese de o incremento do tensor das deformações $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}$ ser totalmente elástico é falsa. Deste modo, ocorreu a formação de deformação plástica, pelo que é necessário proceder à fase de correcção plástica, determinando-se o estado de tensão que verifique o critério de plasticidade, *i.e.* tal que $f \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}, \bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1} \right) = 0$. A equação 4.83 corresponde, atendendo à equação 4.84, a

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1} - \mathbf{D} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1}. \quad (4.90)$$

Tomando em consideração a equação 4.4 e os caracteres desviador e simétrico de $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1}$, a equação 4.90 resulta em

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1} - 2G \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{p,i+1}, \quad (4.91)$$

pelo que

$$\frac{1}{3} \text{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \right) \mathbf{1} = \frac{1}{3} \text{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{\text{te},i+1} \right) \mathbf{1}. \quad (4.92)$$

²⁰Do inglês: *trial stress tensor*.

Assim, de acordo com a equação 4.84, a componente hidrostática do tensor das tensões não constitui uma incógnita na fase de correcção plástica do algoritmo de retorno radial. Deste modo, basta proceder-se ao cálculo da componente desviadora do tensor das tensões, que, de acordo com as equações 4.9, 4.91 e 4.92, corresponde a

$$\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} - 2G \Delta \epsilon^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.93)$$

Por outro lado, a equação 4.20 corresponde, em termos incrementais, a

$$\Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.94)$$

Deste modo, a discretização da equação 4.19 corresponde, após a substituição da expressão 4.94, a

$$\Delta \epsilon^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.95)$$

Atendendo às expressões 4.12, 4.17 e 4.19, a substituição da equação 4.95 na equação 4.93 resulta em

$$\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} - \sqrt{6}G \Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1}}{\|\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1}\|} \quad (4.96)$$

ou, de modo equivalente, em

$$\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}) \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1} = \bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}) \hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} - 3G \Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.97)$$

$\hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}$ é um tensor unitário normal e exterior à superfície de limite de elasticidade, que corresponde a

$$\hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}}{\|\mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}\|}. \quad (4.98)$$

A equação 4.96 define, em termos das tensões desviadoras, a fase de correcção plástica do algoritmo de retorno radial, cuja representação esquemática, no plano desviador Π , se encontra ilustrada na figura 4.4. A correspondente interpretação geométrica do algoritmo de retorno radial no espaço das tensões principais encontra-se ilustrada na figura 4.5.

Por outro lado, a relação 4.97 implica, em termos tensoriais, que

$$\hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1} = \hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.99)$$

Deste modo, tem-se, em termos estritamente escalares, que

$$\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}) = \bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}) - 3G \Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.100)$$

No entanto, de acordo com a equação 4.15, o critério de plasticidade obriga a que

$$f(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}, \bar{\epsilon}_t^{\text{P}} + \Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1}) = \bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}) - \sigma_{\text{Y}}^0 - H(\bar{\epsilon}_t^{\text{P}} + \Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1}) = 0, \quad (4.101)$$

pelo que o incremento da deformação plástica equivalente corresponde²¹, de acordo com a equação 4.100, a

$$\Delta \bar{\epsilon}^{\text{P}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}) - \sigma_{\text{Y}}^0 - H \bar{\epsilon}_t^{\text{P}}}{3G + H}. \quad (4.102)$$

²¹No caso de se considerar uma lei de encruamento isotrópico não-linear, a equação associada ao critério de plasticidade (análoga à expressão 4.101) resulta não-linear. Deste modo, a sua resolução pode ser efectuada recorrendo ao método de Newton-Raphson. Nesta situação, as iterações são geralmente denominadas locais, em oposição às iterações associadas à resolução da equação de equilíbrio discretizada, que são denominadas globais.

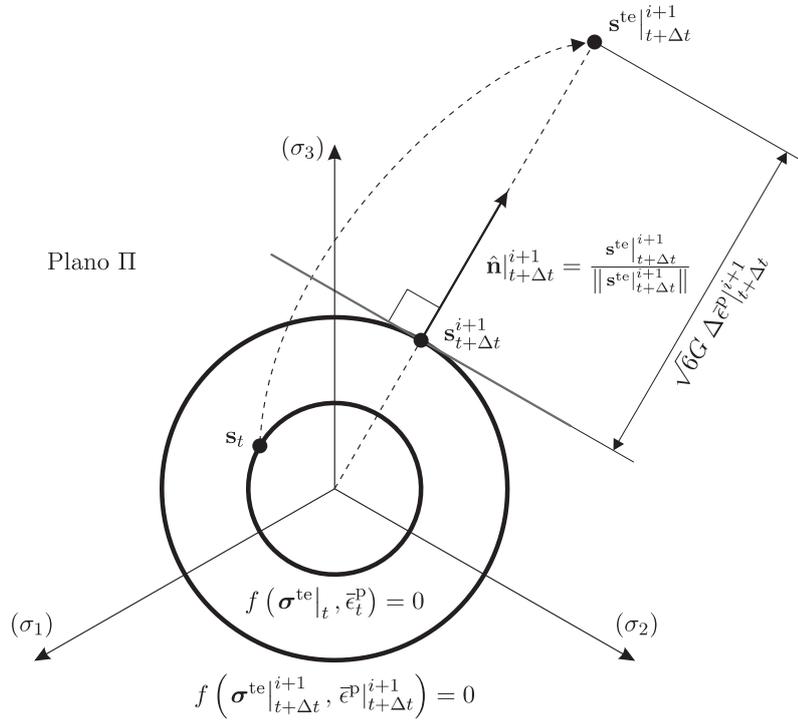


Figura 4.4: Representação esquemática, no plano desviador Π , do algoritmo de retorno radial associado ao modelo de elastoplasticidade clássica.

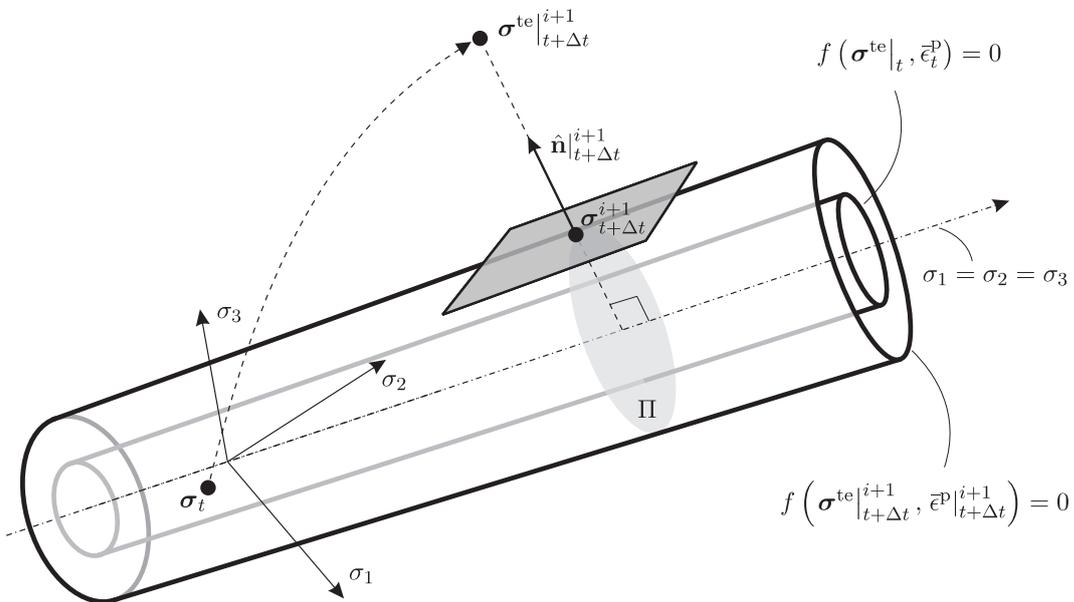


Figura 4.5: Interpretação geométrica, no espaço das tensões principais, do algoritmo de retorno radial associado ao modelo de elastoplasticidade clássica.

De acordo com o exposto, a actualização das variáveis associadas à fase de correcção plástica pode ser obtida pelas relações

$$\bar{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1} = \bar{\epsilon}_t^p + \Delta \bar{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1}, \quad (4.103)$$

$$\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}) = \sigma_Y^0 + H \bar{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1}, \quad (4.104)$$

$$\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1} = \bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}) \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}, \quad (4.105)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1} + \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}) \mathbf{1} \quad \text{e} \quad (4.106)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\epsilon}_t^p + \Delta \bar{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1} \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.107)$$

O algoritmo de integração implícita da lei de comportamento elastoplástico — algoritmo de retorno radial — implementado para a resolução de problemas mecânicos de elastoplasticidade quase-estática encontra-se ilustrado na tabela 4.2.

4.4.2 Módulo Elastoplástico Coerente

Em termos gerais, a necessidade da substituição da matriz elastoplástica tangente pela matriz elastoplástica coerente advém, em última instância, da natureza discreta do método dos elementos finitos, nomeadamente do facto de este método envolver a utilização de incrementos finitos das variáveis associadas ao problema numérico. De facto, a consideração, na resolução de problemas pseudotemporalmente discretizados, da matriz elastoplástica tangente, que é definida em termos de relações incrementais de natureza infinitesimal, pode resultar num processo numérico que não se revele óptimo do ponto de vista computacional. Neste caso, a utilização de uma matriz tangente constitutiva com a qual se tomem em consideração não só as características gerais da matriz elastoplástica tangente mas também as peculiaridades associadas à utilização de técnicas de discretização (finita) pseudotemporal permite otimizar o desempenho numérico do método de Newton-Raphson, ao garantir a sua convergência quadrática. Neste contexto, no presente trabalho utiliza-se a matriz elastoplástica coerente como matriz tangente constitutiva do comportamento elastoplástico. A noção de matriz coerente remonta aos trabalhos de Hughes e Taylor [Hughes e Taylor 1978] e de Nagtegaal [Nagtegaal 1982]. Posteriormente, Simo e Taylor procederam ao desenvolvimento da matriz elastoplástica coerente [Simo e Taylor 1985]. Tal como foi anteriormente referido, esta matriz corresponde, em termos tensoriais, ao módulo elastoplástico coerente, que é definido por

$$\hat{\mathbf{D}}^{\text{ep}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \right|_{t+\Delta t}^{i+1} \quad (4.108)$$

ou, de acordo com a equação 4.82, por

$$\hat{\mathbf{D}}^{\text{ep}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \left. \frac{\partial F(\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}, \boldsymbol{\epsilon}_t, \boldsymbol{\epsilon}_t^p, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_t^p)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \right|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.109)$$

De modo a obter a expressão do módulo elastoplástico coerente, efectua-se as diferenciações²² da relação constitutiva 4.83, da lei de plasticidade 4.95 e do critério de plasticidade 4.101, que,

²²As diferenciações são efectuadas atendendo ao facto de que, para a iteração $i + 1$, $i \in \mathbb{N}_0$, de um pseudo-instante incremental $t + \Delta t$, o diferencial de uma variável é igual ao diferencial do incremento dessa variável, *i.e.* $d^{\cdot, i+1}|_{t+\Delta t} = d(\Delta \cdot)|_{t+\Delta t}^{i+1}$.

Tabela 4.2: Algoritmo de integração implícita da lei de comportamento elastoplástico — algoritmo de retorno radial — para o problema de elastoplasticidade quase-estática.

Para a iteração $i + 1$, $i \in \mathbb{N}_0$ do método de Newton-Raphson:

1. Previsão elástica — cálculo de:
 - 1.1 $\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{D} : (\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1} - \boldsymbol{\epsilon}_t^{\text{p}})$
 - 1.2 $\mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} - \frac{1}{3} \text{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right) \mathbf{1}$
 - 1.3 $\left\| \mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right\| = \sqrt{\mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} : \mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}}$
 - 1.4 $\bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right) = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| \mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right\|$
 - 1.5 $f \left(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}, \bar{\epsilon}_t^{\text{p}} \right) = \bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right) - \sigma_{\text{Y}} \left(\bar{\epsilon}_t^{\text{p}} \right)$
2. SE $f \left(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}, \bar{\epsilon}_t^{\text{p}} \right) \leq 0$, ENTÃO actualização de:
 - 2.1 $\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}$
 - 2.2 $\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} = \boldsymbol{\epsilon}_t^{\text{p}}$
 - 2.3 $\bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} = \bar{\epsilon}_t^{\text{p}}$
3. SENÃO — correcção plástica — cálculo de:
 - 3.1 $\hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}}{\left\| \mathbf{s}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right\|}$
 - 3.2 $\Delta \bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} = \frac{\bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1} \right) - \sigma_{\text{Y}} \left(\bar{\epsilon}^{\text{p}} \right)}{3G+H}$
 - 3.3 $\Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} = \Delta \bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} \sqrt{\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}$
 - 3.4 Actualização de:
 - 3.4.1 $\bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} = \bar{\epsilon}_t^{\text{p}} + \Delta \bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1}$
 - 3.4.2 $\bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \right) = \sigma_{\text{Y}}^0 + H \bar{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1}$
 - 3.4.3 $\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1} = \bar{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \right) \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{\mathbf{n}}^{\text{te}}|_{t+\Delta t}^{i+1}$
 - 3.4.4 $\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1} + \frac{1}{3} \text{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \right) \mathbf{1}$
 - 3.4.5 $\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1} = \boldsymbol{\epsilon}_t^{\text{p}} + \Delta \boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{\text{p}i+1}$

tendo em consideração as equações 4.21 e 4.94, correspondem a

$$d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{D} : \left(d\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1} - d\boldsymbol{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1} \right), \quad (4.110)$$

$$d\boldsymbol{\epsilon}^p|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} d\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} + \Delta\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \quad e \quad (4.111)$$

$$df \left(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_t^p + \Delta\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^p|_{t+\Delta t}^{i+1} \right) = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} - H d\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} = 0, \quad (4.112)$$

respectivamente. Substituindo a relação 4.111 na equação 4.110, obtém-se

$$d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{D} : \left(d\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1} - \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} d\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} - \Delta\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} \right). \quad (4.113)$$

A resolução da equação 4.112 em ordem a $d\lambda_{t+\Delta t}^{i+1}$, após a substituição da relação 4.113, resulta em

$$d\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \mathbf{D} : d\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1} - \Delta\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \mathbf{D} : \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}}{\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} + H}, \quad (4.114)$$

em que a não-singularidade da expressão é garantida pelo facto de o denominador ser estritamente positivo [Simo e Hughes 1998]. Efectuando a multiplicação tensorial de dupla contracção membro a membro da equação 4.21 e procedendo à derivação de ambos os membros desta última equação e da equação 4.35 em relação a $\boldsymbol{\sigma}$, resulta, para a iteração $i + 1$, $i \in \mathbb{N}_0$, de um pseudo-instante incremental $t + \Delta t$, que

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = 0 \quad e \quad (4.115)$$

$$\mathbf{D} : \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = 2G \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}, \quad (4.116)$$

respectivamente. Assim, substituindo as expressões 4.114 a 4.116 na equação 4.113, resulta, após a reorganização dos seus termos, que

$$\left(\mathfrak{S} + 2G \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} \Delta\lambda_{t+\Delta t}^{i+1} \right) : d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \left(\mathbf{D} - \frac{\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \mathbf{D} \otimes \mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}}{\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \mathbf{D} : \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} + H} \right) : d\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.117)$$

Por outro lado, tendo em consideração que

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{s}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{1}{\|\mathbf{s}_{t+\Delta t}^{i+1}\|} \left(\mathfrak{S} - \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1} \otimes \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1} \right), \quad (4.118)$$

a derivação de ambos os membros da equação 4.21 em relação a $\boldsymbol{\sigma}$ resulta, atendendo não só à regra da cadeia utilizada na derivação de funções mas também ao carácter desviador de $\hat{\mathbf{n}}$ e à equação 4.10, em

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{3}{2\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1})} \left(\mathfrak{S} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} - \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1} \otimes \hat{\mathbf{n}}_{t+\Delta t}^{i+1} \right). \quad (4.119)$$

Procedendo, ainda, à multiplicação tensorial de dupla contracção de ambos os membros da equação 4.119, obtém-se

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} : \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{3}{2\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1})} \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.120)$$

Por outro lado, numa situação de deformação plástica, verifica-se, atendendo à relação 4.120, a existência do inverso (tensorial) do primeiro termo do primeiro membro da equação 4.117, o qual corresponde a

$$\left(\mathfrak{S} + 2G \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1} \right)^{-1} = \left(\mathfrak{S} - 2G \zeta_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} \right), \quad (4.121)$$

em que o parâmetro $\zeta_{t+\Delta t}^{i+1}$ é definido por

$$\zeta_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{\Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}}{1 + \frac{3G \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}}{\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1})}}. \quad (4.122)$$

Além disso, constata-se que o primeiro termo do segundo membro da equação 4.117 corresponde, numa situação de deformação plástica, ao módulo elastoplástico tangente (*cf.* equação 4.33). Por outro lado, o incremento do multiplicador plástico $\Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}$ é nulo numa situação de comportamento elástico. Neste contexto, o âmbito da equação 4.117 pode ser estendido a situações de comportamento elástico, obtendo-se, após a multiplicação tensorial de dupla contracção de ambos os seus membros pelo segundo membro da equação 4.121 e atendendo às expressões 4.115 e 4.116, a relação

$$d\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1} = \left(\mathbf{D}^{\text{ep}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} - 4G^2 \zeta_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} \right) : d\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.123)$$

Assim, de acordo com a equação 4.108, o módulo elastoplástico coerente corresponde a

$$\hat{\mathbf{D}}^{\text{ep}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = \mathbf{D}^{\text{ep}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} - 4G^2 \zeta_{t+\Delta t}^{i+1} \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}. \quad (4.124)$$

Esta relação mostra que, em relação ao módulo elastoplástico tangente, o módulo elastoplástico coerente possui um termo extra, dependente quer do incremento do multiplicador plástico $\Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}$ (*cf.* equação 4.122) quer de $\partial^2 f / \partial \boldsymbol{\sigma}^2 \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}$. Neste contexto, verifica-se, por um lado, que o módulo elastoplástico coerente degenera no módulo tangente para valores infinitesimais do incremento do multiplicador plástico²³. Por outro lado, atendendo à equação 4.21, tem-se que

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}, \quad (4.125)$$

pelo que a variação da normal à superfície de limite de elasticidade, num determinado incremento pseudotemporal, é tomada em consideração durante o processo iterativo.

A substituição da relação 4.119 na equação 4.124 e a consideração da equação 4.36 permitem obter, para o módulo elastoplástico coerente, a expressão

$$\hat{\mathbf{D}}^{\text{ep}} = \mathbf{D} - \tilde{\beta}_{t+\Delta t}^{i+1} \left(\mathfrak{S} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) - \tilde{\varrho}_{t+\Delta t}^{i+1} \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.126)$$

em que

$$\tilde{\beta}_{t+\Delta t}^{i+1} = \frac{6G^2 \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}}{\bar{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}_{t+\Delta t}^{i+1}) + 3G \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1}} \quad \text{e} \quad (4.127)$$

$$\tilde{\varrho}_{t+\Delta t}^{i+1} = \tilde{\varrho}_{t+\Delta t}^{i+1} - \tilde{\beta}_{t+\Delta t}^{i+1}, \quad (4.128)$$

com

$$\tilde{\varrho}_{t+\Delta t}^{i+1} = \begin{cases} 0 & \Leftarrow \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1} = 0 \\ \frac{2G}{1 + \frac{H}{3G}} & \Leftarrow \Delta \lambda_{t+\Delta t}^{i+1} > 0 \end{cases}. \quad (4.129)$$

²³Este facto pressupõe a não-singularidade de $\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \Big|_{t+\Delta t}^{i+1}$.

Capítulo 5

Homogeneização por Expansão Assimptótica em Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada

Abordam-se os principais aspectos relativos à aplicação da técnica da homogeneização assintótica ao problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada em regime linear. Tecem-se algumas considerações acerca da natureza dos termos de ordem superior associados à expansão assintótica dos campos de temperaturas e de deslocamentos. Por fim, referem-se algumas considerações sobre o processo de localização em termoelasticidade quase-estática desacoplada.

5.1 Introdução

A modelação numérica detalhada do comportamento termomecânico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos envolve, em geral, custos computacionais demasiadamente elevados. Neste contexto, o recurso a metodologias de homogeneização pode resultar em benefícios computacionais significativos. Estas técnicas permitem a substituição de um meio heterogéneo por um meio homogéneo equivalente, possibilitando assim a obtenção de leis de comportamento macroestruturais a partir de informação relativa ao nível microestrutural.

Por outro lado, os materiais compósitos são geralmente caracterizados por apresentarem heterogeneidades, cujas dimensões características se revelam bastantes inferiores às dimensões características dos componentes estruturais em que são usualmente aplicados. Se as heterogeneidades se encontram distribuídas de um modo equitativo no seio da matriz, a morfologia das heterogeneidades pode ser geralmente aproximada pela repetição periódica de uma célula unitária representativa dos detalhes microestruturais do material compósito.

Neste contexto, o método da homogeneização por expansão assintótica consiste numa técnica expedita de abordagem a problemas de modelação de fenómenos físicos em meios com estrutura periódica, em particular do comportamento termomecânico de componentes estruturais constituídos

por materiais compósitos. Em termos numéricos, as principais vantagens desta metodologia consistem no facto de (i) conduzir a uma redução bastante significativa do número de graus de liberdade associados à modelação do comportamento termomecânico deste tipo de estruturas e (ii) permitir a caracterização dos campos microestruturais. Na realidade, ao contrário dos restantes métodos de homogeneização, esta técnica permite, em particular no que se refere à termoelasticidade, a obtenção de equações explícitas que possibilitam a determinação dos níveis microestruturais de fluxo superficial de calor por condução, de tensão e de deformação. Este processo é designado por localização e, em termos genéricos, corresponde ao processo inverso da homogeneização.

O conceito da homogeneização de propriedades físicas remonta ao século XIX [Poisson 1824, Maxwell 1873, Rayleigh 1892]. No entanto, os primeiros trabalhos referentes à teoria matemática da homogeneização datam do final dos anos 60 do século XX [Spanolo 1968, Sanchez-Palencia 1970, De Giorgi e Spagnolo 1973]. Desde então que diversas técnicas de homogeneização têm vindo a surgir, das quais se destaca a homogeneização por expansão assintótica [Bensoussan *et al.* 1978, Sanchez-Palencia 1980, Lions 1981, Bakhvalov e Panasenko 1989, Oleĭnik *et al.* 1992]. Esta técnica permite a obtenção de valores médios (homogeneizados) para as propriedades termomecânicas de um determinado material compósito. No entanto, no caso da microestrutura não poder ser considerada como periódica, não será possível aplicar o método de homogeneização por expansão assintótica. Neste caso, deverão utilizar-se outras técnicas de homogeneização, tais como, por exemplo, a convergência-G [Spanolo 1968] — para problemas simétricos e não-periódicos —, a convergência-H [Murat e Tartar 1997] — para problemas não-simétricos e não-periódicos — e a convergência- Γ [Dal Maso 1993] — para problemas que admitem uma caracterização variacional. No entanto, realce-se o facto de estas técnicas não permitirem a obtenção de valores homogeneizados para as propriedades termomecânicas de um determinado material compósito, possibilitando apenas que se estimem limites superiores e limites inferiores para os valores homogeneizados das propriedades efectivas.

5.2 Formulação Diferencial do Problema de Homogeneização

Considere-se um material heterogéneo linear termoelástico associado a um meio sólido¹ $\Omega \in \mathbb{R}^3$, cuja microestrutura seja constituída pela distribuição espacialmente periódica de uma célula unitária associada a uma região Y , conforme ilustrado na figura 5.1. Uma vez que a generalidade dos materiais heterogéneos de microestrutura periódica apresenta uma relação ε entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroestrutura reduzida ($\varepsilon \ll 1$), verifica-se que, aquando da solitação termomecânica destes materiais, surgem oscilações periódicas dos campos resultantes de temperaturas, deslocamentos, fluxos superficiais de calor por condução, tensões ou deformações. Este tipo de oscilações advém da periodicidade associada à heterogeneidade microestrutural e manifesta-se na vizinhança de dimensão ε de qualquer ponto de Ω . Neste contexto, é natural assumir a existência de duas escalas distintas \mathbf{x} e \mathbf{y} , associadas, respectivamente, aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , tal como ilustrado na figura 5.1. Deste modo, resulta que as variáveis associadas aos campos anteriormente referidos passam a depender funcionalmente de ambos os sistemas \mathbf{x} e \mathbf{y} , em que

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon. \quad (5.1)$$

Do exposto, resulta ainda que a dependência funcional em \mathbf{y} é periódica no domínio Y , sendo esta característica usualmente designada por Y -periodicidade.

Em termos de propriedades lineares termoelásticas, a Y -periodicidade da heterogeneidade microestrutural reflecte-se no facto de os tensores de condutividade térmica \mathbf{k} , de expansibilidade térmica $\boldsymbol{\alpha}$ e de elasticidade \mathbf{D} serem Y -periódicos em \mathbf{y} . Por outro lado, a homogeneidade do material ao nível da macroescala resulta na não-dependência directa destes tensores relativamente

¹O meio sólido ocupa o conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, que se encontra delimitado pela fronteira Γ e cujo fecho corresponde a $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$.

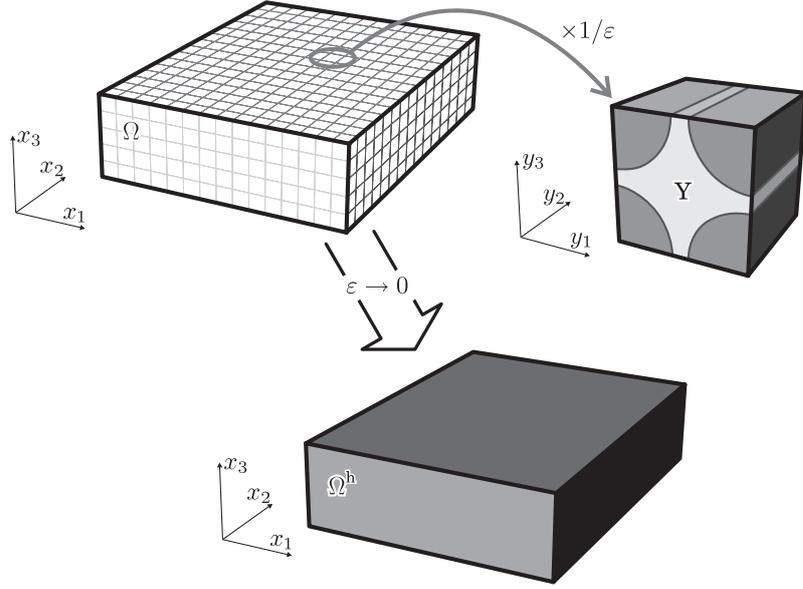


Figura 5.1: Representação esquemática do material termoelástico heterogêneo Ω e da célula unitária Y associada à microescala, utilizados no processo de homogeneização assintótica, de que resulta, com $\varepsilon \rightarrow 0$, o material homogêneo Ω^h .

ao sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} . Neste contexto, em termos das componentes dos tensores de condutividade térmica, de expansibilidade térmica e de elasticidade, obtém-se²

$$k_{ij} = k_{ij}(\mathbf{y}), \quad (5.2)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}(\mathbf{y}) \quad \text{e} \quad (5.3)$$

$$D_{ijkl} = D_{ijkl}(\mathbf{y}), \quad (5.4)$$

respectivamente. No entanto, no sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} , a heterogeneidade microestrutural manifesta-se num período ε^{-1} vezes menor que a dimensão característica do domínio Y . Este facto é denotado, de acordo com a equação 5.1, por

$$k_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = k_{ij}(\mathbf{x}/\varepsilon), \quad (5.5)$$

$$\alpha_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \alpha_{ij}(\mathbf{x}/\varepsilon) \quad \text{e} \quad (5.6)$$

$$D_{ijkl}^\varepsilon(\mathbf{x}) = D_{ijkl}(\mathbf{x}/\varepsilon), \quad (5.7)$$

em que o índice superior ε evidencia o facto de \mathbf{k} , $\boldsymbol{\alpha}$ e \mathbf{D} serem εY -periódicos no sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} , dependendo, assim, indirectamente de \mathbf{x} . Neste contexto, considerando a convenção de Einstein para a notação indicial das componentes das grandezas tensoriais, o problema térmico em regime estacionário é descrito por equações de equilíbrio e de Fourier para a condução de calor que correspondem [Cioranescu e Donato 1999], respectivamente, a

$$\frac{\partial q_i^\varepsilon}{\partial x_i^\varepsilon} - Q = 0 \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (5.8)$$

$$q_i^\varepsilon = -k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial T^\varepsilon}{\partial x_j^\varepsilon} \quad \text{em } \Omega, \quad (5.9)$$

²No presente capítulo, de modo a tornar mais expedita a exposição da aplicação do método de homogeneização por expansão assintótica ao problema da termoelasticidade linear desacoplada utiliza-se a notação dita indicial para as componentes das grandezas tensoriais.

para³ $i, j = 1, \dots, 3$. q_i são as componentes do vector de fluxos superficiais de calor por condução. Q representa a taxa temporal de geração de calor por unidade de volume e T é o campo de temperaturas. O índice superior ε evidencia a ε -Y-periodicidade de uma determinada variável no sistema de coordenadas da macroescala, \mathbf{x} . A fronteira de Ω é definida, de modo disjunto, pelas superfícies Γ_{D_T} , Γ_{N_T} e Γ_{R_T} . Estas superfícies encontram-se associadas a condições⁴ de fronteira de Dirichlet, de Neumann e de Robin definidas por

$$T^\varepsilon = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_{D_T}, \quad (5.10)$$

$$q_i^\varepsilon n_i = -\bar{q} \quad \text{em } \Gamma_{N_T} \quad \text{e} \quad (5.11)$$

$$q_i^\varepsilon n_i = h_c(T^\varepsilon - T_\infty) \quad \text{em } \Gamma_{R_T}, \quad (5.12)$$

respectivamente, em que $\Gamma_{D_T} \cup \Gamma_{N_T} \cup \Gamma_{R_T} = \Gamma$ e $\Gamma_{D_T} \cap \Gamma_{N_T} = \Gamma_{D_T} \cap \Gamma_{R_T} = \Gamma_{N_T} \cap \Gamma_{R_T} = \emptyset$. \bar{T} e \bar{q} são valores prescritos de temperatura e de fluxo de calor por condução por unidade área, respectivamente. n_i são as componentes de um versor normal exterior às superfícies Γ_{N_T} ou Γ_{R_T} . h_c e T_∞ são o coeficiente de convecção e a temperatura do meio ambiente, respectivamente.

A resolução do problema térmico consiste na determinação do campo de temperaturas, que corresponde à solução $T^\varepsilon \in V_\Omega^0$ do problema variacional auxiliar

$$\int_\Omega k_{ij}^\varepsilon \frac{\partial T^\varepsilon}{\partial x_j^\varepsilon} \frac{\partial v}{\partial x_i^\varepsilon} d\Omega = \int_\Omega Q v d\Omega + \int_{\Gamma_{N_T}} \bar{q} v d\Gamma - \int_{\Gamma_{R_T}} h_c (T^\varepsilon - T_\infty) v d\Gamma, \quad \forall v \in V_\Omega^0, \quad (5.13)$$

em que V_Ω^0 é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em Γ_{D_T} .

Atenda-se ao facto de o material heterogéneo ser constituído por $n > 1$ materiais homogéneos, pelo que, na realidade, o problema térmico consiste em n equações análogas à equação 5.8, associadas a condições de continuidade de temperatura e de fluxos superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios [Lewis *et al.* 96]. No entanto, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, estas equações serão omitidas no seguimento deste trabalho.

Por outro lado, assumindo deformações infinitesimais associadas a um processo quase-estático, o problema associado de termoelasticidade linear é descrito por equações de equilíbrio, relações deformações-deslocamentos linearizadas e relações constitutivas (lei de Duhamel-Neumann) que correspondem a [Cioranescu e Donato 1999]

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^\varepsilon}{\partial x_j^\varepsilon} + f_i = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (5.14)$$

$$\epsilon_{ij}^\varepsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^\varepsilon}{\partial x_j^\varepsilon} + \frac{\partial u_j^\varepsilon}{\partial x_i^\varepsilon} \right) \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (5.15)$$

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = D_{ijkl}^\varepsilon \epsilon_{kl}^\varepsilon - \Delta T^\varepsilon \beta_{ij}^\varepsilon \quad \text{em } \Omega, \quad (5.16)$$

respectivamente, em que

$$\Delta T^\varepsilon = T^\varepsilon - T_0 \quad \text{e} \quad (5.17)$$

$$\beta_{ij}^\varepsilon = D_{ijkl}^\varepsilon \alpha_{kl}^\varepsilon = \beta_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}/\varepsilon). \quad (5.18)$$

σ_{ij} e ϵ_{ij} são as componentes dos tensores das tensões de Cauchy e das deformações, respectivamente. f_i e u_i representam as componentes dos vectores de forças volúmicas e de deslocamentos, respectivamente. T_0 é a temperatura de referência e β_{ij} são as componentes do tensor dos módulos

³No seguimento do presente capítulo considera-se implicitamente que quaisquer índices referentes à notação tensorial tomam valores no conjunto $\{1, 2, 3\}$.

⁴Devido à não-linearidade associada à radiação, este tipo de condição de fronteira não será abordada no seguimento do presente capítulo.

térmicos. A fronteira de Ω é definida, de modo disjunto, pelas superfícies Γ_{D_u} e Γ_{N_u} . Estas superfícies encontram-se associadas a condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann definidas⁵ por

$$u_i^\varepsilon = \bar{u}_i \quad \text{em } \Gamma_{D_u} \quad \text{e} \quad (5.19)$$

$$\sigma_{ij}^\varepsilon n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_{N_u}, \quad (5.20)$$

respectivamente, em que $\Gamma_{D_u} \cup \Gamma_{N_u} = \Gamma$ e $\Gamma_{D_u} \cap \Gamma_{N_u} = \emptyset$. \bar{u}_i e \bar{t}_i são valores prescritos de deslocamento e de força superficial, respectivamente. n_j são as componentes de um versor normal exterior à superfície Γ_{N_u} .

A resolução do problema termoelástico consiste na determinação do campo de deslocamentos, que corresponde à solução $\mathbf{u}^\varepsilon \in V_\Omega^0$ do problema variacional auxiliar

$$\int_\Omega D_{ijkl}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_l^\varepsilon} \frac{\partial v_i}{\partial x_j^\varepsilon} d\Omega = \int_\Omega (T^\varepsilon - T_0) \beta_{ij}^\varepsilon \frac{\partial v_i}{\partial x_j^\varepsilon} d\Omega + \int_\Omega f_i v_i d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i v_i d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in V_\Omega^0, \quad (5.21)$$

em que V_Ω^0 é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em Γ_{D_u} .

De acordo com o que foi anteriormente referido, devido ao facto de o material heterogéneo ser constituído por $n > 1$ materiais homogéneos, o problema de termoelasticidade linear consiste em n equações análogas à equação 5.14, associadas a condições de continuidade de deslocamento e de forças superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios. De igual modo, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, estas equações serão omitidas no seguimento deste trabalho.

5.3 Homogeneização por Expansão Assimptótica do Problema Térmico

5.3.1 Expansão Assimptótica do Campo de Temperaturas

Com base no pressuposto da existência de duas escalas distintas associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , procede-se à aproximação do campo de temperaturas (variáveis primárias) com base na seguinte expansão assimptótica em ε :

$$T^\varepsilon(\mathbf{x}) = T^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon T^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 T^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^3 \dots, \quad (5.22)$$

em que o termo $T^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, com $r \in \mathbb{N}_0$, corresponde a uma função Y -periódica em \mathbf{y} , designada por corrector de ordem r do campo de temperaturas. Atendendo a que $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$ tem-se, de acordo com a regra da cadeia utilizada na derivação de funções, que

$$\frac{\partial \cdot}{\partial x_i^\varepsilon} = \frac{\partial \cdot}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \cdot}{\partial y_i}. \quad (5.23)$$

Neste contexto, substituindo a expansão assimptótica do campo de temperaturas (equação 5.22) nas equações de Fourier para a condução de calor (expressão 5.9), utilizando as relações 5.1, 5.5 e 5.23, e reagrupando as potências de ε , obtém-se

$$q_i^\varepsilon = \varepsilon^{-1} q_i^{(0)} + \varepsilon^0 q_i^{(1)} + \varepsilon^1 q_i^{(2)} + \varepsilon^2 \dots, \quad (5.24)$$

em que

$$q_i^{(0)} = -k_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial T^{(0)}}{\partial y_j} \quad \text{e} \quad (5.25)$$

$$q_i^{(r)} = -k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial T^{(r-1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial T^{(r)}}{\partial y_j} \right), \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.26)$$

⁵Tal como para o problema térmico, é possível definir condições de fronteira de Robin para o problema de termoelasticidade. Fisicamente, estas correspondem à existência de uma fundação elástica em contacto com a superfície Γ_{R_u} do meio sólido $\tilde{\Omega}$. Porém, dada a natureza peculiar deste tipo de condição de fronteira, não se consideram, sem perda de generalidade, condições de fronteira de Robin no problema termoelástico.

Substituindo a expressão 5.24 nas equações de equilíbrio (expressão 5.8), utilizando as relações 5.23 e reagrupando as potências de ε , obtém-se

$$\varepsilon^{-2} \frac{\partial q_i^{(0)}}{\partial y_i} + \varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial q_i^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial y_i} \right) + \varepsilon^0 \left(\frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i^{(2)}}{\partial y_i} - Q \right) + \varepsilon^1 \dots = 0. \quad (5.27)$$

Devido ao facto de as equações 5.27 terem de ser válidas para qualquer $\varepsilon \rightarrow 0$, é então necessário que qualquer dos coeficientes das potências de ε seja nulo. Assim, obtém-se para as várias potências de ε , *i.e.* para as diversas ordens de correcção, o seguinte conjunto inumerável de equações diferenciais:

$$\varepsilon^{-2} \Rightarrow \frac{\partial q_i^{(0)}}{\partial y_i} = 0, \quad (5.28)$$

$$\varepsilon^{-1} \Rightarrow \frac{\partial q_i^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial y_i} = 0, \quad (5.29)$$

$$\varepsilon^0 \Rightarrow \frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i^{(2)}}{\partial y_i} - Q = 0 \quad \text{e} \quad (5.30)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow \frac{\partial q_i^{(r+1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i^{(r+2)}}{\partial y_i} = 0, \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.31)$$

Considerando as expansões assintóticas 5.22 e 5.24, as condições de fronteira de Dirichlet (expressão 5.10), de Neumann (expressão 5.11) e de Robin (expressão 5.12) do problema original correspondem, respectivamente, a

$$\varepsilon^0 T^{(0)} + \varepsilon T^{(1)} + \varepsilon^2 T^{(2)} + \varepsilon^3 \dots = \bar{T} \quad \text{em} \quad \Gamma_{D_T}, \quad (5.32)$$

$$\left(\varepsilon^{-1} q_i^{(0)} + \varepsilon^0 q_i^{(1)} + \varepsilon^1 q_i^{(2)} + \varepsilon^2 \dots \right) n_i = -\bar{q} \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_T} \quad \text{e} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} & \left(\varepsilon^{-1} q_i^{(0)} + \varepsilon^0 q_i^{(1)} + \varepsilon^1 q_i^{(2)} + \varepsilon^2 \dots \right) n_i \\ & = h_c \left[\left(\varepsilon^0 T^{(0)} + \varepsilon T^{(1)} + \varepsilon^2 T^{(2)} + \varepsilon^3 \dots \right) - T_\infty \right] \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_R}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Assim, as condições de fronteira de Dirichlet, de Neumann e de Robin associadas às diversas ordens de correcção correspondem, respectivamente, a

$$\varepsilon^0 \Rightarrow T^{(0)} = \bar{T} \quad \text{e} \quad (5.35)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow T^{(r)} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_{D_T}, \quad r \in \mathbb{N}, \quad (5.36)$$

$$\varepsilon^{-1} \Rightarrow q_i^{(0)} n_i = 0, \quad (5.37)$$

$$\varepsilon^0 \Rightarrow q_i^{(1)} n_i = -\bar{q} \quad \text{e} \quad (5.38)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow q_i^{(r+1)} n_i = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_T}, \quad r \in \mathbb{N}, \quad \text{e} \quad (5.39)$$

$$\varepsilon^{-1} \Rightarrow q_i^{(0)} n_i = 0, \quad (5.40)$$

$$\varepsilon^0 \Rightarrow q_i^{(1)} n_i = h_c \left(T^{(0)} - T_\infty \right) \quad \text{e} \quad (5.41)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow q_i^{(r+1)} n_i = h_c T^{(r)} \quad \text{em} \quad \Gamma_{R_T}, \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.42)$$

Atenda-se ao facto de as soluções das equações diferenciais definidas pelas expressões 5.28 a 5.31 e associadas às condições de fronteira correspondentes às expressões 5.35 a 5.42 poderem ser obtidas por recorrência. Na realidade, obtendo as soluções $q_i^{(0)}$ das equações 5.28, é possível, por substituição nas equações 5.29, determinar as soluções $q_i^{(1)}$ em termos de $q_i^{(0)}$. Esta metodologia pode ser utilizada de modo recursivo, obtendo-se, deste modo, as soluções para as equações relativas a uma determinada ordem de correcção, recorrendo às soluções das equações associadas a ordens superiores.

5.3.2 Equações Diferenciais da Microescala

Analisando as equações diferenciais associadas à ordem de correcção -2 do campo de fluxos superficiais de calor (expressão 5.28), verifica-se que

$$q_i^{(0)} = q_i^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (5.43)$$

Com base nas expressões 5.25 e 5.43 obtém-se [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992]

$$q_i^{(0)} = 0 \quad \text{e} \quad (5.44)$$

$$T^{(0)} = T^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (5.45)$$

Deste modo, constata-se que a temperatura $T^{(0)}$ é independente da coordenada \mathbf{y} da microescala, correspondendo assim à temperatura global do material homogeneizado associado à macroescala. Neste contexto, substituindo a expressão 5.44 nas equações diferenciais associadas à ordem de correcção -1 do campo de tensões (expressão 5.29) obtém-se

$$\frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial y_i} = 0. \quad (5.46)$$

Considerando a expressão 5.26 para $r = 1$, obtém-se

$$q_i^{(1)} = -k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial T^{(1)}}{\partial y_j} \right), \quad (5.47)$$

pelo que a equação 5.46 corresponde a

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left[k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial T^{(1)}}{\partial y_j} \right) \right] = 0. \quad (5.48)$$

O facto de o termo $\partial T^{(0)}/\partial x_j$ da expressão 5.48 ser constante relativamente aos operadores $\partial \cdot / \partial y_i$ (cf. equação 5.45) permite, de acordo com o princípio da sobreposição linear, assumir a seguinte solução para a equação 5.48:

$$T^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\Upsilon^i(\mathbf{y}) \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_i}(\mathbf{x}) + \bar{T}^{(1)}(\mathbf{x}). \quad (5.49)$$

$\bar{T}^{(1)}(\mathbf{x})$ é uma constante de integração em \mathbf{y} e Υ^i são as componentes Y -periódicas do vector do campo de deslocamentos característicos do problema térmico — deslocamentos termocaracterísticos. Substituindo a equação 5.49 na expressão 5.47, reajustando os índices mudos e pondo em evidência os factores comuns às parcelas do segundo membro, obtém-se

$$q_i^{(1)} = \hat{q}_i^k \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_k}, \quad (5.50)$$

em que

$$\hat{q}_i^k = -k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\Gamma_j^k - \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \right) \quad (5.51)$$

são funções Y -periódicas, com⁶

$$\Gamma_j^k = \delta_{jk}. \quad (5.52)$$

⁶ Γ_j^k correspondem, num referencial cartesiano ortonormado, às componentes do tensor identidade de segunda ordem $\mathbf{1}$ (cf. equação 4.5).

δ_{jk} é o símbolo de delta de Kronecker. Atendendo à equação 5.45, a substituição das equações 5.50 na expressão 5.46 resulta em

$$\frac{\partial \hat{q}_i^k}{\partial y_i} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_k} = 0. \quad (5.53)$$

A arbitrariedade do segundo factor do primeiro membro da equação 5.53 obriga a que o primeiro factor seja nulo, pelo que as equações diferenciais de equilíbrio da microescala correspondem a

$$\frac{\partial \hat{q}_i^k}{\partial y_i} = 0 \quad (5.54)$$

ou, de acordo com a expressão 5.51, a

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[k_{ij}(\mathbf{y}) \left(I_j^k - \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \right) \right] = 0. \quad (5.55)$$

Deste modo, de acordo com a expressão 5.55, as componentes do vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos correspondem às soluções $\Upsilon^k \in \tilde{V}_Y$ do problema variacional auxiliar

$$\int_Y k_{ij} \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY = \int_Y k_{ik} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY, \quad \forall v \in \tilde{V}_Y, \quad (5.56)$$

em que \tilde{V}_Y é o conjunto das funções Y-periódicas contínuas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y. O valor médio de uma função $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ Y-periódica em Y é definido por

$$\langle \Phi \rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY. \quad (5.57)$$

Atenda-se ao facto de a exigência de valores médios nulos em Y para as soluções das equações 5.56 constitui uma condição de unicidade para o tensor Υ do campo de deslocamentos termocaracterísticos [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992].

5.3.3 Equações Diferenciais da Macroescala

Aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ — valor médio em Y — aos dois termos da equação diferencial de equilíbrio associada à ordem de correcção 0 do campo de fluxos superficiais de calor (expressão 5.30), obtém-se

$$\left\langle \frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial x_i} \right\rangle_Y + \left\langle \frac{\partial q_i^{(2)}}{\partial y_i} \right\rangle_Y - \langle Q \rangle_Y = 0. \quad (5.58)$$

De acordo com a definição de valor médio de uma função Y-periódica em Y, o teorema da divergência, e atendendo à anti-simetria do versor n_i na fronteira Γ_Y do domínio da célula unitária, tem-se que

$$\left\langle \frac{\partial q_i^{(2)}}{\partial y_i} \right\rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y \frac{\partial q_i^{(2)}}{\partial y_i} dY = \frac{1}{|Y|} \int_{\Gamma_Y} q_i^{(2)} n_i d\Gamma = 0. \quad (5.59)$$

Assim, atendendo ao facto de o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ comutar com os operadores $\partial \cdot / \partial x_i$ e a taxa temporal de geração de calor por unidade de volume, Q , não depender de \mathbf{y} , tem-se, considerando a expressão 5.59, que a expressão 5.58 corresponde a

$$\frac{\partial \langle q_i^{(1)} \rangle_Y}{\partial x_i} - Q = 0. \quad (5.60)$$

A expressão 5.60 representa a equação diferencial homogeneizada de equilíbrio da macroskala. Por outro lado, substituindo a expressão 5.51 na expressão 5.50 e aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$, obtêm-se as equações de Fourier homogeneizadas para a condução de calor:

$$\left\langle q_i^{(1)} \right\rangle_Y = -k_{ik}^h \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_k}, \quad (5.61)$$

em que

$$k_{ik}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\Gamma_j^k - \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \right) dY \quad (5.62)$$

correspondem às componentes do tensor homogeneizado de condutividade térmica, \mathbf{k}^h . Por fim, integrando as equações 5.38 e 5.41 em Γ_{N_T} e Γ_{R_T} , respectivamente, adicionando os resultados membro a membro e aplicando o teorema da divergência, obtêm-se

$$\int_{\Omega} \frac{\partial q_i^{(1)}}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma_{N_T}} -\bar{q} d\Gamma + \int_{\Gamma_{R_T}} h_c (T^{(0)} - T_{\infty}) d\Gamma. \quad (5.63)$$

Aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ a ambos os membros da equação 5.63, atendendo ao facto de o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ comutar com os operadores $\partial \cdot / \partial x_i$ e de \bar{q} , h_c , $T^{(0)}$ e T_{∞} não dependerem de \mathbf{y} , obtêm-se, considerando novamente o teorema da divergência, as equações

$$\left\langle q_i^{(1)} \right\rangle_Y n_i = -\bar{q} \quad \text{em } \Gamma_{N_T} \quad \text{e} \quad (5.64)$$

$$\left\langle q_i^{(1)} \right\rangle_Y n_i = h_c (T^{(0)} - T_{\infty}) \quad \text{em } \Gamma_{R_T}, \quad (5.65)$$

que correspondem às condições de Neumann e de Robin associadas às variáveis do problema definido pela equação 5.60, respectivamente. Neste contexto, considerando

$$\Xi_i = \left\langle q_i^{(1)} \right\rangle_Y \quad (5.66)$$

e atendendo às equações 5.60, 5.35, 5.64, 5.65 e 5.61, tem-se que o campo de temperaturas $T^{(0)}$ corresponde à solução do problema de térmico homogeneizado definido por

$$\frac{\partial \Xi_i}{\partial x_i} - Q = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (5.67)$$

$$T^{(0)} = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_{D_T}, \quad (5.68)$$

$$\Xi_i n_i = -\bar{q} \quad \text{em } \Gamma_{N_T}, \quad (5.69)$$

$$\Xi_i n_i = h_c (T^{(0)} - T_{\infty}) \quad \text{em } \Gamma_{R_T}, \quad \text{com} \quad (5.70)$$

$$\Xi_i = -k_{ij}^h \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} \quad \text{em } \Omega, \quad (5.71)$$

respectivamente, em que as componentes k_{ij}^h do tensor homogeneizado de condutividade térmica se obtêm, após a resolução das equações diferenciais de equilíbrio da microescala (expressão 5.55) e a manipulação adequada dos índices, a partir das equações 5.62. Ξ_i denota as componentes do campo macroestrutural homogeneizado de fluxos superficiais de calor por condução.

A resolução do problema térmico homogeneizado consiste na determinação do campo macroestrutural de temperaturas, que corresponde à solução $T^{(0)} \in V_{\Omega}^0$ do problema variacional auxiliar

$$\int_{\Omega} k_{ij}^h \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Omega} Q v d\Omega + \int_{\Gamma_{N_T}} \bar{q} v d\Gamma - \int_{\Gamma_{R_T}} h_c (T^{(0)} - T_{\infty}) v d\Gamma, \quad \forall v \in V_{\Omega}^0, \quad (5.72)$$

em que V_{Ω}^0 é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em Γ_{D_T} .

Uma vez obtido o campo de temperaturas $T^{(0)}$, a equação 5.49 permite a determinação, a menos de uma constante aditiva, do campo de temperaturas $T^{(1)}$. No entanto, a consideração das duas escalas \mathbf{x} e \mathbf{y} — associadas, respectivamente, aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y — baseia-se, tal como foi referido na Secção 5.2, na hipótese de existirem oscilações periódicas dos campos resultantes de temperaturas, advindas da periodicidade associada à heterogeneidade microestrutural. Estas oscilações devem, supostamente, sobrepor-se a campos macroscópicos em que não se toma em consideração, pelo menos de modo directo, a influência de tais heterogeneidades microestruturais. Assim, as oscilações podem ser interpretadas como flutuações em torno de um valor médio macroscópico (*vd.* figura 5.2). Neste contexto, resulta que a constante $\bar{T}^{(1)}(\mathbf{x})$ de integração em \mathbf{y} do termo $T^{(1)}$ associado à expansão assimptótica 5.22 do campo de temperaturas pode, sem perda de generalidade, ser considerada nula, *i.e.* $\bar{T}^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$. Deste modo, a metodologia apresentada permite definir, de acordo com a ilustração esquemática da figura 5.2, uma aproximação $\tilde{T}^\varepsilon(\mathbf{x})$ de primeira ordem, *i.e.* linear relativamente a ε , da expansão assimptótica do campo de temperaturas, $T^\varepsilon(\mathbf{x})$, a que, de acordo com as equações 5.22 e 5.45, corresponde

$$T^\varepsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{T}^\varepsilon(\mathbf{x}) = T^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon T^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (5.73)$$

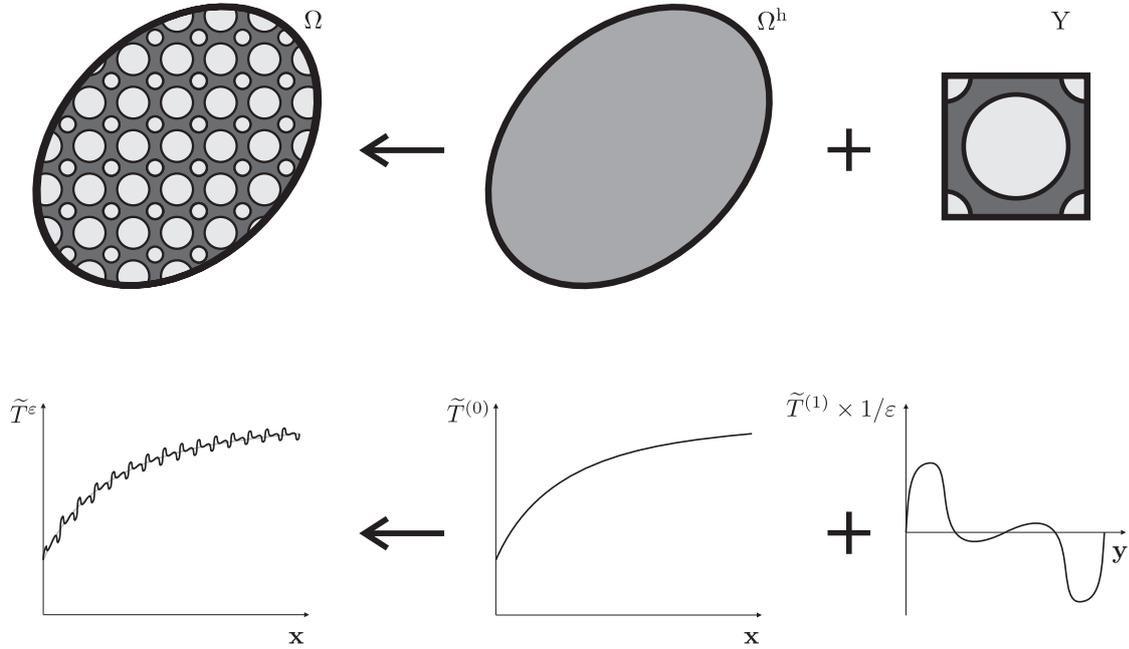


Figura 5.2: Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assimptótica do campo de temperaturas, para um caso unidimensional — o campo de temperaturas, em Ω , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em Ω^h , com as flutuações de primeira ordem advindas da Y -periodicidade do campo da microescala, em Y .

Substituindo a expressão 5.49 na equação 5.73 e atendendo à hipótese de $\bar{T}^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$, obtém-se, em função das componentes do vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos, a equação

$$T^\varepsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{T}^\varepsilon(\mathbf{x}) = T^{(0)}(\mathbf{x}) - \varepsilon \Upsilon^i(\mathbf{y}) \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_i}(\mathbf{x}). \quad (5.74)$$

Devido ao carácter linear, em ε , da aproximação 5.74, Υ é usualmente designado como vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos de primeira ordem.

5.3.4 Correctores de Temperatura de Ordem Superior

Os correctores de ordem superior que constituem a expansão assimptótica do campo de temperaturas 5.22 podem ser obtidos, de acordo com o que foi referido na Secção 5.3.1, pela resolução recorrente das equações diferenciais associadas a ordens de correcção superiores. Neste contexto, considere-se, a título de exemplo, a obtenção do corrector de segunda ordem, $T^{(2)}$, associado à expansão assimptótica 5.22 do campo de temperaturas. Neste caso, a equação 5.30 deve ser resolvida com base nas soluções $T^{(0)}$ e $T^{(1)}$ relativas às equações 5.28 e 5.29, respectivamente. Deste modo, considerando a expressão 5.26 para $r = 2$ e substituindo-a, em conjunto com a expressão 5.47, na equação diferencial de equilíbrio associada à ordem de correcção 0 do campo de temperaturas (expressão 5.30), obtém-se

$$k_{ij}(\mathbf{y}) \left[\frac{\partial^2 T^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 T^{(1)}}{\partial x_i \partial y_j} \right] + \frac{\partial}{\partial y_i} \left[k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial T^{(1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial T^{(2)}}{\partial y_j} \right) \right] + Q = 0. \quad (5.75)$$

Por outro lado, substituindo a expressão 5.71 nas equações 5.67 e atendendo ao facto de o tensor homogeneizado de condutividade térmica \mathbf{k}^h ser constante, resulta que

$$Q = -k_{ij}^h \frac{\partial^2 T^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (5.76)$$

Substituindo as equações 5.49 (com $\bar{T}^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$) e 5.76 na equação 5.75, manipulando adequadamente os índices e reagrupando os vários termos, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left[k_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial T^{(2)}}{\partial y_j} \right] = \bar{k}_{ij} \frac{\partial^2 T^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (5.77)$$

em que

$$\bar{k}_{ij} = k_{ij}^h - k_{ij}(\mathbf{y}) + k_{ik}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Upsilon^j}{\partial y_k} + \frac{\partial}{\partial y_k} [k_{ki}(\mathbf{y}) \Upsilon^j]. \quad (5.78)$$

O facto de o termo $\partial^2 T^{(0)} / \partial x_i \partial x_j$ da expressão 5.77 ser constante relativamente aos operadores $\partial \cdot / \partial y_i$ (cf. equação 5.45) permite, de acordo com o princípio da sobreposição linear, assumir a seguinte solução para a equação 5.77:

$$T^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\Phi^{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 T^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}) + \bar{T}^{(2)}(\mathbf{x}). \quad (5.79)$$

$\bar{T}^{(2)}(\mathbf{x})$ é uma constante de integração em \mathbf{y} e Φ^{ij} são as componentes Y-periódicas do tensor do campo de deslocamentos termocaracterísticos de segunda ordem.

De acordo com as expressões 5.77 e 5.78, as componentes do tensor do campo de deslocamentos termocaracterísticos de segunda ordem correspondem às soluções $\Phi^{ij} \in \tilde{V}_Y$ do problema variacional auxiliar

$$\int_Y k_{kl} \frac{\partial \Phi^{ij}}{\partial y_l} \frac{\partial v}{\partial y_k} dY = \int_Y \left(k_{ij}^h - k_{ij} + k_{ik} \frac{\partial \Upsilon^j}{\partial y_k} \right) v dY - \int_Y k_{ki} \Upsilon^j \frac{\partial v}{\partial y_k} dY, \quad \forall v \in \tilde{V}_Y, \quad (5.80)$$

em que \tilde{V}_Y é o conjunto das funções Y-periódicas contínuas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y.

Procedendo de modo análogo, é possível obter os restantes correctores de ordem superior da expansão assimptótica do campo de temperaturas 5.22. Atenda-se ao facto de, em geral, os correctores ordem $k \geq 2$, $k \in \mathbb{N}$, serem proporcionais a uma derivada parcial mista de ordem k da temperatura global do material homogeneizado associado à macroescala, $T^{(0)}$, sendo os factores de proporcionalidade as componentes do tensor do campo de deslocamentos termocaracterísticos

de ordem k . Neste contexto, assumindo, ainda, que, de acordo com o referido na Secção 5.3.3, as constantes de integração em \mathbf{y} para as ordens superiores são nulas, a expressão 5.22 resulta em

$$T^\varepsilon(\mathbf{x}) = T^{(0)}(\mathbf{x}) - \varepsilon \Upsilon^i(\mathbf{y}) \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_i}(\mathbf{x}) - \varepsilon^2 \Phi^{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 T^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}) - \varepsilon^3 \dots \quad (5.81)$$

Embora o campo de temperaturas T^ε seja definido por um conjunto inumerável de termos (*cf.* expressão 5.81), verifica-se que, no caso da relação ε entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroestrutura ser reduzida ($\varepsilon \ll 1$), os termos de ordem superior se revelam numericamente insignificantes face à aproximação de primeira ordem 5.74 [Terada 1996].

5.4 Homogeneização por Expansão Assimptótica do Problema Termoelástico

5.4.1 Expansão Assimptótica do Campo de Deslocamentos

Tal como para o problema térmico, com base no pressuposto da existência de duas escalas distintas associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , procede-se à aproximação do campo de deslocamentos (variáveis primárias) com base na seguinte expansão assimptótica em ε :

$$u_i^\varepsilon(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 u_i^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^3 \dots, \quad (5.82)$$

em que os termos $u_i^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, com $r \in \mathbb{N}_0$, correspondem a funções Y -periódicas em \mathbf{y} , designadas por correctores de ordem r do campo de deslocamentos. Por outro lado, a expansão assimptótica do campo de temperaturas associada ao problema térmico corresponde, de acordo com as equações 5.22 e 5.45, a

$$T^\varepsilon(\mathbf{x}) = T^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon T^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 T^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^3 \dots \quad (5.83)$$

Substituindo a expansão assimptótica dos deslocamentos (expressão 5.82) nas relações deformações-deslocamentos linearizadas (expressão 5.15), utilizando as relações 5.23, manipulando adequadamente os índices e reagrupando as potências de ε , obtém-se

$$\epsilon_{ij}^\varepsilon = \varepsilon^{-1} \epsilon_{ij}^{(0)} + \varepsilon^0 \epsilon_{ij}^{(1)} + \varepsilon^1 \epsilon_{ij}^{(2)} + \varepsilon^2 \dots, \quad (5.84)$$

em que

$$\epsilon_{ij}^{(0)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{(0)}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^{(0)}}{\partial y_i} \right) \quad \text{e} \quad (5.85)$$

$$\epsilon_{ij}^{(r)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{(r-1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{(r-1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i^{(r)}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^{(r)}}{\partial y_i} \right), \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.86)$$

A substituição da expressão 5.84 nas equações constitutivas (expressão 5.16) e a consideração das equações 5.1, 5.7, 5.17, 5.18 e 5.83 permitem, após a manipulação adequada dos índices, a obtenção de

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = \varepsilon^{-1} \sigma_{ij}^{(0)} + \varepsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)} + \varepsilon^1 \sigma_{ij}^{(2)} + \varepsilon^2 \dots, \quad (5.87)$$

em que as relações constitutivas para as diversas ordens de correcção correspondem a

$$\sigma_{ij}^{(0)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \epsilon_{kl}^{(0)}, \quad (5.88)$$

$$\sigma_{ij}^{(1)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \epsilon_{kl}^{(1)} - (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}(\mathbf{y}) \quad \text{e} \quad (5.89)$$

$$\sigma_{ij}^{(r+1)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \epsilon_{kl}^{(r+1)} - T^{(r)} \beta_{ij}(\mathbf{y}), \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.90)$$

De acordo com as expressões 5.85 e 5.86, as equações 5.88 a 5.90 podem ser reescritas, respectivamente, como

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \frac{1}{2} D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial y_l} + \frac{\partial u_l^{(0)}}{\partial y_k} \right), \quad (5.91)$$

$$\sigma_{ij}^{(1)} = \frac{1}{2} D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l^{(0)}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_l} + \frac{\partial u_l^{(1)}}{\partial y_k} \right) - (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}(\mathbf{y}) \quad \text{e} \quad (5.92)$$

$$\sigma_{ij}^{(r+1)} = \frac{1}{2} D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(r)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l^{(r)}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k^{(r+1)}}{\partial y_l} + \frac{\partial u_l^{(r+1)}}{\partial y_k} \right) - T^{(r)} \beta_{ij}(\mathbf{y}), \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.93)$$

Substituindo a expressão 5.87 nas equações de equilíbrio (expressão 5.14), utilizando as relações 5.23 e reagrupando as potências de ε , obtém-se

$$\varepsilon^{-2} \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial y_j} + \varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial y_j} \right) + \varepsilon^0 \left(\frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} + f_i \right) + \varepsilon^1 \dots = 0. \quad (5.94)$$

Devido ao facto de as equações 5.94 terem de ser válidas para qualquer $\varepsilon \rightarrow 0$, é então necessário que qualquer dos coeficientes das potências de ε seja nulo, obtendo-se para as várias potências de ε , *i.e.* para as diversas ordens de correcção, o seguinte conjunto inumerável de equações diferenciais:

$$\varepsilon^{-2} \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial y_j} = 0, \quad (5.95)$$

$$\varepsilon^{-1} \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial y_j} = 0, \quad (5.96)$$

$$\varepsilon^0 \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} + f_i = 0 \quad \text{e} \quad (5.97)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}^{(r+1)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(r+2)}}{\partial y_j} = 0, \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.98)$$

Considerando as expansões assintóticas 5.82 e 5.87, as condições de fronteira de Dirichlet (expressão 5.19) e de Neumann (expressão 5.20) do problema original correspondem, respectivamente, a

$$\varepsilon^0 u_i^{(0)} + \varepsilon^1 u_i^{(1)} + \varepsilon^2 u_i^{(2)} + \varepsilon^3 \dots = \bar{u}_i \quad \text{em} \quad \Gamma_{D_u} \quad \text{e} \quad (5.99)$$

$$\left(\varepsilon^{-1} \sigma_{ij}^{(0)} + \varepsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)} + \varepsilon^1 \sigma_{ij}^{(2)} + \varepsilon^2 \dots \right) n_j = \bar{t}_i \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_u}. \quad (5.100)$$

Assim, as condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann associadas às diversas ordens de correcção correspondem, respectivamente, a

$$\varepsilon^0 \Rightarrow u_i^{(0)} = \bar{u}_i \quad \text{e} \quad (5.101)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow u_i^{(r)} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_{D_u}, \quad r \in \mathbb{N}, \quad \text{e} \quad (5.102)$$

$$\varepsilon^{-1} \Rightarrow \sigma_{ij}^{(0)} n_j = 0, \quad (5.103)$$

$$\varepsilon^0 \Rightarrow \sigma_{ij}^{(1)} n_j = \bar{t}_i \quad \text{e} \quad (5.104)$$

$$\varepsilon^r \Rightarrow \sigma_{ij}^{(r+1)} n_j = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_u}, \quad r \in \mathbb{N}. \quad (5.105)$$

As soluções das equações diferenciais definidas pelas expressões 5.95 a 5.98 e associadas às condições de fronteira correspondentes às expressões 5.101 a 5.105 podem ser obtidas por recorrência. Na

realidade, obtendo as soluções $\sigma_{ij}^{(0)}$ das equações 5.95, é possível, por substituição nas equações 5.96, determinar as soluções $\sigma_{ij}^{(1)}$ em termos de $\sigma_{ij}^{(0)}$. Esta metodologia pode ser utilizada de modo recursivo, obtendo-se, deste modo, as soluções para as equações relativas a uma determinada ordem de correcção, recorrendo às soluções das equações associadas a ordens superiores.

5.4.2 Equações Diferenciais da Microescala

Analisando as equações diferenciais associadas à ordem de correcção -2 do campo de tensões (expressão 5.95), constata-se que

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \sigma_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (5.106)$$

No entanto, considerando a expressão 5.91 e atendendo à simetria do tensor de elasticidade, obtém-se

$$\sigma_{ij}^{(0)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial y_l}, \quad (5.107)$$

pelo que as condições 5.106 e 5.107 resultam em [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992]

$$\sigma_{ij}^{(0)} = 0 \quad \text{e} \quad (5.108)$$

$$u_i^{(0)} = u_i^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (5.109)$$

Deste modo, constata-se que o deslocamento $u_i^{(0)}$ é independente da coordenada \mathbf{y} da microescala, correspondendo assim ao deslocamento global do material homogeneizado associado à macroescala. Neste contexto, substituindo a expressão 5.108 nas equações diferenciais associadas à ordem de correcção -1 do campo de tensões (expressão 5.96) obtém-se

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial y_j} = 0. \quad (5.110)$$

Considerando a expressão 5.92 e atendendo à simetria do tensor de elasticidade, obtém-se

$$\sigma_{ij}^{(1)} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_l} \right) - (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}(\mathbf{y}), \quad (5.111)$$

pelo que as equações 5.110 correspondem a

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_l} \right) - (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}(\mathbf{y}) \right] = 0. \quad (5.112)$$

O facto de os termos $\partial u_k^{(0)}/\partial x_l$ e $(T^{(0)} - T_0)$ da expressão 5.112 serem constantes relativamente aos operadores $\partial \cdot / \partial y_j$ (cf. equações 5.109 e 5.45) permite, de acordo com o princípio da sobreposição linear, assumir as seguintes soluções para as equações 5.112:

$$u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\chi_i^{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l}(\mathbf{x}) + \Psi_i(\mathbf{y}) \left[T^{(0)}(\mathbf{x}) - T_0 \right] + \bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}). \quad (5.113)$$

$\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x})$ são constantes de integração em \mathbf{y} . χ_i^{kl} e Ψ_i correspondem às componentes Y-periódicas do tensor do campo de deslocamentos característicos e do vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva, respectivamente. Substituindo as equações 5.113 na expressão 5.111, reajustando os índices mudos e pondo em evidência os factores comuns às parcelas do segundo membro, obtém-se

$$\sigma_{ij}^{(1)} = \tilde{\sigma}_{ij}^{mn} \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} + \tilde{\sigma}_{ij} \left[T^{(0)}(\mathbf{x}) - T_0 \right], \quad (5.114)$$

em que

$$\hat{\sigma}_{ij}^{mn} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \quad \text{e} \quad (5.115)$$

$$\check{\sigma}_{ij} = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} - \beta_{ij}(\mathbf{y}) \quad (5.116)$$

são funções Y -periódicas, com

$$\Gamma_{kl}^{mn} = \delta_{km} \delta_{ln}. \quad (5.117)$$

δ_{ij} é o símbolo de delta de Kronecker. Atendendo às equações 5.109, a substituição das equações 5.114 na expressão 5.110 resulta em

$$\frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}^{mn}}{\partial y_j} \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} + \frac{\partial \check{\sigma}_{ij}}{\partial y_j} (T^{(0)} - T_0) = 0. \quad (5.118)$$

A arbitrariedade dos segundos factores das parcelas do primeiro membro das equações 5.118 obriga a que os correspondentes primeiros factores sejam nulos, pelo que as equações diferenciais de equilíbrio da microescala correspondem a

$$\frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}^{mn}}{\partial y_j} = 0 \quad \text{e} \quad (5.119)$$

$$\frac{\partial \check{\sigma}_{ij}}{\partial y_j} = 0, \quad (5.120)$$

ou, de acordo com as expressões 5.115 e 5.116, a

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl} \left(\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \right] = 0 \quad \text{e} \quad (5.121)$$

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} - \beta_{ij} \right] = 0, \quad (5.122)$$

respectivamente. Deste modo, de acordo com as equações 5.121 e 5.122, as componentes do tensor do campo de deslocamentos característicos e do vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva correspondem, respectivamente, às soluções $\chi_k^{mn} \in \tilde{V}_Y$ e $\Psi_k \in \tilde{V}_Y$ dos problemas variacionais auxiliares

$$\int_Y D_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_Y D_{ijmn} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \quad \text{e} \quad (5.123)$$

$$\int_Y D_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_Y \beta_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \quad (5.124)$$

em que \tilde{V}_Y é o conjunto das funções Y -periódicas contínuas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y . A exigência de valores médios nulos em Y para as soluções das equações 5.123 e 5.124 constitui uma condição de unicidade para o tensor χ do campo de deslocamentos característicos [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992] e do vector Ψ dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva.

5.4.3 Equações Diferenciais da Macroescala

Aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ — valor médio em Y — aos dois termos das equações diferenciais de equilíbrio associadas à ordem de correcção 0 do campo de tensões (expressão 5.97), obtém-se

$$\left\langle \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} \right\rangle_Y + \left\langle \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} \right\rangle_Y + \langle f_i \rangle_Y = 0. \quad (5.125)$$

De acordo com a definição de valor médio de uma função Y -periódica em Y , o teorema da divergência, e atendendo à anti-simetria do versor n_j na fronteira Γ_Y do domínio da célula unitária, tem-se que

$$\left\langle \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} \right\rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y \frac{\partial \sigma_{ij}^{(2)}}{\partial y_j} dY = \frac{1}{|Y|} \int_{\Gamma_Y} \sigma_{ij}^{(2)} n_j d\Gamma = 0. \quad (5.126)$$

Assim, atendendo ao facto de o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ comutar com os operadores $\partial \cdot / \partial x_j$ e o vector de forças volúmicas, f_i , não depender de \mathbf{y} , tem-se, considerando as equações 5.126, que a expressão 5.125 corresponde a

$$\frac{\partial \langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y}{\partial x_j} + f_i = 0. \quad (5.127)$$

A expressão 5.127 representa o conjunto das equações diferenciais homogeneizadas de equilíbrio da macroescala. Por outro lado, substituindo as equações 5.115 e 5.116 na expressão 5.114 e aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$, obtêm-se as relações constitutivas homogeneizadas:

$$\langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y = D_{ijmn}^h \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} - (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}^h, \quad (5.128)$$

em que

$$D_{ijmn}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(I_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) dY \quad e \quad (5.129)$$

$$\beta_{ij}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left[\beta_{ij}(\mathbf{y}) - D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \right] dY \quad (5.130)$$

correspondem às componentes dos tensores homogeneizados de elasticidade e dos módulos térmicos, \mathbf{D}^h e β^h , respectivamente. Por fim, integrando as equações 5.104 na superfície Γ_{N_u} e aplicando o teorema da divergência, tem-se que

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i d\Gamma. \quad (5.131)$$

Aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ a ambos os membros das equações 5.131, atendendo ao facto de o operador $\langle \cdot \rangle_Y$ comutar com os operadores $\partial \cdot / \partial x_j$ e de o vector \bar{t}_i não depender de \mathbf{y} , e considerando novamente o teorema da divergência, obtêm-se as equações

$$\langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_t, \quad (5.132)$$

que correspondem às condições de Neumann associadas às variáveis do problema definido pelas equações 5.127. Neste contexto, considerando

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij}^{(1)} \rangle_Y \quad (5.133)$$

e atendendo às equações 5.127, 5.101, 5.132 e 5.128, tem-se que o campo de deslocamentos $u_i^{(0)}$ corresponde à solução do problema de termoelasticidade homogeneizado definido por

$$\frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (5.134)$$

$$u_i^{(0)} = \bar{u}_i \quad \text{em } \Gamma_{D_u}, \quad (5.135)$$

$$\Sigma_{ij} n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_{N_u}, \quad \text{com} \quad (5.136)$$

$$\Sigma_{ij} = D_{ijkl}^h \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} - (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}^h \quad \text{em } \Omega, \quad (5.137)$$

respectivamente, em que as componentes D_{ijkl}^h e β_{ij}^h dos tensores homogeneizados de elasticidade e dos módulos térmicos se obtêm, após a resolução das equações diferenciais de equilíbrio da microescala (expressões 5.121 e 5.122) e a manipulação adequada dos índices, a partir das equações 5.129 e 5.130. Σ_{ij} denota as componentes do campo macroestrutural homogeneizado de tensões.

A resolução do problema termoelástico homogeneizado consiste na determinação do campo macroestrutural de deslocamentos, que corresponde à solução $\mathbf{u}^{(0)} \in V_{\Omega}^0$ do problema variacional auxiliar

$$\int_{\Omega} D_{ijkl}^h \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega} (T^{(0)} - T_0) \beta_{ij}^h \frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} f_i v_i d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i v_i d\Gamma, \quad \forall v \in V_{\Omega}^0, \quad (5.138)$$

em que V_{Ω}^0 é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em Γ_{D_u} .

Uma vez obtido o campo de deslocamentos $u_i^{(0)}$, as equações 5.113 permitem determinar, a menos de constantes aditivas, o campo de deslocamentos $u_i^{(1)}$. No entanto, a consideração das duas escalas \mathbf{x} e \mathbf{y} — associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala Ω e da microescala Y , respectivamente — baseia-se, tal como foi referido na Secção 5.2, na hipótese de existirem oscilações periódicas dos campos resultantes de deslocamentos, advindas da periodicidade associada à heterogeneidade microestrutural. Estas oscilações devem, supostamente, sobrepor-se a campos macroscópicos em que não se toma em consideração, pelo menos de modo directo, a influência de tais heterogeneidades microestruturais. Assim, as oscilações podem ser interpretadas como flutuações em torno de um valor médio macroscópico (*vd.* figura 5.3). Neste contexto, resulta que as constantes $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x})$ de integração em \mathbf{y} do termo $u_i^{(1)}$ associado à expansão assimptótica 5.82 do campo de deslocamentos podem, sem perda de generalidade, ser consideradas nulas, *i.e.* $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$. Deste modo, a metodologia apresentada permite definir, de acordo com a ilustração esquemática da figura 5.3, uma aproximação $\tilde{u}_i^{\varepsilon}(\mathbf{x})$ de primeira ordem, *i.e.* linear relativamente a ε , da expansão assimptótica do campo de deslocamentos, $u_i^{\varepsilon}(\mathbf{x})$, a que, de acordo com as equações 5.82 e 5.109, corresponde

$$u_i^{\varepsilon}(\mathbf{x}) \approx \tilde{u}_i^{\varepsilon}(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (5.139)$$

Substituindo a expressão 5.113 nas equações 5.139 e atendendo à hipótese de $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$, obtêm-se, em função das componentes do tensor do campo de deslocamentos característicos, as equações

$$u_i^{\varepsilon}(\mathbf{x}) \approx \tilde{u}_i^{\varepsilon}(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}) - \varepsilon \chi_i^{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l}(\mathbf{x}) + \varepsilon \Psi_i(\mathbf{y}) [T^{(0)}(\mathbf{x}) - T_0]. \quad (5.140)$$

Devido ao carácter linear, em ε , da aproximação 5.140, χ é usualmente designado como tensor do campo de deslocamentos característicos de primeira ordem.

5.4.4 Correctores de Deslocamento de Ordem Superior

Os correctores de ordem superior que constituem a expansão assimptótica do campo de deslocamentos 5.82 podem ser obtidos, de acordo com o que foi referido na Secção 5.4.1, pela resolução recorrente das equações diferenciais associadas a ordens de correcção superiores. Neste contexto, considere-se, a título de exemplo, a obtenção dos correctores de segunda ordem, $u_i^{(2)}$, associados à expansão assimptótica 5.82 do campo de deslocamentos. Neste caso, devem ser resolvidas as equações 5.97 com base nas soluções $u_i^{(0)}$ e $u_i^{(1)}$, relativas às equações 5.95 e 5.96, respectivamente. Deste modo, considerando a expressão 5.93 para $r = 1$, atendendo à simetria do tensor de elasticidade e substituindo-a, em conjunto com a relação 5.111, nas equações diferenciais de equilíbrio

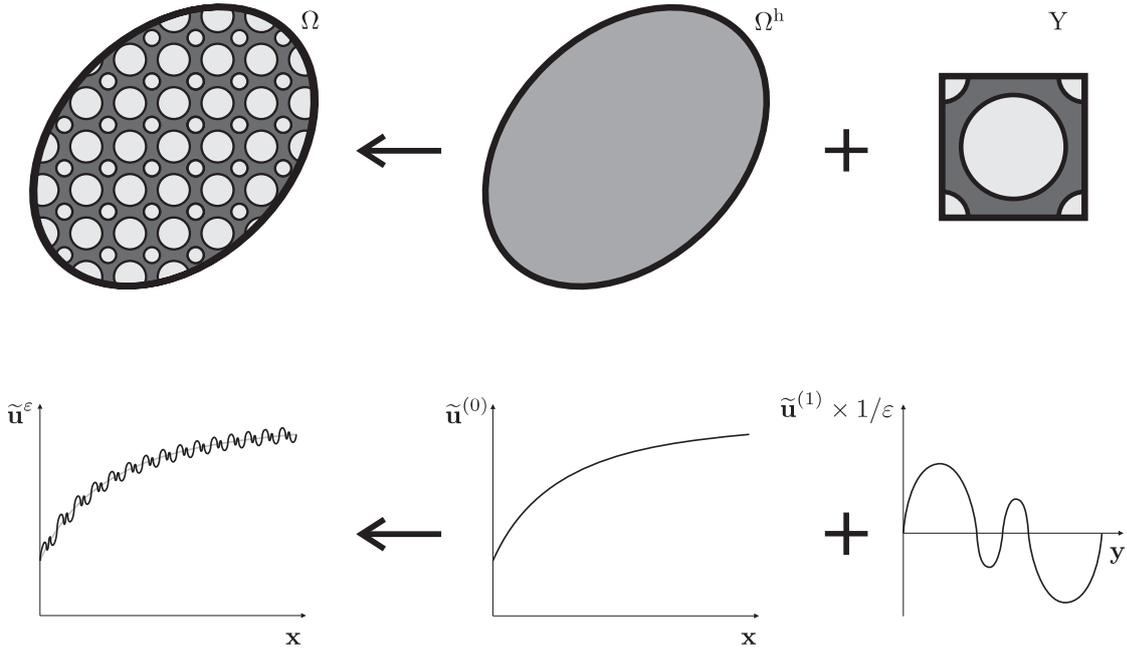


Figura 5.3: Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assintótica do campo de deslocamentos, para um caso unidimensional — o campo de deslocamentos, em Ω , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em Ω^h , com as flutuações de primeira ordem advindas da Y -periodicidade do campo da microescala, em Y .

associadas à ordem de correcção 0 do campo de tensões (expressão 5.97), obtém-se

$$D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left[\frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_k^{(1)}}{\partial x_j \partial y_l} \right] + \frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^{(2)}}{\partial y_l} \right) \right] - \beta_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Delta T^{(0)}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial y_j} \left[T^{(1)} \beta_{ij}(\mathbf{y}) \right] + f_i = 0, \quad (5.141)$$

em que

$$\Delta T^{(0)} = \left[T^{(0)}(\mathbf{x}) - T_0 \right] = \Delta T^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (5.142)$$

Por outro lado, substituindo a expressão 5.137 nas equações 5.134 e atendendo ao facto de o tensor homogeneizado de elasticidade \mathbf{D}^h ser constante, resulta que

$$f_i = -D_{ijkl}^h \frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l} + \beta_{ij}^h \frac{\partial \Delta T^{(0)}}{\partial x_j}. \quad (5.143)$$

Substituindo as equações 5.113 (com $\bar{u}_i^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$) e 5.143 nas equações 5.141, considerando a equação 5.49, manipulando adequadamente os índices e reagrupando os vários termos, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(2)}}{\partial y_l} \right] = \bar{D}_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k^{(0)}}{\partial x_j \partial x_l} + \bar{\beta}_{ij} \frac{\partial \Delta T^{(0)}}{\partial x_j}, \quad (5.144)$$

em que

$$\bar{D}_{ijkl} = D_{ijkl}^h - D_{ijkl}(\mathbf{y}) + D_{ijmn}(\mathbf{y}) \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} + \frac{\partial}{\partial y_n} [D_{inmj}(\mathbf{y}) \chi_m^{kl}] \quad \text{e} \quad (5.145)$$

$$\bar{\beta}_{ij} = \beta_{ij}^h - \beta_{ij}(\mathbf{y}) + D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} + \frac{\partial}{\partial y_l} [D_{ilkj}(\mathbf{y}) \Psi_k + \beta_{il}(\mathbf{y}) \Upsilon^j]. \quad (5.146)$$

O facto de os termos $\partial^2 u_k^{(0)} / \partial x_j \partial x_l$ e $\partial \Delta T^{(0)} / \partial x_j$ da expressão 5.144 serem constantes relativamente aos operadores $\partial \cdot / \partial y_j$ (cf. equações 5.109) permite, de acordo com o princípio da sobreposição linear, assumir o seguinte conjunto de soluções para as equações 5.144:

$$u_i^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\Theta_i^{jkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 u_j^{(0)}}{\partial x_k \partial x_l}(\mathbf{x}) + \vartheta_i^j(\mathbf{y}) \frac{\partial \Delta T^{(0)}}{\partial x_j}(\mathbf{x}) + \bar{u}_i^{(2)}(\mathbf{x}), \quad (5.147)$$

em que $\bar{u}_i^{(2)}(\mathbf{x})$ são constantes de integração em \mathbf{y} . Θ_i^{jkl} e ϑ_i^j correspondem às componentes Y-periódicas dos tensores do campo de deslocamentos característicos de segunda ordem e dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva de segunda ordem, respectivamente.

De acordo com as expressões 5.144 a 5.146, as componentes dos tensores do campo de deslocamentos característicos de segunda ordem e dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva de segunda ordem correspondem, respectivamente, às soluções $\Theta_m^{kjl} \in \tilde{V}_Y$ e $\vartheta_k^j \in \tilde{V}_Y$ dos problemas variacionais auxiliares

$$\begin{aligned} \int_Y D_{inmp} \frac{\partial \Theta_m^{kjl}}{\partial y_p} \frac{\partial v_i}{\partial y_n} dY &= \int_Y \left(D_{ijkl}^h - D_{ijkl} + D_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \right) v_i dY \\ &\quad - \int_Y D_{inmj} \chi_m^{kl} \frac{\partial v_i}{\partial y_n} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y \quad \text{e} \end{aligned} \quad (5.148)$$

$$\begin{aligned} \int_Y D_{imkl} \frac{\partial \vartheta_k^j}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_m} dY &= - \int_Y \left(\beta_{ij}^h - \beta_{ij} + D_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \right) v_i dY \\ &\quad + \int_Y (D_{ilkj} \Psi_k + \beta_{il} \Upsilon^j) v_i dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \end{aligned} \quad (5.149)$$

em que \tilde{V}_Y é o conjunto das funções Y-periódicas contínuas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y .

Procedendo de modo análogo, é possível obter os restantes correctores de ordem superior da expansão assimptótica do campo de deslocamentos 5.82. Verifica-se que os correctores de ordem $k \geq 3$, $k \in \mathbb{N}$, são compostos por dois termos relativos aos deslocamentos induzidos mecânica e termicamente, os quais são proporcionais às derivadas parciais mistas de ordem k dos deslocamentos $u_i^{(0)}$ e de ordem $k - 1$ da temperatura $T^{(0)}$ do material homogeneizado associado à macroescala, respectivamente. Os factores de proporcionalidade correspondentes consistem nas componentes dos tensores do campo de deslocamentos característicos e dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva de ordem k . Neste contexto, assumindo ainda, de acordo com o referido na Secção 5.4.3, que as constantes de integração em \mathbf{y} para as ordens superiores são nulas, a expressão 5.82 resulta em

$$\begin{aligned} u_i^\varepsilon(\mathbf{x}) &= u_i^{(0)}(\mathbf{x}) - \varepsilon \chi_i^{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l}(\mathbf{x}) + \varepsilon \Psi_i(\mathbf{y}) \Delta T^{(0)}(\mathbf{x}) - \varepsilon^2 \Theta_i^{jkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 u_j^{(0)}}{\partial x_k \partial x_l}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \varepsilon^2 \vartheta_i^j(\mathbf{y}) \frac{\partial \Delta T^{(0)}}{\partial x_j}(\mathbf{x}) - \varepsilon^3 \dots \end{aligned} \quad (5.150)$$

Embora o campo de deslocamentos u_i^ε seja definido por um conjunto inumerável de termos (cf. expressão 5.150), verifica-se que, no caso da relação ε entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroestrutura ser reduzida ($\varepsilon \ll 1$), os termos de ordem superior se revelam numericamente insignificantes face à aproximação de primeira ordem 5.140 [Terada 1996].

5.5 Metodologia Convencional de Homogeneização

Na prática, verifica-se que uma parte significativa das aplicações estruturais de engenharia baseadas em materiais heterogêneos de microestrutura periódica se encontra associada a valores de $\varepsilon \ll 1$. Nesta situação, tem-se, de acordo com o exposto nas Secções 5.3.4 e 5.4.4, que as aproximações de primeira ordem dos campos de temperaturas e de deslocamentos se revelam adequadas para a representação dos campos de temperaturas T^ε e de deslocamentos u_i^ε , respectivamente. A não-consideração dos termos de correcção de ordem superior simplifica a metodologia de homogeneização por expansão assintótica, resultando na metodologia convencional de homogeneização [Terada 1996].

Atendendo ao exposto nas secções anteriores, a metodologia convencional de homogeneização consiste, em termos do problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada, numa técnica matemática rigorosa, com base na qual se substitui a resolução de dois problemas associados a operadores diferenciais parciais com coeficientes de variação periódica de elevada frequência espacial (*cf.* equações 5.8 a 5.12 e 5.14 a 5.20) pela resolução de dois problemas associados a operadores diferenciais parciais com coeficientes constantes (*cf.* equações 5.67 a 5.71 e 5.134 a 5.137), que constituem o problema homogeneizado de termoelasticidade quase-estática desacoplada e linear. Por sua vez, os coeficientes dos problemas homogeneizados são determinados a partir da solução de três problemas definidos numa célula da microescala, cujas fronteiras se encontram associadas a condições de fronteira de periodicidade (*cf.* equações 5.56 e 5.62, 5.123 e 5.129, e 5.124 e 5.130).

Neste contexto e em termos numéricos, uma das principais vantagens desta metodologia consiste no facto de permitir uma redução bastante significativa do número de graus de liberdade associados à resolução do problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada. De facto, esta técnica permite que a modelação das particularidades microestruturais seja efectuada com base numa única célula unitária, sendo, ainda, a macroescala modelada como se de um meio homogêneo se tratasse.

5.6 Metodologia Convencional de Localização

Outra vantagem relevante da aplicação do método de homogeneização por expansão assintótica ao problema de termoelasticidade desacoplada quase-estática consiste, como foi anteriormente referido, no facto de permitir a caracterização dos campos microestruturais de fluxos superficiais de calor por condução, de deformações e de tensões. Na realidade, ao contrário dos restantes métodos usuais de homogeneização, o método de homogeneização por expansão assintótica permite a obtenção explícita de equações que possibilitam a determinação dos níveis microestruturais de fluxo superficial de calor por condução, de deformação e de tensão. Este processo, designado por localização, corresponde, em termos genéricos, ao processo inverso da homogeneização (*cf.* figura 5.4).

Atendendo às equações 5.44, 5.88 e 5.108, verifica-se que $q_i^{(0)} = 0$, $\epsilon_{ij}^{(0)} = 0$ e $\sigma_{ij}^{(0)} = 0$. Deste modo, os campos de fluxos superficiais de calor por condução, de deformações e de tensões correspondem, de acordo com as expressões 5.24, 5.84 e 5.87, a

$$q_i^\varepsilon = \varepsilon^0 q_i^{(1)} + \varepsilon^1 q_i^{(2)} + \varepsilon^2 \dots, \quad (5.151)$$

$$\epsilon_{ij}^\varepsilon = \varepsilon^0 \epsilon_{ij}^{(1)} + \varepsilon^1 \epsilon_{ij}^{(2)} + \varepsilon^2 \dots \quad \text{e} \quad (5.152)$$

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = \varepsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)} + \varepsilon^1 \sigma_{ij}^{(2)} + \varepsilon^2 \dots, \quad (5.153)$$

respectivamente. As expressões 5.151 a 5.153 representam as expansões em série dos campos de fluxos superficiais de calor por condução, de deformações e de tensões resultantes da Y-periodicidade da heterogeneidade microestrutural, respectivamente. No entanto, na metodologia convencional de homogeneização consideram-se aproximações de primeira ordem em ε para os campos de temperaturas e de deslocamentos (*cf.* Secção 5.5). Assim, de acordo com as relações 5.47, 5.86, para $r = 1$, e 5.92, obtêm-se aproximações \tilde{q}_i^ε , $\tilde{\epsilon}_{ij}^\varepsilon$ e $\tilde{\sigma}_i^\varepsilon$ de ordem zero em ε para os campos microestruturais

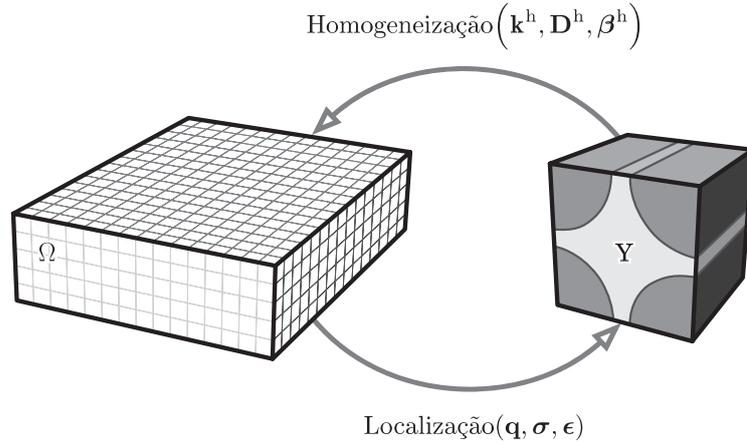


Figura 5.4: Ilustração esquemática dos fluxos de informação associados às técnicas de homogeneização e de localização, que ocorrem entre a macroescala Ω e a microescala Y .

de fluxos superficiais de calor por condução, de deformações e de tensões, respectivamente. Estas aproximações consistem em

$$q_i^\varepsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{q}_i^\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^0 q_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (5.154)$$

$$\epsilon_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{\epsilon}_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^0 \epsilon_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad e \quad (5.155)$$

$$\sigma_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) \approx \tilde{\sigma}_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^0 \sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (5.156)$$

Assim, de acordo com as expressões 5.50 e 5.51, o campo microestrutural de fluxos superficiais de calor por condução associado à metodologia convencional de localização (expressão 5.154) corresponde a

$$q_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k_{ij}(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} - \Gamma_j^k \right) \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_k}. \quad (5.157)$$

Por outro lado, substituindo a expressão 5.113 nas equações 5.86, para $r = 1$, e manipulando adequadamente os índices, o campo microestrutural de deformação associado à metodologia convencional de localização (expressão 5.155) resulta em

$$\epsilon_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathfrak{S}_{ij}^{kl} \left[\left(\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} + \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} (T^{(0)} - T_0) \right], \quad (5.158)$$

em que⁷

$$\mathfrak{S}_{ij}^{kl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (5.159)$$

Por fim, de acordo com as expressões 5.114 a 5.116, o campo microestrutural de tensões associado à metodologia convencional de localização (expressão 5.156) corresponde a

$$\sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left(\Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} + \left[D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} - \beta_{ij}(\mathbf{y}) \right] (T^{(0)} - T_0). \quad (5.160)$$

As equações 5.157 5.158 e 5.160 permitem obter, para um determinado ponto da macroescala \mathbf{x} , os valores aproximados dos campos de fluxos superficiais de calor por condução, de deformações

⁷ \mathfrak{S}_{ij}^{kl} correspondem, num referencial cartesiano ortonormado, às componentes do tensor identidade não-geral de quarta ordem \mathfrak{S} (cf. equação 4.6).

e de tensões no seio da microestrutura heterogénea. Pelo contrário, os campos macroestruturais homogeneizados de fluxos superficiais de calor por condução, Ξ_i , e de tensões, Σ_{ij} , ao corresponderem aos valores médios, respectivamente, dos campos microestruturais de fluxos superficiais de calor por condução $q_i^{(1)}$ e de tensões $\sigma_{ij}^{(1)}$ em Y (*cf.* equações 5.66 e 5.133), revelam-se incapazes de representarem quaisquer flutuações microestruturais do campo correspondentes.

5.7 Observações Finais

A aplicação do método da homogeneização por expansão assintótica ao problema de termoelasticidade desacoplada quase-estática foi desenvolvida de modo formal no presente capítulo. As várias funções envolvidas foram consideradas como sendo suficientemente regulares, o que, em geral, não se verifica. De facto, as componentes dos tensores de condutividade térmica \mathbf{k} , de expansibilidade térmica $\boldsymbol{\alpha}$ e de elasticidade \mathbf{D} não são sequer contínuas na interface matriz-reforço de um material compósito. Assim, embora a utilização das expansões assintóticas dos campos de temperatura (expressão 5.22) e de deslocamentos (expressão 5.82) se revelem úteis na resolução do problema da homogeneização por expansão assintótica em termoelasticidade desacoplada quase-estática, a questão essencial reside no facto de a justificação rigorosa do método das múltiplas escalas requerer uma regularidade excessiva das funções envolvidas. Assim, o desenvolvimento matematicamente rigoroso da metodologia de homogeneização de equações diferenciais parciais com coeficientes não-regulares envolve a utilização de conceitos, tais como, por exemplo, o de convergência fraca. Neste contexto, o desenvolvimento rigoroso da teoria de homogeneização baseia-se na consideração de métodos como, por exemplo, o de Tartar [Tartar 1978] ou da convergência a duas escalas [Nguetseng 1989]. Porém, o estudo matematicamente rigoroso da metodologia de homogeneização de equações diferenciais parciais com coeficientes não-regulares não se enquadra no âmbito deste trabalho.

Capítulo 6

Computação Paralela

Apresentam-se e discutem-se, de modo sucinto, os principais aspectos relacionados com a computação paralela. Abordam-se as principais arquitecturas de computação paralela, as redes de interligação utilizadas, o desempenho dos computadores paralelos, a programação de computadores paralelos e a interface de passagem de mensagens MPI.

6.1 Introdução

A resolução de muitos problemas científicos ou aplicações de engenharia leva à necessidade de uma elevada capacidade de processamento computacional. A modelação numérica do comportamento de materiais compósitos por elementos finitos constitui um exemplo deste tipo de problemas. Por vezes, a dimensão de certos problemas numéricos pode ser tão elevada que inviabilize a sua resolução em tempo útil recorrendo a um único processador ou exija recursos de memória superiores aos disponíveis num só computador. Estas limitações justificam a utilização da computação paralela.

Uma definição concisa e global de computação paralela é difícil de se concretizar, devido ao facto de envolver vários aspectos, tais como, por exemplo, as arquitecturas de computador, as redes de ligação, a algoritmia, os modelos de programação, *etc.* No entanto, de acordo com Leopold [Leopold 2001], a computação paralela corresponde à “resolução mais rápida de uma tarefa, recorrendo à utilização simultânea de múltiplos processadores”. Por conseguinte, um computador paralelo é constituído por um conjunto de elementos de processamento que comunicam e cooperam na resolução, em tempo útil, de problemas de grande dimensão [Almasi e Gottlieb 1994]. Ao permitir a cooperação entre os vários processadores, a rede de interligação dos vários componentes constitui, tal como se verá, um dos principais factores que influenciam a aplicabilidade de um computador paralelo.

6.2 Arquitecturas de Computação Paralela

As diferentes arquitecturas de computação paralela podem ser classificadas de acordo com variados aspectos, tais como, por exemplo, o modelo de controlo, o tipo de processador, o

modelo de memória, a topologia da rede de comunicações, *etc.* No entanto, a enorme diversidade de arquiteturas existentes impossibilita uma classificação universal, pelo que várias taxionomias têm vindo a ser propostas [Feng 1972, Shore 1973, Händler 1977, Hwang e Briggs 1984, Basu 1987, Hockney 1987, Snyder 1988, Johnson 1988, Skillicorn 1988, Dasgupta 1990, Krishnamurthy 1990, Duncan 1990, Martin *et al.* 1991, Almasi e Gottlieb 1994]. Todavia, a mais célebre foi desenvolvida, em 1966, por Flynn [Flynn 1966].

6.2.1 Taxionomia de Flynn

De acordo com Flynn [Flynn 1966, Flynn 1972], as diversas arquiteturas computacionais classificam-se com base na relação existente entre fluxos de dados e fluxos de instruções. Flynn definiu fluxo de instruções como “sequência de instruções executadas pela máquina” e fluxo de dados como “sequência de dados utilizada pelo fluxo de instruções” [Flynn 1966]. Neste contexto, desta classificação resultam as seguintes categorias:

1. Fluxo único de instruções–fluxo único de dados — SISD¹;
2. Fluxo único de instruções–fluxos múltiplos de dados — SIMD²;
3. Fluxos múltiplos de instruções–fluxo único de dados — MISD³;
4. Fluxos múltiplos de instruções–fluxos múltiplos de dados — MIMD⁴.

A categoria SISD é usualmente associada aos tradicionais computadores sequenciais de um processador (máquina de von Neumann) em que se executa, de um modo sequencial, um único fluxo de instruções sobre um único fluxo de dados (*vd.* figura 6.1). Não obstante, existem arquiteturas SISD paralelas, tais como, por exemplo, os processadores VLIW⁵ e os sistemas redundantes [Hlavička 1997]. Neste caso, a utilização do paralelismo visa o aumento não do desempenho, mas da fiabilidade.

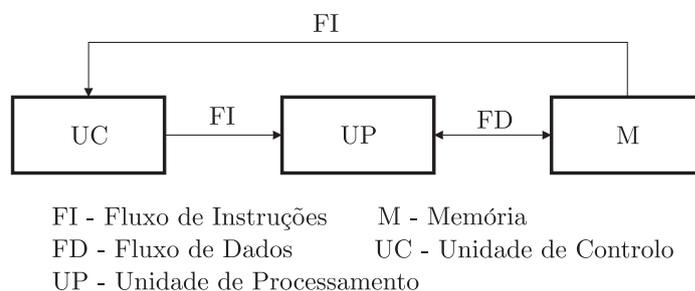


Figura 6.1: Representação esquemática de uma arquitetura SISD.

A categoria SIMD corresponde a computadores paralelos em que múltiplas unidades de processamento (UP) executam sincronamente, sob o controlo de uma única unidade de controlo (UC), o mesmo fluxo de instruções sobre distintos fluxos de dados (*vd.* figura 6.2).

A categoria MISD é constituída por computadores com múltiplos processadores que executam diferentes fluxos de instruções sobre um único fluxo de dados (*vd.* figura 6.3). Existem poucos computadores deste tipo de arquitectura, normalmente de aplicação específica. O *array*⁶

¹SISD: sigla de *Single Instruction stream–Single Data stream*.

²SIMD: sigla de *Single Instruction stream–Multiple Data streams*.

³MISD: sigla de *Multiple Instruction streams–Single Data stream*.

⁴MIMD: sigla de *Multiple Instruction streams–Multiple Data streams*.

⁵VLIW: sigla de *Very Long Instruction Word*.

⁶O termo *array* é utilizado para designar uma classe de computadores em que uma única UC controla várias UP idênticas [Hillis 1985]. As UP encontram-se, geralmente, interligadas de modo regular por uma rede de comunicações.

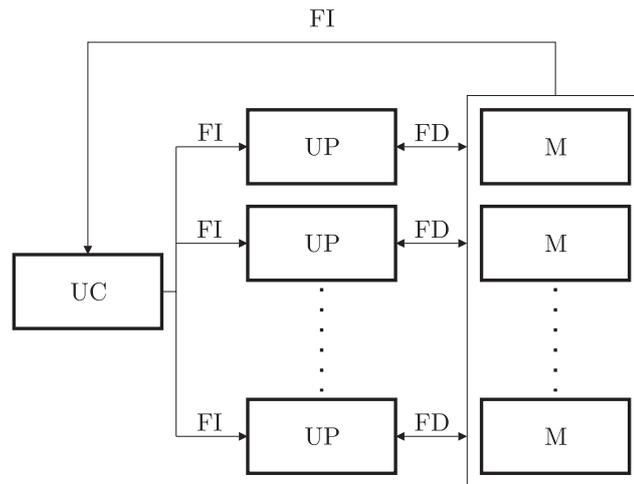


Figura 6.2: Representação esquemática de uma arquitectura SIMD.

sistólico consiste num exemplo de uma máquina MISD [Murdocca e Heuring 2000]. Este sistema é constituído por uma rede de UP interligadas e globalmente sincronizadas. Em cada ciclo, cada UP recebe dados de uma UP vizinha, sobre os quais efectua uma operação. No ciclo seguinte, o resultado da operação é enviado para outra UP adjacente.

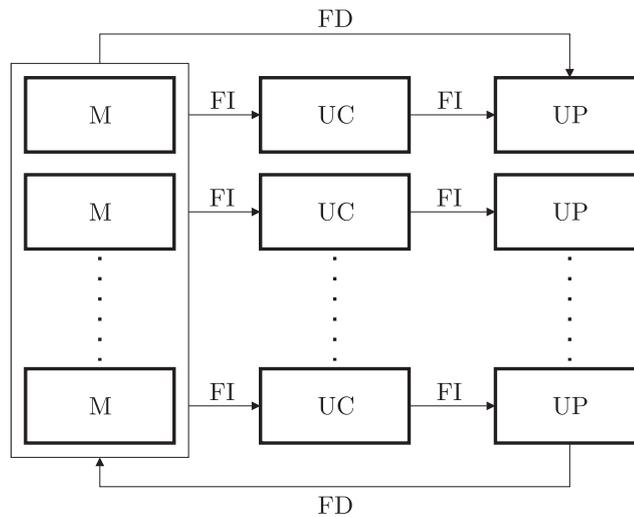


Figura 6.3: Representação esquemática de uma arquitectura MISD.

Por fim, a categoria MIMD corresponde a computadores com múltiplos processadores que executam, simultânea e independentemente, diferentes fluxos de instruções sobre distintos fluxos de dados (*vd.* figura 6.4). Esta arquitectura, bastante popular desde os anos 90, engloba a maioria dos computadores paralelos actuais.

Embora seja bastante concisa e amplamente utilizada, a taxionomia de Flynn apresenta algumas limitações. Em particular, esta classificação não é suficientemente abrangente para incluir alguns dos tipos de computador moderno. Esta limitação deve-se ao facto de se assumir que o controlo das várias máquinas é exclusivamente feito com base numa sequência de instruções, *i.e.* segundo o

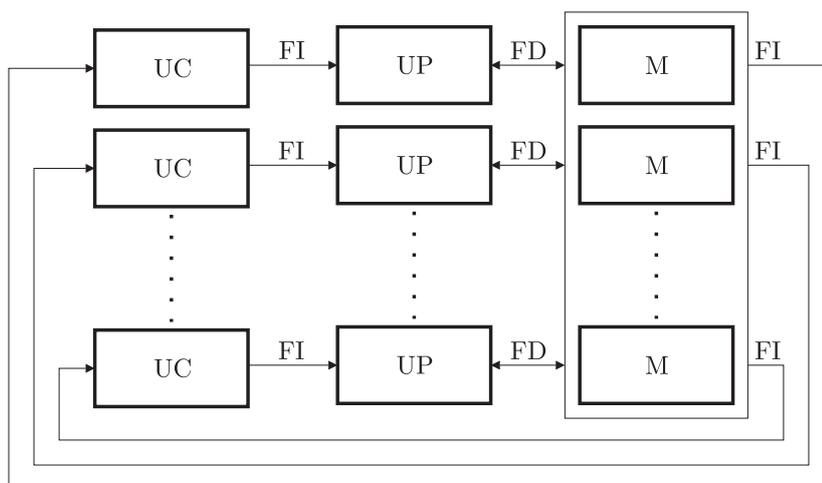


Figura 6.4: Representação esquemática de uma arquitectura MIMD.

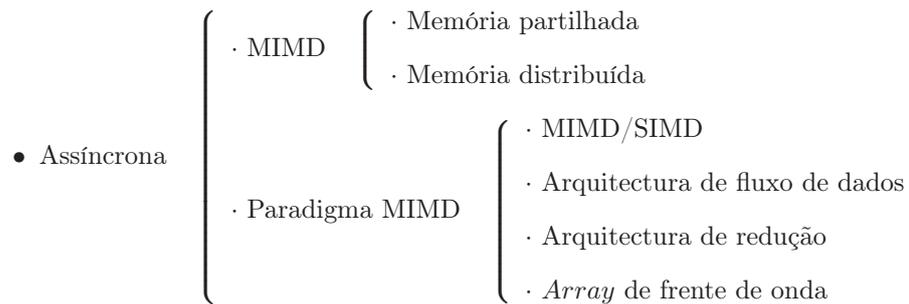
modelo de von Neumann. No entanto, como se verá, têm vindo a surgir arquitecturas cujo controlo se baseia em diferentes modelos. Deste modo, estas arquitecturas constituem classes que não são abrangidas pela taxionomia de Flynn. Por outro lado, esta taxionomia também não hierarquiza as diferentes arquitecturas para uma dada classe. Por conseguinte, há a necessidade de se utilizar uma classificação mais flexível, que considere os vários aspectos envolvidos na organização dos computadores paralelos actuais. Neste contexto, Duncan [Duncan 1990] propôs uma classificação de arquitecturas paralelas mais abrangente.

6.2.2 Taxionomia de Duncan

Duncan exclui, na sua taxionomia, as arquitecturas em que o paralelismo se baseie exclusivamente em mecanismos de baixo nível (*e.g. pipelining*⁷ de instruções). Esta decisão deve-se, fundamentalmente, ao facto de a maioria dos computadores possuírem actualmente este tipo de mecanismos de paralelismo. Deste modo, a sua consideração alargaria a classe das máquinas paralelas à quase totalidade dos computadores modernos, o que tornaria a taxionomia inútil. Outra característica importante da taxionomia proposta por Duncan é a manutenção das classes representativas de Flynn — SIMD e MIMD — hoje em dia amplamente aceites pela comunidade científica. Neste contexto, da taxionomia de Duncan resultam as seguintes categorias:

- Síncrona
 - Processador vectorial
 - SIMD
 - Array de processadores
 - Processadores associativos
 - Array sistólico

⁷*Pipelining* é uma técnica em que se sobrepõe a execução de várias instruções. Enquanto que num processo sem *pipeline* uma instrução só é executada após se completar a anterior, num processo com *pipeline* uma instrução é dividida em etapas, começando uma instrução a ser executada logo que se complete a primeira etapa da instrução anterior, resultando assim numa diminuição do tempo de execução necessário.



6.2.2.1 Arquitecturas Síncronas

Numa máquina paralela síncrona os processadores executam, com base num relógio global, a mesma instrução em simultâneo. Esta categoria subdivide-se em processador vectorial, máquina SIMD e *array* sistólico.

Um processador vectorial [Hintz e Tate 1972, Watson 1972] caracteriza-se por executar operações sobre vectores, utilizando apenas uma única instrução. É constituído por múltiplas unidades funcionais (*e.g.* unidade de adição vectorial) que, utilizando *pipelines*, executam essas operações de modo paralelo. Em termos gerais, a estrutura de um processador vectorial é constituída por um processador de instrução, uma unidade de processamento vectorial e um processador escalar [Hlavíčka 1997]. O Cray-1 [Russel 1978] corresponde a um dos primeiros computadores com arquitectura vectorial. Quando surgiu, em 1976, o Cray-1 era o computador com a maior capacidade de processamento, possuindo um único processador vectorial com 12 unidades funcionais com *pipeline*.

As arquitecturas SIMD são máquinas que utilizam uma única UC e várias UP. Quando a UC envia uma instrução para as UP, estas executam-na sincronamente sobre diferentes fluxos de dados, tal como foi anteriormente descrito (*vd.* figura 6.2). A existência de uma rede interna de ligação permite que os resultados de uma UP sejam enviados para outras UP, de modo a poderem sofrer novas operações. Este tipo de arquitectura subdivide-se em *array* de processadores e processadores associativos.

O *array* de processadores [Hwang e Briggs 1984] é um tipo de máquina paralela em que os processadores se encontram interligados segundo uma malha bidimensional, de acordo com a organização dos dados (*i.e.* *arrays*) sobre os quais operam. O Illiac IV [Barnes *et al.* 1968] e o IBM GF11 [Kumar *et al.* 1993] são exemplos deste tipo de arquitectura.

Os processadores associativos [Thurber e Wald 1975, Yau e Fung 1977] consistem em computadores que utilizam uma memória associativa [Kohonen 1987]. A principal característica deste tipo de arquitectura consiste no facto de o acesso à memória ser feito de acordo com o conteúdo, em vez do usual método de acesso por endereço. O esquema associativo da memória permite o acesso à memória de um modo paralelo [Hlavíčka 1997]. O STARAN [Rudolph 1972], da Goodyear Aerospace, constitui um dos primeiros processadores associativos.

Por fim, um *array* sistólico [Kung e Leiserson 1979] corresponde a um sistema constituído por um conjunto de UP sincronizadas ao nível global. Os dados saem da memória e circulam sincronamente através de uma rede (*array*) de vários processadores. Os resultados de cada processador são transmitidos aos processadores vizinhos e vão sofrendo operações sucessivas até retornarem à memória. Atenda-se ao facto de os dados, uma vez na rede sistólica, irem sofrendo operações nos processadores sem haver necessidade do seu armazenamento em memória. Apenas os processadores adjacentes à memória necessitam de proceder a trocas de dados com esta. Assim, este tipo de sistema é ideal para arquitecturas em que a distribuição das operações e as transferências de dados sejam bem estruturadas ao longo de todo o algoritmo, exibindo assim um elevado grau de regularidade e requerendo um controlo simples. O nome sistólico foi adoptado devido ao facto de os dados serem transmitidos sincronamente entre os processadores a partir de uma memória global, tal como o sangue flui nos vasos sanguíneos com o pulsar do coração. O computador Warp [Annaratone *et al.* 1987], da Universidade de Carnegie Mellon, constitui um exemplo deste tipo de máquina paralela.

6.2.2.2 Arquitecturas Assíncronas

Nas arquitecturas assíncronas, os vários processadores executam, num determinado instante, diferentes instruções. Esta categoria é constituída pelas arquitecturas MIMD e paradigma MIMD.

A classe MIMD coincide com a arquitectura homónima de Flynn, *i.e.* computadores com múltiplos processadores que executam, simultânea e independentemente, diferentes fluxos de instruções sobre distintos fluxos de dados. Esta classe pode ser subdividida, de acordo com a organização de memória, em máquinas de memória partilhada e máquinas de memória distribuída. A existência de um espaço de endereçamento comum para todos os processadores define uma máquina de memória partilhada. Pelo contrário, o sistema diz-se de memória distribuída quando cada processador possui um espaço de endereçamento independente. A extensão e a importância desta classe justificam a sua descrição mais detalhada, pelo que os aspectos relativos à arquitectura MIMD serão oportunamente apresentados nas secções subsequentes.

O paradigma MIMD consiste numa classe de máquinas que, embora funcionem de modo assíncrono com múltiplos fluxos de instruções e dados (MIMD), apresentam modelos de controlo de execução que não se baseiam no fluxo de instruções. Esta classe subdivide-se nas arquitecturas MIMD/SIMD, de fluxo de dados, de redução e no *array* de frente de onda.

A categoria MIMD/SIMD [Lipovski e Malek 1987] corresponde a uma máquina híbrida. Caracteriza-se por determinadas partes de uma arquitectura MIMD se encontrarem sujeitas a um controlo do tipo SIMD. Assim, pode ter-se uma máquina MIMD em que alguns dos seus nós correspondem a processadores vectoriais [Duncan 1990]. Os computadores NON-VON [Shaw 1982] e PASM [Siegel *et al.* 1984] correspondem a exemplos primordiais deste tipo de máquina.

Numa arquitectura de fluxo de dados⁸ [Treleaven *et al.* 1982, Watson e Gurd 1982] o controlo da execução de instruções é feito em função da disponibilidade dos dados a que se devem aplicar as instruções (*data-driven machines*). Assim, uma instrução é executada somente quando todos os seus operandos se encontrarem disponíveis. Este tipo de arquitectura executa grafos de fluxos de dados. Contrariamente às linguagens de máquina convencionais, estes grafos especificam apenas uma ordem parcial de execução de instruções, possibilitando assim a execução paralela e em *pipeline* ao nível da instrução. O multiprocessador LAU [Comte e Hifdi 1979] constitui uma das primeiras arquitecturas de fluxo de dados.

A arquitectura de redução [Treleaven *et al.* 1982] corresponde a máquinas paralelas em que os processadores executam instruções apenas quando os seus resultados são requeridos, como operandos, por outra instrução (*demand-driven machines*), de modo a esta última poder ser executada [Duncan 1990]. O sistema multiprocessador de redução da Universidade de Newcastle upon Tyne [Treleaven e Mole 1980] constitui um dos primeiros exemplos de uma arquitectura de redução.

Por fim, um *array* de frente de onda [Kung *et al.* 1987] caracteriza-se pelo facto de combinar a estrutura de processadores do *array* sistólico com a execução assíncrona da arquitectura de fluxo de dados. Deste modo, é constituída por várias UP que trocam resultados com as suas vizinhas de um modo assíncrono. Após a execução de instruções, um processador informa o seu sucessor que já possui resultados. Somente quando recebe a informação de que o seu sucessor já se encontra pronto para a recepção, é que este procede ao seu envio. Os resultados deste processador constituem operandos para o seu sucessor. Por fim, terminada a recepção de dados por parte do sucessor, é enviada uma mensagem ao seu predecessor, informando-o de que a recepção foi concluída com sucesso. Neste caso, em vez de ocorrer de modo pulsado no tempo (como no *array* sistólico), a execução depende da sequência dos cálculos efectuados pelos vários processadores. Assim, origina-se uma frente de dados que vai avançando, suavemente e sem se intersectar, através da rede de processadores (meio de propagação). É a semelhança deste mecanismo com a propagação de uma onda num meio físico que justifica a adopção do nome *array* de frente de onda⁹ para este tipo de arquitectura. O Functional Computer [Quénot *et al.* 1993] do ETCA¹⁰ constitui um *array* de frente de onda.

⁸Do inglês: *dataflow*.

⁹Do inglês: *wavefront array*.

¹⁰ETCA: sigla de *Établissement Technique Central de l'Armement*.

6.3 Redes de Interligação

Na resolução de um determinado problema, os vários processadores que compõem uma máquina paralela necessitam de cooperar através de comunicações. São as redes de interligação que possibilitam esta cooperação. A topologia de uma rede de interligação representa o modo como os vários computadores que a constituem se encontram ligados entre si ou aos nós da rede (processadores ou memórias). Em relação à topologia, as redes de interligação podem ser classificadas como estáticas ou dinâmicas.

6.3.1 Redes Estáticas

Uma rede diz-se estática se a configuração das suas interligações se mantiver invariante, não sendo assim alterada durante a execução de um programa. Algumas das noções utilizadas na caracterização das topologias de rede consistem no grau de um nó, na distância entre nós e no diâmetro da rede. Numa rede estática, dois nós dizem-se **vizinhos** se existe uma ligação directa entre eles, *i.e.* se existir uma ligação sem nós intermédios. O **grau** de um determinado nó corresponde ao número de vizinhos que este possui. A **distância** entre dois nós corresponde ao número de ligações que definem o caminho mais curto que os une. A distância máxima entre dois nós quaisquer define o **diâmetro** da rede. A figura 6.5 ilustra, de modo esquemático, algumas das topologias de rede estática utilizadas em sistemas paralelos, nomeadamente as topologias em anel, em anel cordal, de malha totalmente ligada, em estrela, de malha bidimensional e de hipercubo.

Na tabela 6.1 apresentam-se os valores topológicos de diâmetro e grau de nó (máximo) correspondentes, sendo N o número de nós que formam a rede estática. A partir dos exemplos apresentados constata-se que numa rede de interligação o grau de nó pode ser constante (*e.g.* topologia de rede em anel) ou variar de acordo com o número total de nós da rede (*e.g.* topologia de rede em estrela). Cada ligação de um nó requer a existência de uma porta, pelo que a existência de nós com graus elevados torna a rede economicamente dispendiosa. Assim, as redes mais económicas encontram-se associadas a topologias com um baixo grau de nó.

Tabela 6.1: Propriedades topológicas de redes de comunicação estáticas.

Topologia de rede	Diâmetro	Grau de nó (máximo)
Anel	$N/2$	2
Anel cordal	$N/4$	4
Malha totalmente ligada	1	$N - 1$
Estrela	2	$N - 1$
Malha bidimensional	$2N^{1/2} - 2$	4
Hipercubo	$\log_2 N$	$\log_2 N$

A **conectividade** de uma topologia corresponde à razão entre o número de ligações e o número de nós. A topologia de rede em anel possui uma conectividade reduzida. No entanto, embora apresente um grau de nó constante, o seu diâmetro aumenta em proporção directa ao número de nós. O intenso tráfego de dados associado ao reduzido número de caminhos redundantes entre os nós pode originar graves dificuldades de comunicação no caso de ocorrer uma falha num dos ramos de ligação. A existência de caminhos redundantes torna a rede de interligação mais robusta, permitindo que, no caso de falha de algum componente, a comunicação se faça por um caminho alternativo. Na topologia de rede em anel cordal tenta-se suprimir este problema através da utilização de ligações (cordas) entre nós intercalados (*cf.* figura 6.5b). A utilização exhaustiva desta técnica conduz à topologia de malha totalmente ligada, que se encontra no extremo oposto da complexidade relativamente às topologias de anel. Esta rede de interligação apresenta uma conectividade que, além de ser elevada, aumenta com o número de nós. O seu diâmetro é mínimo

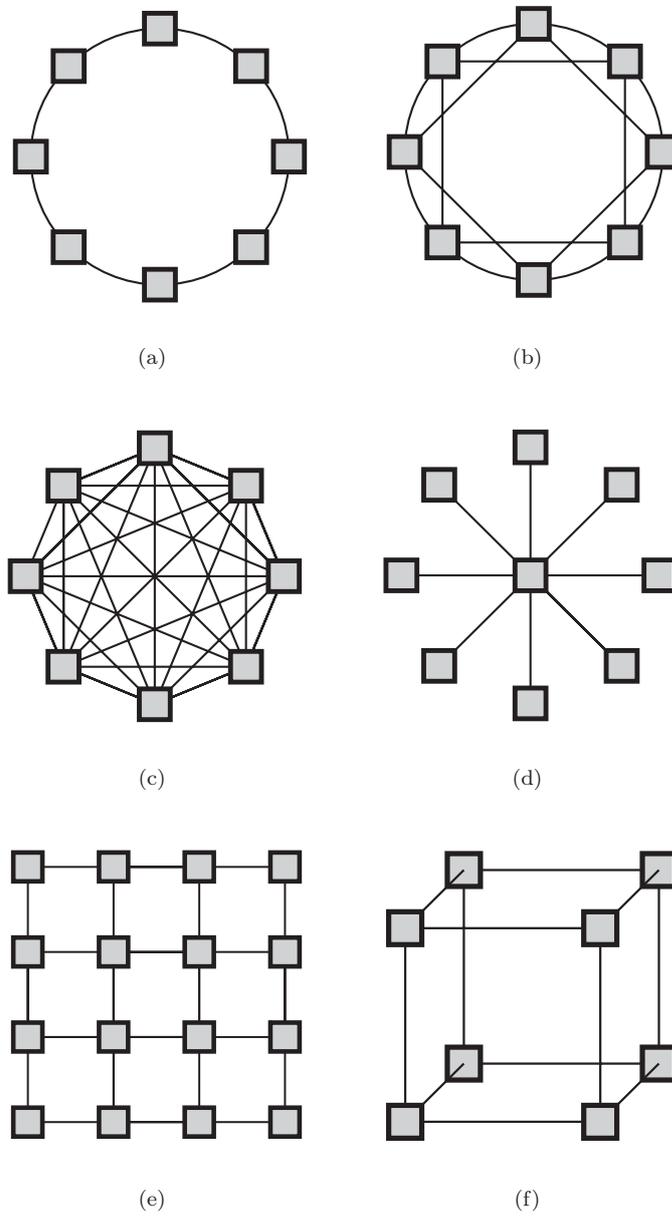


Figura 6.5: Representação esquemática de algumas topologias de rede estática: (a) em anel, (b) em anel cordal, (c) de malha totalmente ligada, (d) em estrela, (e) de malha bidimensional e (f) de hipercubo.

(igual a 1) e o grau de nó cresce com o número de nós. Assim, embora permita a comunicação directa entre nós (pelo facto de o diâmetro ser igual a 1), a topologia de malha totalmente ligada apresenta a desvantagem de monetariamente ser bastante dispendiosa, devido ao elevado número de ligações que possui.

A topologia de rede em estrela caracteriza-se pelo facto de haver um único nó intermédio, ao qual os restantes nós têm ligação exclusiva (*cf.* figura 6.5d). Deste modo, cada nó possui uma ligação à rede independente das restantes, pelo que uma avaria numa ligação não impede que as restantes continuem funcionais. As principais desvantagens da topologia de rede em estrela consistem no elevado tráfego de mensagens associado ao nó central e no facto de ocorrer o bloqueio total da rede no caso de ocorrer uma falha neste nó particular.

A topologia de malha bidimensional apresenta um grau de nó (máximo) constante e igual a 4, o que facilita o acréscimo de linhas ou colunas de processadores à rede. A existência de caminhos redundantes diminui os riscos de estrangulamento¹¹ na comunicação. Esta é a topologia utilizada em vários *arrays* de processadores. Este é o caso, por exemplo, do *array* sistólico (*vd.* Secção 6.2.2.1).

O facto de o diâmetro e de o grau de nó crescerem logaritmicamente com o número de nós torna a topologia de hipercubo num bom compromisso entre os extremos correspondentes às topologias de anel e de malha totalmente ligada. Uma característica importante destas três topologias consiste no facto de apresentarem simetria nodal. Esta característica significa que a rede é vista de igual modo por qualquer dos nós, não existindo assim nós privilegiados. A sua importância deve-se ao facto de a existência de nós privilegiados propiciar o estrangulamento na comunicação, tal como se verifica, por exemplo, na topologia de rede em estrela.

Por fim, refira-se que na selecção de uma rede estática, para além do factor económico, deve atender-se, ainda, ao facto de esta ser ou não adequada ao tipo de algoritmo utilizado: o padrão das interligações da topologia deve corresponder, tanto quanto possível, ao padrão das comunicações associadas à execução da aplicação na máquina paralela.

6.3.2 Redes Dinâmicas

As redes dinâmicas de interligação caracterizam-se pelo facto de não possuírem uma topologia fixa, adaptando-se dinamicamente de acordo com as necessidades de transferência de dados. Estas redes consistem, de modo geral, no barramento (*bus*) partilhado ou em sistemas de interligação centralizados constituídos por uma estrutura configurável de múltiplos comutadores, através da qual se podem estabelecer ligações entre quaisquer nós [Hennessy e Patterson 2002]. As redes dinâmicas *crossbar switch* e multietapa¹² constituem dois exemplos de sistemas de interligação centralizados.

No barramento partilhado (*vd.* figura 6.6a) qualquer par de nós pode comunicar directamente, pelo que o diâmetro deste tipo de rede de interligação é igual a 1. No entanto, é necessário que o nó emissor aceda de modo exclusivo à rede, pelo que não é possível haver comunicações simultâneas para diferentes pares de nós [Murdocca e Heuring 2000]. Esta característica propicia a ocorrência do estrangulamento das comunicações [Hennessy e Patterson 2002]. Ao conflito que se gera quando dois ou mais nós disputam o acesso ao barramento denomina-se contenção. Este fenómeno leva à redução da largura de banda¹³ efectiva que se encontra disponível para cada nó, havendo uma quantidade fixa de largura de banda que é partilhada pelos vários nós [Murdocca e Heuring 2000]. Outra desvantagem deste tipo de rede de interligação consiste na existência de apenas um caminho de comunicação, o que resulta, no caso de ocorrência de uma falha, no bloqueio total do sistema. Embora a limitação da largura de banda efectiva disponível e a inexistência de caminhos redundantes consistam nas principais desvantagens do barramento partilhado, o seu baixo custo faz com

¹¹Do inglês: *bottleneck*.

¹²Do inglês: *multistage switch*.

¹³Do inglês: *bandwidth*. A largura de banda corresponde à taxa máxima de transferência de informação através da rede de interligação [Hennessy e Patterson 2002].

que seja bastante utilizado, especialmente em computadores que possuam um número reduzido de processadores.

As limitações do barramento partilhado podem ser atenuadas pelo recurso a um barramento múltiplo [Tabak 1990], o qual é constituído por vários barramentos dispostos em paralelo (*vd.* figura 6.6b). O barramento múltiplo permite aceder-se a valores superiores de largura de banda associados a uma maior tolerância a falhas. De facto, a largura de banda disponível aumenta com o número de barramentos utilizados, pois o tráfego de comunicação é distribuído pelos vários barramentos, diminuindo-se assim os níveis de contenção. Por outro lado, a multiplicidade de barramentos permite a existência de caminhos redundantes, o que, de acordo com o que foi anteriormente referido, leva ao aumento da tolerância a falhas por parte do sistema.

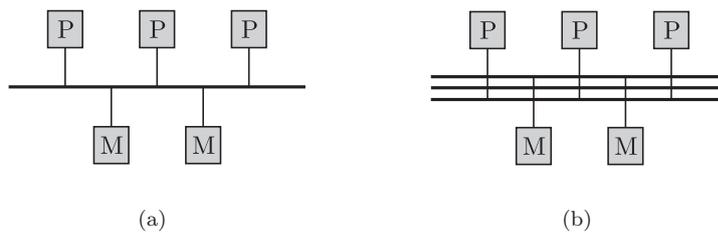


Figura 6.6: Representação esquemática dos barramentos (a) partilhado e (b) múltiplo.

A rede dinâmica *crossbar switch* consiste numa malha de interruptores que permite a transmissão de mensagens entre dois nós quaisquer, desde que estes não se encontrem já ocupados, sem que haja redução de largura de banda. Este tipo de rede dinâmica pode ser utilizada como rede unilateral (*vd.* figura 6.7a), na ligação entre processadores e memórias, ou como rede bilateral (*vd.* figura 6.7b), para interligar processadores. Uma rede dinâmica diz-se unilateral se cada componente possui uma ligação bidireccional à rede, ocorrendo a comunicação entre elementos dos distintos módulos que a ela se encontram ligados (*cf.* figura 6.7a). Por outro lado, numa rede dinâmica bilateral cada componente possui duas ligações à rede, uma de envio e outra de recepção de mensagens, sendo assim possível a comunicação entre dois quaisquer nós (*cf.* figura 6.7b). Constata-se que na ligação de N processadores a N memórias (*cf.* figura 6.7a) ou na interligação de N processadores (*cf.* figura 6.7b) são necessários N^2 comutadores. Na figura 6.7a encontra-se ilustrado um detalhe de um comutador. Visto qualquer nó poder comunicar directamente, o diâmetro deste tipo de rede de interligação é igual a 1 [Murdocca e Heuring 2000]. Embora este tipo de rede de interligação permita obter um elevado desempenho na comunicação, o seu elevado custo inviabiliza a sua utilização generalizada em máquinas paralelas.

As redes dinâmicas multietapa são constituídas por vários comutadores simples de k entradas e k saídas. Estas redes podem ser classificadas como bloqueantes, não-bloqueantes ou reconfiguráveis. Uma rede diz-se bloqueante, se existe pelo menos uma ligação entre os nós que não pode ser efectuada. Numa rede não-bloqueante todas as ligações entre os nós podem ser efectuadas sem que seja necessário alterar as restantes ligações. Por fim, numa rede reconfigurável todas as ligações entre os nós são possíveis, sendo porém necessário em algumas situações alterar-se parte das restantes ligações. As redes Ómega [Beneš 1965, Waksman 1968], Clos [Clos 1953] e Beneš [Beneš 1962] constituem, respectivamente, exemplos de redes multietapa do tipo bloqueante, não-bloqueante e reconfigurável [Hlavička 1997].

A título de exemplo, considere-se uma rede Ómega constituída por comutadores com 2 entradas e 2 saídas (2×2). Estes comutadores encontram-se dispostos em várias colunas que definem as múltiplas etapas. Uma rede Ómega com N entradas e N saídas necessita de $N/2 \log_2 N$ comutadores, que definem $N/2$ linhas e $\log_2 N$ etapas. Um comutador de 2 entradas e 2 saídas pode apresentar dois estados fundamentais: directo e de permuta (*cf.* figura 6.8a). Na figura 6.8b ilustra-se uma

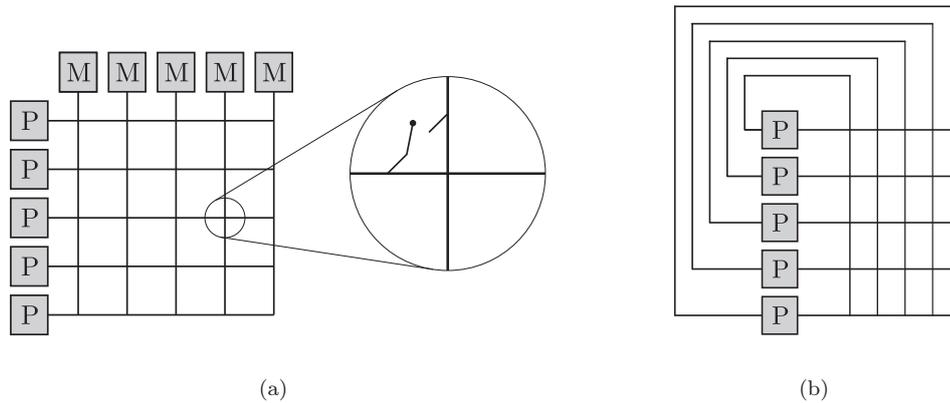


Figura 6.7: Representação esquemática dos *cross switches* (a) unilateral e (b) bilateral.

rede Ómega para $N = 8$. Esta rede permite a interligação de oito processadores ou a ligação de oito processadores a oito memórias. Os nós de entrada e de saída encontram-se numerados, em código binário, de 0 a 7 (*cf.* figura 6.8b). No seu funcionamento dinâmico, a rede de interligação utiliza a representação binária do endereço de destino para definir o caminho do nó emissor para o nó receptor. O comutador associado à etapa n utiliza o n ésimo bit para definir o seu estado: se esse bit é igual a 0, então a saída faz-se pela porta superior do comutador, senão a saída faz-se pela sua porta inferior. Considere-se que o nó de entrada 1 (001) pretende comunicar com o nó de saída 6 (110). Nesta situação os comutadores de cada etapa adoptam o estado ditado pelo bit correspondente, permitindo assim que a mensagem seja transmitida (*cf.* figura 6.8b). É a impossibilidade de serem efectuadas as ligações entre os nós 5-4 (101-100), 5-5 (101-101) e 5-7 (101-111) que confere à rede Ómega o carácter bloqueante (*cf.* figura 6.8b).

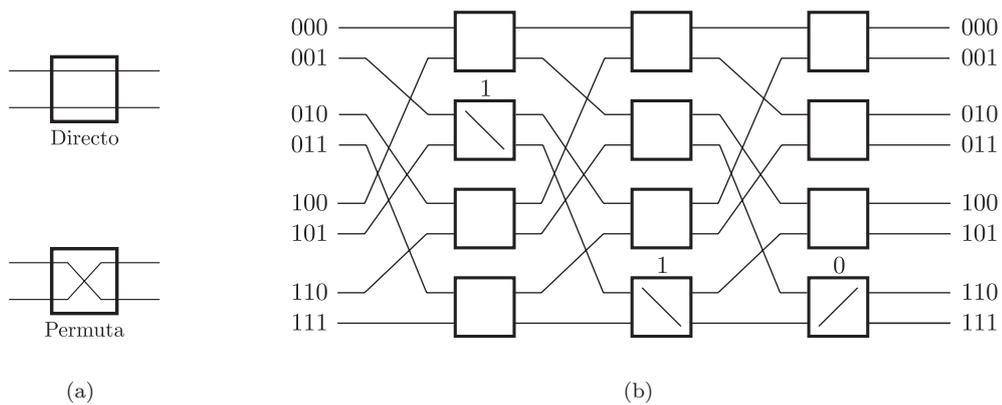


Figura 6.8: (a) Estados fundamentais de um comutador 2×2 e (b) rede Ómega [Hlavička 1997].

As redes de interligação multietapa constituem uma solução menos dispendiosa que as redes *crossbar switch*. Na realidade, o facto de neste tipo de rede se utilizarem $N/2\log_2 N$ comutadores para N entradas e N saídas, em vez dos N^2 necessários numa rede *crossbar switch* (*cf.* figura 6.7), permite que se obtenham melhores desempenhos na comunicação de um modo menos dispendioso.

6.3.3 Técnicas de Encaminhamento e de Comutação de Mensagens

Exceptuando a topologia de malha totalmente ligada ou os sistemas baseados num meio partilhado (*e.g.* barramento), as redes de interligação não permitem que todos os nós comuniquem de modo directo. Surge assim a necessidade de conduzir uma mensagem desde o nó emissor até ao nó receptor. Neste contexto, as técnicas de encaminhamento¹⁴ e as técnicas de comutação¹⁵ são utilizadas para conduzir, de modo eficiente, uma mensagem desde o nó emissor até ao nó receptor.

As técnicas de encaminhamento determinam o modo como uma mensagem deve ser transportada desde o nó emissor até ao nó receptor. Por outro lado, as técnicas de comutação definem o modo como as mensagens são transferidas entre os vários comutadores. Cada comutador pode encontrar-se directamente ligado a um nó, definindo-se assim ligações dedicadas e predefinidas entre os vários nós (rede directa), ou pode haver alguns comutadores que se encontrem interligados, formando um sistema de interligação centralizado (rede indirecta). A importância destas técnicas deve-se ao facto de a eficiência com que se faz a comunicação entre nós afectar directamente o desempenho global da rede de interligação e consequentemente da máquina paralela.

Nas redes comutadas podem ser utilizadas três técnicas de encaminhamento: baseada na fonte¹⁶, por circuito virtual¹⁷ e baseada no destino¹⁸. O nó emissor envia para um comutador uma mensagem que contém informação relativa à técnica de encaminhamento utilizada. No encaminhamento baseado na fonte, a mensagem fornece o seu itinerário completo, pelo que os comutadores se limitam a transferi-la de acordo com o caminho predefinido pelo nó emissor. Em alternativa, pode estabelecer-se um circuito virtual prévio entre os nós emissor e receptor, fornecendo a mensagem unicamente a referência a este circuito virtual. Por fim, no encaminhamento baseado no destino, a mensagem apenas indica o destino a ser atingido, cabendo assim a cada comutador a tarefa de seleccionar o caminho de transferência. No caso de se verificar a unicidade do caminho definido pela origem e o destino, o encaminhamento diz-se determinístico. Existindo vários caminhos possíveis entre a origem e o destino, o encaminhamento diz-se adaptativo, sendo a transferência feita de acordo com as condições de congestionamento ou de falhas na rede [Hennessy e Patterson 2002].

A selecção do caminho a seguir por uma mensagem, desde o nó emissor até ao nó receptor, pode ser definida quer estática quer dinamicamente. Na definição de modo estático, o caminho é configurado previamente à execução de uma determinada aplicação computacional, mantendo-se invariante até se verificar o término da referida aplicação. Esta técnica é adequada para situações em que o padrão das interligações da topologia corresponda ao padrão das comunicações associadas à execução da aplicação na máquina paralela, pelo que a comunicação se dá exclusivamente entre nós directamente ligados. Por outro lado, no caso de ser necessário definir dinamicamente o caminho de uma mensagem durante a execução de uma aplicação, desde o nó emissor até ao nó receptor, podem ser utilizadas as técnicas quer de comutação de circuitos¹⁹ quer de comutação de pacotes²⁰.

Na técnica de comutação de circuitos procede-se à reserva de um caminho (circuito) completo entre o nó emissor e o nó receptor, previamente à transferência da mensagem. Este caminho é então utilizado para se transferir a mensagem. Embora seja eficiente para a transferência de mensagens longas, esta técnica poderá reservar um circuito durante longos períodos de tempo, o que impossibilita a formação de outras ligações e contribui para a existência de tempos de comunicação não-determinísticos [Siegel e Stunkel 1996].

A comutação de pacotes consiste numa técnica mais recente, em que as mensagens são subdivididas em pequenos pacotes. Estes transportam a informação necessária para o seu correcto encaminhamento por parte de cada comutador. Assim, ao contrário do que acontece na técnica de comutação de circuitos, não ocorre a reserva de caminhos para a operação de comunicação. O

¹⁴Do inglês: *routing techniques*.

¹⁵Do inglês: *switching techniques*.

¹⁶Do inglês: *source-based routing*.

¹⁷Do inglês: *virtual circuit routing*.

¹⁸Do inglês: *destination-based routing*.

¹⁹Do inglês: *circuit switching*.

²⁰Do inglês: *packet switching*.

caminho é estabelecido de forma dinâmica, o que, no caso de ocorrência de congestionamentos ou de falhas, permite que a comunicação prossiga por caminhos alternativos. Estas características tornam esta técnica de comutação atractiva para máquinas paralelas. A técnica de comutação de pacotes pode ser caracterizada de acordo com o modo como os pacotes são transportados entre os vários comutadores.

Uma das primeiras implementações desta técnica é usualmente designada *store-and-forward* [Merlin e Schweitzer 1980a, Merlin e Schweitzer 1980b]. Caracteriza-se pelo facto de cada pacote ser enviado de comutador em comutador até alcançar o nó a que se destina. Um pacote é totalmente recebido por um comutador, que o armazena na sua memória (*buffer*) antes de o enviar para o próximo comutador no caminho de comunicação. O envio para o comutador seguinte só se inicia quando a sua memória se encontrar disponível. A necessidade de armazenamento da totalidade de um pacote, por parte de cada comutador, leva a que o tempo total de transmissão seja usualmente elevado. Assim, com o intuito de minimizar este efeito, surgiu uma nova implementação da comutação de pacotes, designada por *virtual cut-through* [Kermani e Kleinrock 1979]. Nesta técnica, um comutador intermédio pode iniciar a transmissão do pacote para o comutador seguinte, sem que seja necessária a sua recepção total. No entanto, a porta de saída do comutador emissor ou o comutador receptor podem não se encontrar disponíveis para esta recepção. Neste caso ocorre o bloqueio do pacote, sendo então necessário, tal como na técnica *store-and-forward*, proceder ao seu armazenamento em memória. De modo a evitar este inconveniente, surgiu uma implementação em que cada bloco é subdividido em blocos elementares (*flits*²¹) que são transferidos ordenadamente de comutador em comutador. Assim, no caso de ocorrer um bloqueio, em vez de se armazenar um pacote num único comutador, procede-se ao armazenamento de vários blocos elementares nos comutadores que se encontram ao longo do caminho de transferência. Esta implementação, designada por *wormhole routing* [Dally e Seitz 1987], corresponde à técnica de comutação mais utilizada nos computadores paralelos comerciais [Siegel e Stunkel 1996].

Atenda-se ao facto de em sistemas baseados num meio partilhado (*e.g.* barramento) quaisquer dois nós poderem comunicar directamente, pelo que a transferência de mensagens é feita de modo diverso das referidas anteriormente. Neste caso, procede-se geralmente à difusão²² ou multidifusão²³ [Tanenbaum 2003] da mensagem para os restantes nós que partilham o meio, verificando estes últimos, posteriormente, se o endereço de destino contido na mensagem recebida coincide ou não com o seu [Hennessy e Patterson 2002].

6.4 Desempenho dos Computadores Paralelos

Um computador paralelo pode ser caracterizado de acordo com vários aspectos, tais como, por exemplo, a capacidade de processamento medida em MFLOPS²⁴, a largura de banda da rede de comunicações medida em Mbit/s, a capacidade de processamento individual de cada processador, *etc.* Não obstante, o desempenho de um computador paralelo refere-se à execução de um determinado algoritmo. A avaliação do desempenho de um algoritmo num computador paralelo é geralmente efectuada, como se verá, com base em relações dos tempos de execução em série e em paralelo do algoritmo paralelizado. Um dos factores que condiciona de modo determinante o desempenho de um computador paralelo consiste no tempo que os vários processos despendem em comunicações.

²¹ *flits*: acrónimo de **f**low-**c**ontrol **d**igits.

²²Do inglês: *broadcast*.

²³Do inglês: *multicast*.

²⁴FLOPS: acrónimo de *F*loating-*p*oint *O*perations *P*er *S*econd (operações de ponto flutuante, *i.e.* de vírgula flutuante, por segundo).

6.4.1 Latência de Comunicação

A comunicação entre processos envolve sempre um certo custo que se reflecte directamente no desempenho global do sistema. A rapidez a que se verifica a comunicação entre processos é um factor fundamental que condiciona o tipo de aplicações que podem ser suportadas eficientemente numa dada arquitectura paralela. Para quantificar esta rapidez é normalmente utilizado o conceito de latência de comunicação. A latência de comunicação consiste no tempo necessário para o transporte de uma mensagem do processo emissor até que esta se encontre disponível no processo receptor. Na comunicação entre processos é possível identificar quatro parcelas principais de latência de comunicação [Hennessy e Patterson 2002]: *overheads* de emissão e de recepção, tempo de transferência e latência de rede (vd. figura 6.9). Os *overheads* de emissão e de recepção correspondem ao tempo que os nós emissor e receptor despendem na interacção com a rede, respectivamente. Representam, geralmente, a fracção dominante da latência de comunicação [Hennessy e Patterson 2002]. O tempo de transferência e a latência de rede constituem a latência associada ao transporte da mensagem. O tempo de transferência corresponde à relação entre o comprimento da mensagem e a largura de banda efectiva disponível para cada nó. Por fim, o tempo de latência da rede depende do caminho que a mensagem tem de percorrer do nó emissor ao nó receptor e, em particular, do número de comutadores que atravessa, pois cada um introduz um tempo de latência na propagação da mensagem.



Figura 6.9: Representação esquemática da constituição da latência de comunicação de uma mensagem.

6.4.2 Speed-up e Eficiência

O *speed-up* e a eficiência constituem dois parâmetros que permitem avaliar o desempenho dos computadores paralelos. O *speed-up*, s_p , permite determinar qual o ganho obtido pela utilização do paralelismo, indicando quantas vezes um programa paralelo é mais rápido que a correspondente versão sequencial. Este parâmetro é definido como a razão do tempo de execução do algoritmo sequencial, T_s , e o tempo de execução do algoritmo paralelo, T_p , isto é,

$$s_p = \frac{T_s}{T_p}. \quad (6.1)$$

De acordo com a definição adoptada para o tempo sequencial, o *speed-up* pode ser relativo, real ou absoluto. No *speed-up* relativo, o valor de T_s corresponde ao tempo de execução, num só processador do computador paralelo, do programa paralelizado. No *speed-up* real, o valor de T_s é obtido pela execução, num só processador do computador paralelo, da versão sequencial mais eficiente do programa. Por fim, no *speed-up* absoluto, o valor de T_s é obtido pela execução, no computador sequencial mais rápido que exista, da versão sequencial mais eficiente do referido programa [Barbosa 2000]. Esta última definição apresenta algumas dificuldades no que concerne à sua aplicabilidade prática, pelo que o conceito de *speed-up* absoluto raramente é adoptado. Usualmente utiliza-se o *speed-up* relativo para caracterizar o desempenho de um computador paralelo.

Em termos teóricos, a um sistema paralelo ideal constituído por P processadores (idênticos) deverá corresponder um *speed-up*

$$s_p = P. \quad (6.2)$$

Deste modo, um programa é teoricamente resolvido em P processadores num tempo P vezes menor que num único processador. Todavia, numa situação real os processadores não se dedicam exclusivamente à execução efectiva de um determinado programa. De facto, despendem recursos noutras tarefas, tais como, por exemplo, a comunicação entre processadores (*cf.* Secção 6.4.1). Assim, verifica-se que o valor do *speed-up* é geralmente inferior ao número de processadores.

A eficiência, e_f , consiste num parâmetro indicativo do grau de aproveitamento dos recursos de processamento. Corresponde à fracção de tempo despendido de modo efectivo, *i.e.* exclusivamente na execução do algoritmo, pelos processadores. Este parâmetro é definido, em termos de percentagem, por

$$e_f = \frac{s_p}{P} \times 100\%, \quad (6.3)$$

pelo que, dependendo do tipo de *speed-up* considerado, a eficiência pode também ser real, relativa ou absoluta. De acordo com as equações 6.2 e 6.3, a um sistema paralelo ideal corresponde uma eficiência de 100%. No entanto, de acordo com o que foi anteriormente referido em relação ao *speed-up*, os sistemas reais apresentam, frequentemente, valores de eficiência menores que 100%.

6.4.3 Lei de Amdahl

De acordo com Amdahl [Amdahl 1967], o *speed-up* encontra-se limitado, para um problema computacional de dimensão fixa, pela fracção executada de modo sequencial num sistema paralelo. De facto, seja um programa tal que T_s corresponde ao tempo despendido na sua execução sequencial. Este programa é constituído por uma fracção f intrinsecamente sequencial, *i.e.* não-paralelizável, e uma fracção $(1 - f)$ paralelizada. Considere-se, por hipótese, que a execução em paralelo da fracção paralelizada do programa decorre de modo ideal em P processadores, *i.e.* decorre P vezes mais rapidamente que num único processador. Neste contexto, o tempo total despendido na sua execução em paralelo corresponde, de acordo com a figura 6.10, a

$$T_p = fT_s + \frac{(1-f)T_s}{P}. \quad (6.4)$$

Considerando a definição do *speed-up* (*vd.* equação 6.1), obtém-se

$$s_p = \frac{T_s}{fT_s + \frac{(1-f)T_s}{P}}, \quad (6.5)$$

que corresponde à lei de Amdahl [Amdahl 1967]. Simplificando os termos da equação 6.5, obtém-se

$$s_p = \frac{1}{f + \frac{1-f}{P}}. \quad (6.6)$$

Assim, de acordo com a expressão 6.6, originalmente formulada por Ware [Ware 1972], conclui-se que, devido à existência da fracção f intrinsecamente sequencial, o *speed-up* é majorado, qualquer que seja o número de processadores, por $1/f$. O comportamento do *speed-up* com o número de processadores para vários valores da fracção sequencial é ilustrado na figura 6.11.

A lei de Amdahl mostra que para se obter ganhos elevados em aplicações paralelas de um problema computacional de dimensão fixa é imperativo proceder à redução dos blocos sequenciais que compõem o seu algoritmo. Neste contexto, aquando do desenvolvimento de um programa baseado num algoritmo paralelo, um programador deve minimizar a fracção sequencial do algoritmo, de modo a otimizar o desempenho do programa.

Por fim, atenda-se ao facto de, na abordagem anterior, se ter assumido a hipótese de que a execução em paralelo da parte paralelizável do programa decorre de modo ideal. Por conseguinte, numa situação real é de esperar que o valor de *speed-up* obtido seja inferior ao previsto pela equação 6.6. De facto, a utilização de um número crescente de processadores na resolução de

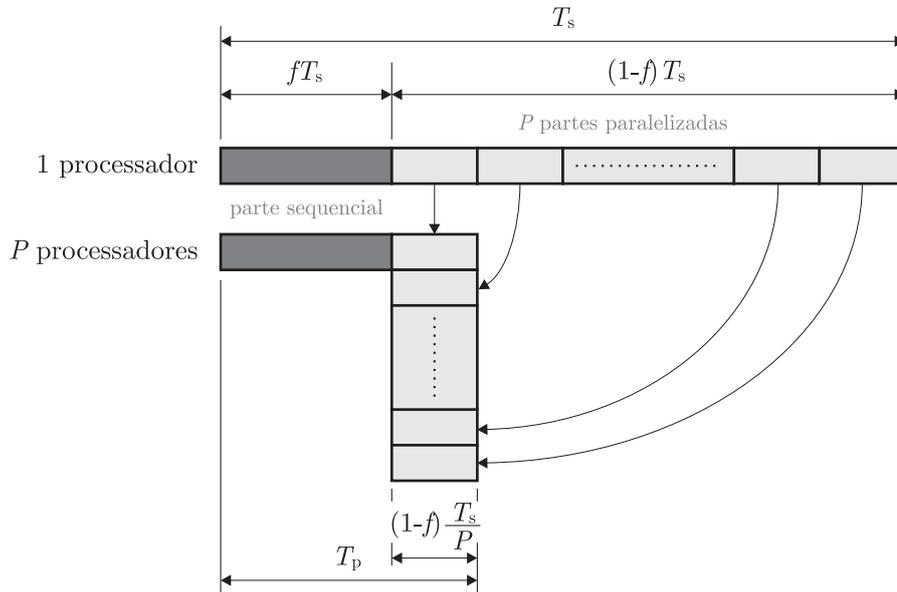


Figura 6.10: Ilustração esquemática da relação entre os tempos de execução sequencial e paralela, para a lei de Amdhal.

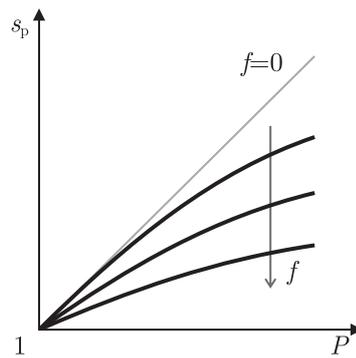


Figura 6.11: Ilustração da variação do *speed-up* com o número de processadores para diferentes valores de fracção intrinsecamente sequencial.

um determinado problema leva, geralmente, ao aumento quer dos tempos de comunicação entre processadores quer dos conflitos na partilha de recursos. Como consequência, a partir de um certo número de processadores, este factor pode tornar-se preponderante, o que inevitavelmente leva a uma degradação acentuada do *speed-up* observado.

6.4.4 Desempenho Sobrelinear

De acordo com a análise anterior, não são de prever situações em que o *speed-up* seja superior ao número de processadores P , a que correspondem eficiências superiores a 100%. Todavia, este fenómeno, associado a um *speed-up* dito sobrelinear, pode ocorrer no caso de se proceder a uma divisão, pelos vários processadores de um computador paralelo, do domínio a ser processado. Assim, ao ficar responsável pela resolução de um problema de menores dimensões, cada processador necessita de uma menor quantidade de memória, pelo que poderá porventura recorrer apenas às suas memórias *cache* e primária. No entanto, pode verificar-se que a medição do tempo de execução sequencial seja realizada num computador que não disponha de memória, quer *cache* quer primária, suficiente para a resolução do problema total, sendo assim necessário que este recorra a memória secundária. Este facto leva a um aumento considerável do tempo despendido no acesso a memória, o que se reflecte no aumento do tempo total de processamento. Neste contexto, no caso de a componente sequencial do programa paralelo devida a comunicações e gestão de paralelismo ser inferior aos tempos adicionais necessários no programa sequencial para o acesso à memória secundária, pode obter-se um desempenho sobrelinear [Barbosa 2000]. Este facto ocorre devido à sobrevalorização do tempo de execução num único processador.

6.4.5 Granularidade e Escalabilidade

O impacto da latência de comunicação no desempenho de uma máquina paralela depende fundamentalmente da frequência com que os processos comunicam. Uma aplicação com comunicações frequentes entre os processos só poderá revelar-se eficiente no caso da latência de comunicação ser bastante reduzida. Por outro lado, em aplicações em que os processos sejam praticamente independentes, *i.e.* comuniquem raramente, a influência da latência de comunicação no desempenho do processo paralelo não é tão significativa. A granularidade²⁵ tenta caracterizar o grau de interacção de um determinado processo, consistindo na quantidade média de computação efectuada, *i.e.* o número de instruções executadas, por cada acção de comunicação levada a cabo²⁶ [Ibbett e Topham 1989, Stone 1993]. Entre duas acções consecutivas de comunicação diz-se que o processo executa um grão de actividade. Um processo que comunica com muita frequência é constituído por grãos de poucas instruções e apresenta, portanto, uma granularidade fina. Pelo contrário, processos em que a interacção é reduzida são constituídos por grãos com elevadas quantidades de instruções e apresentam uma granularidade grossa [Martins 1998]. A granularidade de um processo pode assim ser classificada como grossa, média ou fina. Em aplicações de granularidade grossa explora-se o paralelismo ao nível de processos longos ou até do programa completo, utilizando-se, geralmente, um pequeno número de processadores de elevada capacidade de processamento. Pelo contrário, em aplicações de granularidade fina, a aplicação é decomposta em vários processos de pequena dimensão. Neste caso, explora-se o paralelismo ao nível das instruções, utilizando-se, usualmente, uma grande quantidade de processadores de reduzida capacidade de processamento. No entanto, a grande quantidade de comunicações entre processadores obriga à utilização de redes de intercomunicação de elevado desempenho. Por fim, os processos de granularidade média encontram-se num nível intermédio face aos anteriores, explorando-se neste caso o paralelismo ao nível de blocos e sub-rotinas.

²⁵Do inglês: *granularity*.

²⁶O termo granularidade é usualmente utilizado com dois sentidos distintos: tanto se pode referir a uma quantidade de computação efectuada por comunicação, como aludir ao tamanho de uma dada tarefa computacional [Davies 1994].

Existem vários sistemas paralelos em que o aumento da dimensão do problema associado aos vários processadores permite o aumento da sua eficiência [Grama *et al.* 1993, Das 1997]. Nestes sistemas, a utilização de processos com maiores dimensões leva à existência de um maior grão computacional, diminuindo assim a influência da latência de comunicação no desempenho do processo paralelo. De facto, o aumento do tempo despendido na execução de instruções por parte dos processadores num grão de actividade leva à diminuição da fracção de tempo despendido em comunicação, pelo que é possível obter um aumento da eficiência do sistema paralelo a partir do aumento da dimensão do problema. Este facto é susceptível de ser verificado, por exemplo, quando se utilizam técnicas de decomposição de domínio²⁷ [Smith *et al.* 1996]. Neste caso, a relação entre os tempos despendidos, por parte dos processadores, na execução de instruções num grão de actividade e numa comunicação pode ser vista como uma razão entre um volume e uma área superficial. De facto, no caso de se utilizar um método de decomposição de domínio, a comunicação entre processos ocorre nas fronteiras dos vários subdomínios que se encontram afectos a cada processador. Por outro lado, o número de instruções executadas por um determinado processador é proporcional ao volume (dimensão) de dados computacionais do subdomínio que a ele se encontra associado. Assim, a relação entre o tempo despendido, por parte de cada processador, na execução de instruções num grão de actividade e numa comunicação é directamente proporcional à razão entre o volume e a área superficial do subdomínio correspondente, pelo que o aumento da dimensão (volume) do problema reduz a importância relativa da latência de comunicação [Sterling *et al.* 1999].

De acordo com o que foi exposto nas secções anteriores, uma das consequências directas da lei de Amdahl consiste no facto de a eficiência de um sistema paralelo diminuir com o número de processadores. No entanto, constata-se que, para alguns sistemas paralelos, a eficiência computacional aumenta com a dimensão do problema (grão computacional). Estes sistemas paralelos apresentam a particularidade de a sua eficiência diminuir com o número de processadores para um tamanho do problema constante e aumentar com o tamanho do problema para um número de processadores constante. Verifica-se assim a possibilidade de se manter a eficiência constante através do recurso ao aumento simultâneo do número de processadores e da dimensão do problema (grão computacional). Esta capacidade é denominada por escalabilidade²⁸ de um sistema paralelo. Um sistema paralelo escalável permite o aumento do *speed-up* em proporção directa ao número de processadores utilizados. Atenda-se ao facto de este termo poder também ser utilizado em relação a redes de interligação. No entanto, neste caso o termo tem uma acepção distinta, correspondendo a escalabilidade de uma rede de interligação à capacidade de se aumentar o número de ligações mantendo os níveis de desempenho em termos de largura de banda e de latência de comunicação.

6.4.6 Lei de Gustafson

Tendo em conta o facto de a eficiência computacional poder aumentar com a dimensão do problema (grão computacional), Gustafson [Gustafson 1988] generalizou o conceito de *speed-up* associado à lei de Amdahl (equação 6.5) para problemas computacionais de dimensão crescente. Neste contexto, Gustafson considerou a configuração de um computador paralelo associada ao número máximo de processadores P . Posteriormente, determinou o tempo de execução em paralelo para o problema de maior dimensão (em termos de memória disponível) que fosse possível resolver nessa configuração. Por fim, procedeu à extrapolação do tempo que seria necessário para executar o mesmo problema num computador com apenas um processador, caso esse computador possuísse memória suficiente. Deste modo, Gustafson definiu um novo valor de *speed-up*, designado por *speed-up* escalado²⁹ [Gustafson 1988].

²⁷A decomposição de domínio consiste num conjunto de técnicas de resolução de equações diferenciais parciais (*e.g.* método de Schwarz [Schwarz 1870]) que visam a obtenção mais rápida de soluções. De um modo geral, a ideia-base destes métodos é decompor o domínio original em subdomínios, resolver o problema localmente em cada subdomínio e obter a solução global do problema original a partir das soluções de cada subdomínio [Vasconcelos 1998].

²⁸Do inglês: *scalability*. Por vezes, o termo expansibilidade é utilizado pela comunidade científica na acepção de escalabilidade (*e.g.* [Barbosa 2000]).

²⁹Do inglês: *scaled speed-up*.

Seja um programa tal que T_p corresponde ao tempo despendido na sua execução em paralelo num computador com P processadores. Este programa é constituído por uma fracção f intrinsecamente sequencial e uma fracção $(1 - f)$ paralelizada. Admitindo que a execução em paralelo da fracção paralelizada do programa decorre de modo ideal nos P processadores, tem-se que o tempo necessário para resolver o mesmo problema num único processador corresponde, de acordo com a figura 6.12, a

$$T_s = fT_p + P(1 - f)T_p. \quad (6.7)$$

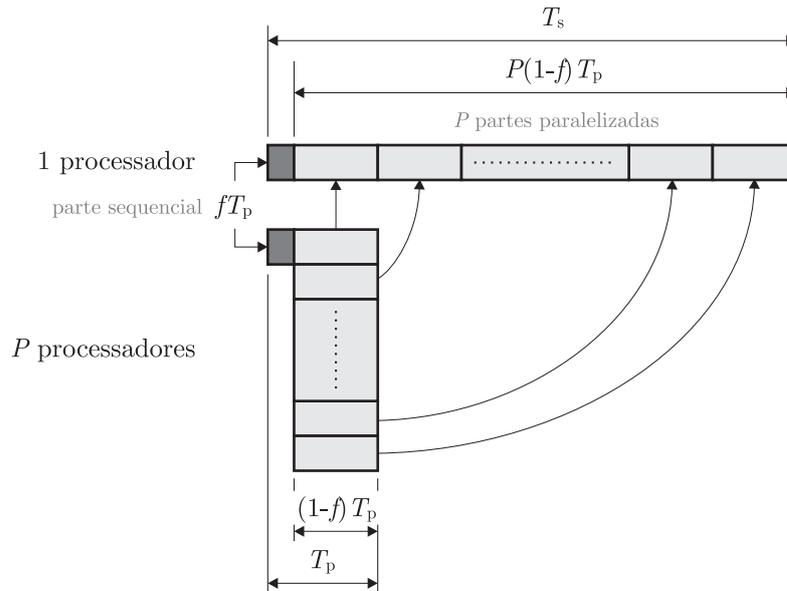


Figura 6.12: Ilustração esquemática da relação entre os tempos de execução sequencial e paralela, para a lei de Gustafson.

Considerando a equação 6.1, o valor do *speed-up* escalado corresponde a

$$s_e = \frac{fT_p + P(1 - f)T_p}{T_p}. \quad (6.8)$$

Reorganizando algebricamente e simplificando os termos da equação 6.8, obtém-se

$$s_e = f + (1 - f)P. \quad (6.9)$$

Deste modo, constata-se que o *speed-up* escalado cresce linearmente com o número de processadores. Assim, ao contrário do que se verifica *speed-up* associado à lei de Amdahl, o *speed-up* escalado é, em termos teóricos, ilimitado para valores de $f \in [0, 1[$. No entanto, tal como foi já referido, numa situação real é de esperar que, devido a fenómenos de comunicação entre processadores e de conflitos na partilha de recursos, o valor obtido para o *speed-up* escalado seja inferior ao previsto pela equação 6.9.

Em termos de conclusão, refira-se que o modelo de *speed-up* de Amdahl tem como ponto de partida a consideração de um problema computacional de dimensão fixa, visando a utilização de um número superior de processadores única e simplesmente a minimização do tempo de processamento. Pelo contrário, o modelo de *speed-up* Gustafson toma em consideração o conceito de escalabilidade. Ao querer caracterizar o desempenho de problemas computacionais cuja dimensão impossibilitava

a sua execução num único processador, Gustafson considerou a quantidade de memória disponível como o factor limitativo da utilidade de um sistema paralelo. Deste modo, em vez de partir de uma análise baseada nas características da execução de um programa num só processador e, recorrendo quer à experimentação quer à extrapolação matemática, de prever o modo como o programa seria executado de modo paralelo, Gustafson partiu da execução do programa num número significativo de processadores e, em sentido contrário, procedeu à previsão do tempo de execução do programa num único processador. Este modelo consiste no *speed-up* escalado [Davies 1994].

6.5 Arquitecturas MIMD

As arquitecturas MIMD podem ser classificadas relativamente à organização de memória (M) como multiprocessadores (computadores de memória partilhada), em que há um espaço de endereçamento único para todos os processadores, ou como multicomputadores (computadores de memória distribuída), em que cada processador (P) tem um espaço de endereçamento independente.

6.5.1 Multiprocessadores

Os multiprocessadores são constituídos por vários processadores que se encontram interligados e que comunicam através de operações de escrita e de leitura numa memória partilhada. No entanto, cada posição de memória só pode ser acedida por um processador de cada vez. Este tipo de máquina remonta aos anos 50 do século XX, o que a torna numa das mais antigas plataformas de computação paralela [Flynn 1996].

De acordo com a forma como os processadores acedem à memória partilhada, os multiprocessadores são usualmente classificados segundo os modelos UMA³⁰, NUMA³¹ e COMA³² [Hwang 1993].

O modelo UMA (*vd.* figura 6.13) caracteriza-se pelo facto de os processadores despenderem do mesmo tempo no acesso a qualquer posição da memória principal. Neste caso diz-se que o acesso à memória é uniforme. A memória principal pode ser lida ou actualizada por qualquer processador. A sigla SMP³³ é usualmente utilizada para designar um sistema UMA com acesso uniforme a todos os seus periféricos. O SGI Power Challenge constitui um exemplo de um SMP [Amato *et al.* 2000]. Os sistemas de interligação de processadores e memória partilhada podem consistir no barramento partilhado, numa rede *crossbar switch* ou numa rede multietapa [Culler *et al.* 1998]. A escalabilidade consiste na principal limitação dos multiprocessadores do modelo UMA. Os sistemas baseados em barramento partilhado são particularmente pouco escaláveis. O facto de a largura de banda do barramento partilhado não aumentar com a adição de processadores leva à saturação rápida do sistema. A utilização de memórias *caches* locais permite que cada processador utilize apenas uma pequena fracção da largura de banda, reduzindo-se assim a latência de acesso à memória principal. No entanto, as exigências de largura de banda dos actuais processadores não permite que geralmente se ultrapassem as duas dezenas de processadores num único barramento. Assim, em resposta às crescentes exigências de largura de banda, é possível utilizar uma rede de interligação do tipo *crossbar switch*. Embora constitua uma alternativa mais escalável, a aquisição de este tipo de rede de interligação é bastante dispendiosa. Uma rede de interligação multietapa permite obter, de um modo menos dispendioso, aproximadamente a mesma escalabilidade que a associada à do tipo *crossbar switch*. No entanto, a latência aumenta, geralmente, com a expansão de máquinas deste tipo [Culler *et al.* 1998]. Além disso, a sua escalabilidade tende a diminuir devido ao crescente desempenho dos novos processadores [Hennessy e Patterson 2002].

No modelo NUMA, o tempo de acesso depende da localização da memória a que um determinado processador pretende aceder. A memória partilhada encontra-se segmentada em diversos bancos fisicamente distribuídos pelo sistema. Assim, embora se encontre fisicamente distribuída, a

³⁰UMA: sigla de *Uniform Memory Access*.

³¹NUMA: sigla de *Non-Uniform Memory Access*.

³²COMA: sigla de *Cache-Only Memory Architecture*.

³³SMP: sigla de *Symmetric Multi-Processor*.

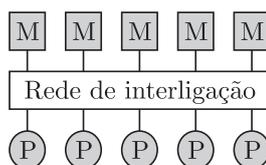


Figura 6.13: Representação esquemática do modelo UMA de um multiprocessador.

memória constitui um espaço de endereçamento global [Messina *et al.* 1998]. Por esta razão, este tipo de modelo de memória partilhada é também designado de memória partilhada distribuída³⁴. Devido à latência de comunicação entre processadores, o acesso de um processador à sua memória local é geralmente mais rápido que a uma memória remota. Numa situação geral, cada processador encontra-se associado a um dos bancos de memória partilhada (*vd.* figura 6.14). O acesso do processador aos bancos de memória remotos faz-se, de forma não-uniforme, através do sistema de interligação. Assim, este acesso é mais lento que os efectuados ao banco de memória local. Este tipo de organização de memória, ao contrário do modelo UMA (memória centralizada), permite construir sistemas NUMA com várias centenas de processadores. Estes sistemas NUMA de grandes dimensões podem ser formados pela associação de nós constituídos por vários processadores que formam localmente um sistema UMA (*e.g.* arquitectura SMP). Embora os processadores de cada nó constituam localmente uma arquitectura UMA, existe um endereço global que possibilita o acesso de cada processador à memória de um outro qualquer nó. Em cada sistema UMA, a interligação de processadores faz-se, como foi já referido, recorrendo a um barramento partilhado ou a um *crossbar switch*. No entanto, a ligação entre os vários nós é, geralmente, feita através de um ou de vários barramentos, de circuitos de comutação, ou utilizando redes estáticas de interligação, tais como, por exemplo, a topologia de rede em anel. A comunicação entre os vários nós faz-se através de troca de mensagens.

Sistemas NUMA que utilizam memórias *caches* coerentes, tal como o multiprocessador Stanford DASH Multiprocessor [Lenoski *et al.* 1992], são usualmente designados por CC-NUMA³⁵. Estes sistemas têm um acesso não-uniforme à memória. Tal como nos tradicionais SMP, todos os processadores têm uma visão global da memória. No entanto, devido aos atrasos introduzidos pela rede de interligação, o acesso à memória local de um processador é mais rápido que o acesso à memória remota de um outro processador, ao contrário do que ocorre nos sistemas de acesso uniforme à memória. Uma vez que a memória se encontra fisicamente distribuída, é necessário recorrer a mecanismos que garantam a sua coerência [Barbosa 2000]. As máquinas NUMA e CC-NUMA são geralmente mais escaláveis que os tradicionais SMP. Os sistemas HP SPP1600 e Cray T3E são exemplos de multiprocessadores NUMA [Hlavička 1997].

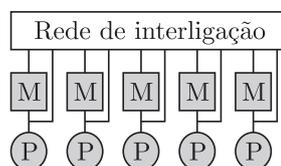


Figura 6.14: Representação esquemática do modelo NUMA de um multiprocessador.

Por fim, no modelo COMA as únicas memórias existentes são as *caches* associadas a cada processador. Este modelo pode ser visto como um caso particular do modelo NUMA em que as

³⁴Do inglês: *distributed shared memory*.

³⁵CC-NUMA: sigla de *Cache-Coherent Non-Uniform Memory Access*.

memórias partilhadas distribuídas são *caches* ou como um sistema CC-NUMA em que se eliminaram os bancos de memória local (*vd.* figura 6.15). Embora a memória partilhada não exista fisicamente, há um espaço de endereçamento global a que corresponde uma memória comum virtual. O principal objectivo deste modelo é evitar os inconvenientes da alocação estática de dados nas memórias locais, que é utilizada no modelo NUMA. Assim, no modelo COMA, os endereços de memória não correspondem a posições fixas na memória, podendo migrar entre as *caches* de acordo com as solicitações dos processadores [Sima *et al.* 1997]. Os multiprocessadores KSR-1, da Kendall Square Research, e DDM, do Swedish Institute of Computer Science, correspondem a arquitecturas COMA [Grujić *et al.* 1996].

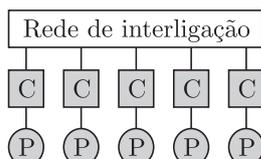


Figura 6.15: Representação esquemática do modelo COMA de um multiprocessador.

6.5.2 Multicomputadores

Os multicomputadores são caracterizados pela memória se encontrar associada a cada processador, podendo unicamente este aceder à sua memória local (*vd.* figura 6.16). Assim, em conformidade com a terminologia anteriormente utilizada para os multiprocessadores, os multicomputadores são também designados por máquinas NORMA³⁶. A partilha de informação necessária à realização de processamento paralelo obtém-se através da comunicação entre os vários processadores.

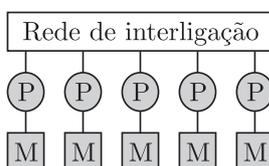


Figura 6.16: Representação esquemática do modelo geral de um multicomputador (NORMA).

Os multicomputadores são constituídos por um conjunto de nós interligados por uma rede de comunicações. Cada nó corresponde a um computador autónomo, constituído por processador, memória primária, *etc.* A utilização deste tipo de sistema revela-se vantajosa na resolução de problemas em que não é exigida grande quantidade de comunicações entre processadores, sendo a maior parte do processamento executada localmente, sem conflitos de acesso a memória. Neste sistema não são necessários mecanismos de sincronização para garantir a coerência dos dados em memória. A escalabilidade dos multicomputadores depende fundamentalmente da latência de comunicação associada à rede que interliga os processadores. Um *crossbar switch* pode ser usado como rede unilateral para ligar processadores a memórias de um multiprocessador ou como rede bilateral para interligar processadores de um multicomputador. Nos multicomputadores são frequentemente utilizadas as redes estáticas de interligação. Atenda-se ao facto de os multicomputadores serem, do ponto de vista físico, muito semelhantes aos multiprocessadores NUMA. O que os distingue é a forma de organização do espaço de endereçamento de memória: nos multicomputadores as memórias locais possuem espaços de endereçamento disjuntos, enquanto nos multiprocessadores

³⁶NORMA: acrónimo de *NO*n-*R*emote *M*emory *A*ccess.

cada memória local faz parte de um espaço de um único endereçamento global. Um aspecto importante da utilização de memória distribuída consiste na necessidade da localização dos dados, sendo essencial que cada processador identifique os dados que lhe foram atribuídos, de modo a poder efectuar adequadamente o seu processamento.

De entre os multicomputadores, destacam-se os computadores de processamento maciçamente paralelo MPP³⁷. Estes computadores possuem memória distribuída e, por serem geralmente constituídos por várias centenas de processadores, são computadores de enormíssima capacidade de processamento. Por exemplo, o supercomputador Intel TFLOPS possuía, já em 1998, cerca de 9 200 processadores Intel Pentium Pro, permitindo uma capacidade teórica de desempenho de 1,8 TFLOPS [Mattson e Henry 1998]. Este tipo de máquinas paralelas é usualmente utilizado para a resolução de problemas de cálculo intensivo que envolvem simulações com grandes quantidades de dados.

No entanto, devido ao elevado custo deste tipo de computador, desde os finais do século passado que se tem vindo a verificar uma tendência para a aquisição de soluções menos dispendiosas e mais flexíveis, como os *clusters*³⁸. A principal condicionante na utilização dos *clusters* advém das limitações das redes de interligação, em termos quer de latência quer de largura de banda. De facto, geralmente a utilização deste tipo de máquina paralela só se revela viável no caso do processo computacional não exigir uma utilização intensiva da rede de interligação. Os *clusters* têm vindo a tornar-se populares nos últimos anos por possibilitarem a construção de máquinas paralelas de capacidade computacional relativamente elevada a partir de *hardware* comercialmente acessível. De entre estes, destaca-se o *cluster* Beowulf³⁹ [Sterling *et al.* 1999, Gropp *et al.* 2003], que se distingue dos restantes *clusters* pelo facto de quer os nós quer a rede de interligação serem exclusivamente dedicados ao sistema computacional. Em geral, a comunicação do sistema computacional com o exterior é feita a partir de um único nó.

6.5.2.1 O *Cluster* Beowulf

O *cluster* Beowulf resultou de um projecto iniciado pela NASA⁴⁰ no Verão de 1994, no centro de pesquisas CESDIS⁴¹. O objectivo principal deste projecto consistiu em avaliar a aplicabilidade de arquitecturas de processamento paralelo de baixo custo a problemas do domínio das ciências espaciais. O primeiro destes *clusters* foi construído por Sterling *et al.* [Sterling *et al.* 1995]. Consistia em 16 nós com processadores Intel 486 DX4 a 100 MHz interligados por uma tecnologia de rede Ethernet a 10 Mbit/s. Desde então que diversas instituições de ensino/investigação têm construído os seus próprios *clusters* Beowulf. Esta tendência surge no contexto da necessidade crescente de elevada capacidade de processamento em diversas áreas científicas, constituindo os *clusters* Beowulf sistemas computacionais poderosos e economicamente viáveis. Para este facto contribuíram, de modo decisivo, a evolução do desempenho dos processadores, a diminuição do custo quer das tecnologias de rede quer dos próprios processadores e o acesso gratuito a sistemas operativos, tais como, por exemplo, o Linux [Torvalds e Diamond 2001] ou o FreeBSD [FreeBSD 2003]. Em termos genéricos, o *cluster* Beowulf consiste num aglomerado de computadores convencionais que se encontram interligados por uma rede local de alta velocidade e que permitem o acesso seguro a recursos computacionais de alto desempenho. De entre as suas inúmeras vantagens, destacam-se:

1. Elevada capacidade de processamento;

³⁷MPP: sigla de *Massively Parallel Processors*.

³⁸Um *cluster* corresponde a um conjunto de computadores interligados por uma rede de comunicação, que executam uma determinada tarefa, em geral, como se de uma única máquina se tratasse.

³⁹Beowulf é o nome do mais antigo poema épico escrito em inglês antigo, pertencente ao códice Cotton Vitellius A. xv, também conhecido por códice Nowell. Este poema, que se pensa ser anterior ao século XI d.C. e de autor incógnito, narra a história de um guerreiro escandinavo — Beowulf —, que combate um monstro que ameaça o Reino da Dinamarca. Embora o poema não possua título no manuscrito, é tradicionalmente denominado de Beowulf desde o início do século XIX.

⁴⁰NASA: sigla de *National Aeronautics and Space Administration*.

⁴¹CESDIS: acrónimo de *Center of Excellence in Space Data Information Sciences*.

2. Baixo custo — decorrente da utilização de componentes-padrão produzidos em larga escala (*e.g.* processadores);
3. Elevado grau de tolerância a falhas — resultante da existência de componentes redundantes no *cluster*, o que permite que o sistema continue em funcionamento mesmo na presença de defeitos em alguns dos nós;
4. Elevada escalabilidade — o que possibilita a agregação de novos nós de processamento ao *cluster*, à medida que se torne necessário aumentar a capacidade computacional disponível.

Neste contexto, esta foi a arquitectura adoptada no presente trabalho para analisar o desempenho computacional, em ambiente paralelo, da modelação numérica por elementos finitos do comportamento elastoplástico de materiais metálicos.

Em seguida abordam-se os principais aspectos da programação de computadores da arquitectura MIMD que se enquadram no âmbito do trabalho desenvolvido.

6.6 Programação de Computadores MIMD

A transformação de um programa num código executável que funcione de modo eficiente numa máquina paralela é função do compilador. No entanto, face à diversidade de arquitecturas existentes, torna-se difícil desenvolver compiladores capazes de produzirem código que funcione eficientemente na totalidade das máquinas paralelas. Assim, são usualmente os próprios fabricantes a desenvolver os compiladores para as suas máquinas. Deste modo, a maioria dos compiladores permite a adopção de um modelo de programação muito próximo do modelo de execução da máquina, o qual, por sua vez, se encontra relacionado com a arquitectura do computador paralelo. Embora este facto apresente a vantagem de permitir a optimização ao nível de execução aquando do desenvolvimento de um programa, impossibilita a portabilidade⁴² do código para os restantes modelos de execução. Por outro lado, o programador deve, em função dos recursos de computação disponíveis e do tipo de paralelismo inerente ao problema em questão, seleccionar um paradigma de programação adequado. Neste contexto, deverá procurar-se uma relação de compromisso entre o que se exige ao compilador e ao programador, baseada na relação existente entre o modo de programação, o compilador, o modelo de programação e o paradigma de programação.

6.6.1 Paralelismo Explícito e Paralelismo Implícito

Na programação de máquinas paralelas, o paralelismo pode ser, pelo menos a um nível conceptual, quer explícito quer implícito.

No paralelismo explícito, o compilador não tem qualquer intervenção no que concerne ao paralelismo. É ao programador que cabe as tarefas de gerir os recursos da máquina, elaborar a partição dos dados e balancear o esforço computacional. Ele deve analisar e compreender as dependências entre os dados, proceder quer à decomposição do programa em blocos quer à análise das dependências entre estes e transformar cada bloco num conjunto de tarefas a serem executadas em paralelo. O facto de o programador poder optimizar o programa, explorando de um modo exaustivo todas as fontes de paralelismo, consiste na principal vantagem deste modelo. A grande complexidade inerente à programação do código e a necessidade do conhecimento profundo da aplicação por parte do programador constituem as principais desvantagens do paralelismo explícito. A programação é efectuada utilizando um comum compilador do tipo sequencial (*e.g.* FORTRAN 77⁴³ [Campbell *et al.* 1978], C [Kernighan e Ritchie 1978]). Recorrendo a uma biblioteca de funções independente do compilador (*e.g.* MPI⁴⁴ [MPIF 1994], PVM⁴⁵ [Sunderam 1990]), o programador

⁴²Do inglês: *portability*.

⁴³FORTRAN: acrónimo derivado da expressão "IBM Mathematical **FOR**mula **TRAN**slating System".

⁴⁴MPI: sigla de *Message-Passing Interface*.

⁴⁵PVM: sigla de *Parallel Virtual Machine*.

explicita o paralelismo através de comandos, devendo atender aos diferentes fluxos de execução, às sincronizações e à dependência entre os dados.

No paralelismo implícito é ao compilador que cabe as tarefas de extrair o paralelismo, gerir os recursos e a distribuição de trabalho pelos vários processadores da máquina paralela. Deste modo, o programador não necessita de explicitar o paralelismo através de comandos, bastando-lhe executar a tradicional programação do tipo sequencial. O facto de o trabalho de paralelização ficar a cargo do compilador e a possibilidade de se reaproveitarem programas sequenciais já existentes consistem nas principais vantagens deste modelo. A não-exploração total do paralelismo e o facto de o programador não ter controlo sobre o modo como se desenrola o processo paralelo constituem as principais desvantagens do paralelismo implícito. Este tipo de abordagem exige do compilador as capacidades de análise e de compreensão das dependências entre os dados, da decomposição do programa em blocos, da análise das dependências entre blocos e da transformação de cada bloco num conjunto de tarefas paralelizadas. Tem havido vários esforços no sentido de se desenvolver este tipo de compiladores [Bodin *et al.* 1994], o que permitiria a paralelização automática da imensidão de linhas de código já desenvolvido segundo o modelo de von Neumann. No entanto, os compiladores mais evoluídos encontram-se actualmente numa posição intermédia, exigindo algumas orientações por parte do programador. Devido a esta limitação, a programação de máquinas paralelas apenas pode ser realizada explícita ou semi-implicitamente, existindo programação implícita somente a um nível conceptual.

6.6.2 Modelos de Programação de Computadores MIMD

Os modelos de programação paralela de computadores quer de memória distribuída quer de memória partilhada são usualmente subdivididos em três categorias principais: paralelismo de dados, partilha de memória e passagem de mensagens [Culler *et al.* 1998, Leopold 2001]. Os aspectos mais relevantes destes modelos são abordados em seguida.

6.6.2.1 Paralelismo de Dados

O modelo de programação paralelismo de dados é caracterizado pela execução paralela de uma operação sobre diversas partes de um vasto conjunto de dados [Leopold 2001]. No início da década de 90, a maioria dos programas de cálculo intensivo era desenvolvida com base no Fortran⁴⁶. A exigência de portabilidade levou à necessidade de normalizar as várias iniciativas de programação segundo o modelo paralelismo de dados. Neste contexto foi desenvolvida a linguagem HPF⁴⁷ [HPF 1993]. Embora o compilador de HPF origine o código necessário para se trocarem dados entre os processadores, é necessário que o programador indique, através de directivas, o modo como devem ser distribuídos os dados (paralelismo semi-implícito). A portabilidade entre diferentes máquinas é obtida com base na geração de código utilizando compiladores fornecidos ao utilizador pelos fabricantes. Estes compiladores, que aceitam o dialecto HPF, permitem a geração de código eficiente para troca de dados na máquina considerada. No entanto, embora o HPF seja adequado para código simples, não possui ainda suficiente poder expressivo para especificar as distribuições necessárias em programas mais complexos, tais como, por exemplo, os associados ao cálculo não-estruturado, adaptativo, *etc.* [Bodin *et al.* 1994].

6.6.2.2 Partilha de Memória

No modelo partilha de memória, os processos partilham um espaço de endereçamento comum, onde lêem e escrevem assincronamente. Este modelo de programação é adequado para os computadores de memória partilhada, sendo usualmente implementado em SMP ou máquinas CC-NUMA. Embora as arquitecturas de memória partilhada sejam atractivas do ponto de vista da programação, apresentam a desvantagem de possuírem uma escalabilidade limitada. Por outro lado, as

⁴⁶De acordo com a American National Standards Association, as versões posteriores ao FORTRAN 77 passam a ser escritas com apenas a letra inicial maiúscula, isto é, Fortran.

⁴⁷HPF: sigla de *High Performance Fortran*.

arquitecturas de memória distribuída são escaláveis, mas apresentam a desvantagem de não oferecerem ao programador um espaço de endereçamento único. Este facto torna a sua programação consideravelmente mais complexa. Neste contexto, a simulação de uma máquina de memória partilhada numa máquina de memória distribuída visa juntar os aspectos positivos dos dois sistemas, aliando uma arquitectura escalável a um modelo de programação simples. Esta combinação é designada memória partilhada virtual [Clarke 1997, Protić *et al.* 1996], salientando o facto de a comunicação ser feita por troca de mensagens. O TreadMarks [Amza *et al.* 1996] e o Fortran S [Bodin *et al.* 1994] constituem sistemas que permitem a implementação de um sistema de memória partilhada distribuída. O OpenMP [Graham 1999] disponibiliza um modelo de programação partilha de memória para máquinas de memória partilhada, permitindo assim a obtenção de um bom desempenho aliado à portabilidade em arquitecturas baseadas em nós SMP.

6.6.2.3 Passagem de Mensagens

O modelo passagem de mensagens requer que o programador defina explicitamente, através da utilização de uma biblioteca de funções, as interações entre os vários processos que decorrem em paralelo. De facto, os vários processadores cooperam na resolução de um determinado problema num ambiente com espaços de endereçamento disjuntos. Esta cooperação leva à necessidade de se trocarem dados entre os diversos processos. As trocas são executadas a partir da referência explícita, no código, a instruções de comunicação (passagem de mensagens). Neste modelo de programação, o código é usualmente desenvolvido em C/C++ [Stroustrup 1984] ou FORTRAN 77/Fortran 90, sendo utilizados os compiladores sequenciais já existentes. Em termos de paralelismo, nenhum esforço é exigido ao compilador, sendo somente necessário incluir as bibliotecas de funções referidas no código. A grande flexibilidade do modelo passagem de mensagens faz com que seja o mais utilizado actualmente em cálculo científico. Este modelo permite o total controlo do paralelismo por parte do programador. Assim, embora a programação seja complexa, o programador dispõe da possibilidade de maximizar o desempenho de um programa numa máquina paralela.

6.6.3 Paradigmas de Programação de Computadores MIMD

Existem vários paradigmas de programação paralela que um programador pode adoptar na estruturação ou organização do desenvolvimento de programas. A selecção de um ou de outro paradigma depende, fundamentalmente, das características da aplicação, dos recursos computacionais disponíveis e do tipo de paralelismo intrínseco ao problema que se pretende resolver. Neste contexto, em seguida procede-se à abordagem, de modo sucinto, dos paradigmas mestre-escravo⁴⁸ e SPMD⁴⁹ — programa único-múltiplos dados —, e dos modelos híbridos.

6.6.3.1 Paradigma Mestre-Escravo

O paradigma mestre-escravo caracteriza-se pela existência de dois tipos de entidade distintos: um processo mestre e vários processos escravos. O conceito fundamental deste paradigma consiste em atribuir ao processo mestre a responsabilidade de coordenar a execução de actividades, as quais são executadas pelos processos escravos. Assim, o processo mestre é responsável por proceder à decomposição do problema em pequenas tarefas e distribuí-las pelos processos escravos. Cada processo escravo processa a sua tarefa e envia os seus resultados ao processo mestre. Posteriormente, após ter recebido os dados de todos os processos escravos, o processo mestre produz o resultado final do cálculo computacional em paralelo (*cf.* figura 6.17). Em geral, a comunicação processa-se unicamente entre o processo mestre e os processos escravos. As principais vantagens do paradigma mestre-escravo residem no facto de este permitir a obtenção de elevados valores de *speed-up* e um grau de escalabilidade relevante. No entanto, em situações em que haja um elevado número de processos escravos, o controlo executado pelo processo mestre pode dar origem a fenómenos de

⁴⁸Do inglês: *master-slave*. Na bibliografia anglófona, este paradigma é, por vezes, designado por *task-farming*.

⁴⁹SPMD: sigla de *Single Program-Multiple Data*.

estrangulamento. Neste caso, é possível aumentar o número de processos mestres, controlando cada um deles um conjunto distinto de processos escravos.

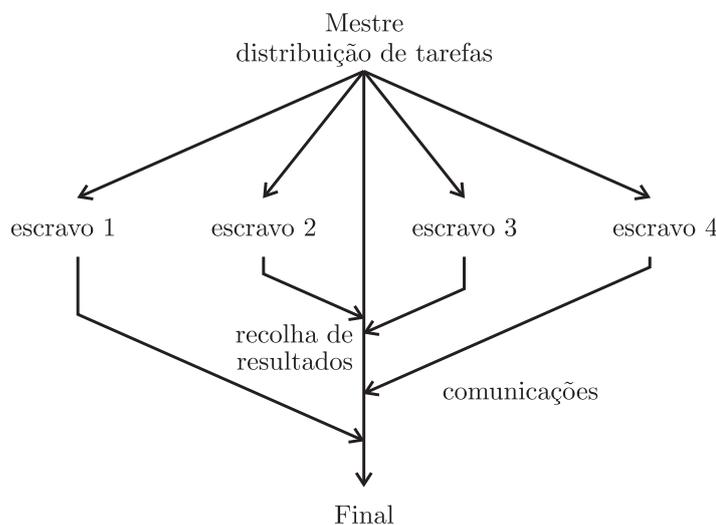


Figura 6.17: Representação esquemática do paradigma mestre-escravo [Silva e Buyya 1999].

6.6.3.2 Paradigma SPMD

O paradigma SPMD é o mais usualmente utilizado em cálculo paralelo. Neste caso, cada processo executa o mesmo programa recorrendo a diferentes dados. Este facto requer que se proceda a uma divisão prévia dos diversos dados pelos vários processadores. Este tipo de paralelismo é usualmente denominado de paralelismo geométrico, de decomposição de domínio ou de paralelismo de dados, sendo usualmente utilizado em problemas em que se procede à decomposição de domínio pelos vários processadores (*vd.* Secção 6.4.5). Neste caso, cada processo comunica com os processos associados a subdomínios vizinhos, sendo a dimensão da comunicação de um processo proporcional à dimensão da fronteira comum do subdomínio que lhe corresponde. Por outro lado, o cálculo computacional associado a cada processo é proporcional ao volume do correspondente subdomínio. As aplicações com base no paradigma SPMD podem ser bastante eficientes, se o esforço computacional se encontrar balanceado pelos vários processadores. No entanto, apresenta o inconveniente de a falha de um processo poder dar origem à paragem do processo global de cálculo paralelo. Tal fenómeno ocorre, por exemplo, quando existe um ponto de sincronização global dos vários processos. Na figura 6.18 representa-se esquematicamente o funcionamento de um programa paralelo segundo o paradigma SPMD.

6.6.3.3 Modelos Híbridos

Em termos práticos, numa aplicação concreta pode ser necessário recorrer a características de programação de diferentes paradigmas. Um modelo híbrido é construído e utilizado quando uma determinada aplicação permite a exploração de mais de um tipo de paralelismo (*e.g.* paralelismo quer de tarefas quer de dados). Deste modo, conceitos e estratégias de diferentes paradigmas são utilizados para estruturar e obter a solução computacional de um modo mais eficiente.

Uma descrição mais detalhada destes e doutros paradigmas de programação utilizados na implementação de programas paralelos pode ser consultada, por exemplo, em [Silva e Buyya 1999, Leopold 2001].

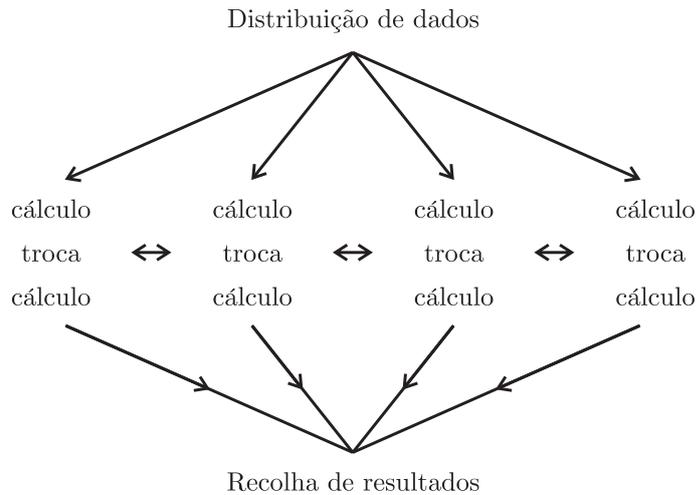


Figura 6.18: Representação esquemática do paradigma SPMD [Silva e Buyya 1999].

6.7 Interface de Passagem de Mensagens— MPI

Nesta secção apresentam-se, de forma sumária, os aspectos mais relevantes da interface normalizada para passagem de mensagens MPI que se enquadram no âmbito do trabalho desenvolvido.

O MPI consiste numa biblioteca de funções para troca de mensagens com que se pretende estabelecer uma norma globalmente aceite e amplamente divulgada para o desenvolvimento de programação paralela segundo o paradigma de passagem de mensagens (*cf.* Secção 6.6.3). O desenvolvimento de computadores de memória distribuída e da computação paralela, a necessidade de ferramentas para se desenvolverem programas em ambientes paralelos e os problemas relacionados com portabilidade, desempenho, funcionalidade e custo constituem os principais factores que determinaram a necessidade de se desenvolver este padrão. O processo de normalização iniciou-se em 1992, quando investigadores do Oak Ridge National Laboratory verificaram que, na Europa e nos Estados Unidos da América, se estava a divergir para diferentes sistemas de passagem de mensagens. Neste contexto, foi criado o Fórum MPI, no qual participaram fabricantes de computadores, investigadores de várias universidades, programadores e utilizadores de todo o mundo. O seu objectivo consistiu na obtenção de uma especificação, a partir da qual todos os fabricantes pudessem desenvolver um sistema adaptado à sua máquina de modo a que um programa escrito em MPI fosse portátil. A participação activa de elementos com diferentes perspectivas teve como consequência a negociação de toda a funcionalidade do sistema, uma vez que estes teriam em mente diferentes tipos de implementação. No desenvolvimento do MPI procurou-se utilizar as características mais funcionais de outras bibliotecas de passagem de mensagens, tais como, por exemplo, PICL⁵⁰ [Geist *et al.* 1990], PVM [Sunderam 1990, Geist *et al.* 1994], Zipcode [Skjellum e Leung 1990, Skjellum *et al.* 1994], Chimp⁵¹ [Mills *et al.* 1991], P4 [Butler e Lusk 1992], Chameleon [Gropp e Smith 1993], Express [Flower e Kolawa 1994] e PARMACS⁵² [Calkin *et al.* 1994]. Um aspecto relevante para a consolidação do MPI consistiu no compromisso, por parte de investigadores do Argonne National Laboratory, de se implementar e manter uma versão que correspondesse às especificações do MPI à medida que estas iam sendo produzidas. Na realidade, este facto permitiu, por um lado, que os participantes avaliassem o sistema proposto e sugerissem outras soluções, e, por outro lado, mostrar que o sistema era exequível. Este sistema, designado por MPICH⁵³ [Gropp *et al.* 1996, Gropp e Lusk 2001],

⁵⁰PICL: sigla de *Portable Instrumented Communication Library*.

⁵¹Chimp: acrónimo de *Common High-level Interface to Message-Passing*.

⁵²PARMACS: acrónimo de *PARallel MACroS*.

⁵³MPICH: acrónimo de *Message-Passing Interface CHameleon* [Gropp e Smith 1993].

serviu de base para os fabricantes procederem ao desenvolvimento de sistemas para as suas máquinas. A primeira versão do MPI, denominada MPI-1.0 [MPIF 1994], foi publicada em Maio de 1994, tendo sido posteriormente publicada, em Junho de 1995, a versão MPI-1.1 [MPIF 1995]. No entanto, a maioria das revisões desta última versão consistiu em meros esclarecimentos de algumas propriedades do MPI. Os principais objectivos definidos no Fórum MPI consistiram na elaboração de uma biblioteca de funções (não de um sistema operativo) que permitisse um elevado desempenho em supercomputadores ou sistemas de elevada capacidade de processamento, que fosse modular, para facilitar a portabilidade do código, e que suportasse computação heterogénea. Todavia, o requisito de elevado desempenho levou a que os sistemas desenvolvidos com base no MPI-1 só consentissem ambientes de computação homogénea, pelo que, na altura, eram quase exclusivamente utilizados em supercomputadores. Posteriormente o Fórum MPI procedeu à correcção e à extensão do MPI, pelo que, em 1997, foram publicadas a versão MPI-1.2 [MPIF 1997] e uma nova especificação do MPI, o MPI-2 [MPIF 1997]. Nesta nova especificação abordam-se aspectos adicionais, tais como, por exemplo, gestão dinâmica de processos, acesso remoto a zonas de memória partilhada, paralelismo em operações de entrada/saída e extensões a operações colectivas. A definição, no MPI-2, de rotinas que possibilitam o lançamento e a eliminação de processos durante a fase de execução de uma determinada aplicação paralela de MPI — gestão dinâmica de processos — foi parcialmente motivada pela experiência previamente adquirida com o PVM. Na realidade, anteriormente à existência de implementações de MPI-2 houve uma tentativa de dotar o MPI-1 da flexibilidade do PVM, pelo que foi criado o PVMPI [Fagg *et al.* 1997]. No entanto, este projecto não teve continuidade. Não obstante, parte dos objectivos da especificação do MPI-2 visaram a introdução dessa flexibilidade no MPI-1.

As rotinas de MPI podem ser divididas em dois grupos principais. O primeiro grupo contém as rotinas de gestão, sendo o segundo grupo constituído pelas rotinas de comunicação. As principais características relacionadas com estas rotinas são abordadas nas secções seguintes.

6.7.1 Rotinas de Gestão

As rotinas de gestão são responsáveis pela iniciação, contagem, identificação e finalização de processos paralelos. Embora a livreria de troca de mensagens do MPI possa ser utilizada em programas escritos em linguagem C ou Fortran, neste trabalho apenas se consideram os aspectos de sintaxe associados à programação em Fortran. Neste contexto, de seguida apresenta-se um programa, cuja estrutura básica ilustra a utilização das rotinas MPI de iniciação, contagem, identificação e finalização de processos paralelos.

```
program processo
include 'mpif.h'
integer ierr, comm, rank, size
call MPI_INIT(ierr)
comm = MPI_COMM_WORLD
call MPI_COMM_SIZE(comm, size, ierr)
call MPI_COMM_RANK(comm, rank, ierr)
print*, 'Processo ', rank, ' de ', size, ' criados.'
call MPI_FINALIZE(ierr)
end
```

Após a iniciação do programa, procede-se à inclusão do ficheiro `mpif.h`, no qual são definidos os tipos de dados e predefinidas as constantes a serem utilizados pelas funções de MPI. Segue-se a definição das variáveis inteiras de etiqueta de erro (`ierr`), de comunicador (`comm`), de ordem (`rank`) e de tamanho (`size`). A definição e a iniciação do ambiente MPI fazem-se com a invocação da rotina `MPI_INIT`, que sincroniza todos os processos aquando do início de uma aplicação de MPI. Esta deverá ser a primeira rotina de MPI invocada. A rotina `MPI_COMM_SIZE` fornece, no

argumento `size`, o número total de processos paralelos criados. A distinção entre os n processos criados é feita com base na rotina `MPI_COMM_RANK`, que fornece, no argumento `rank`, a ordem de um determinado processo. Atenda-se ao facto de a ordem dos n processos criados variar de 0 a $n-1$. O argumento `comm` define um comunicador⁵⁴, que corresponde a um grupo de processos que são identificados univocamente pela sua ordem⁵⁵. No exemplo apresentado utilizou-se o comunicador geral `MPI_COMM_WORLD`, que, por defeito, engloba a totalidade dos processos da aplicação. Como consequência, todos os processos procedem à escrita da sua ordem e do seu número total. A rotina `MPI_FINALIZE` é utilizada para se finalizar o ambiente MPI para cada processo. Esta deverá ser a última rotina de MPI a ser invocada. Por fim, procede-se ao encerramento do programa. Pode constatar-se que no programa apresentado não foram utilizadas quaisquer comunicações entre os vários processos. As principais rotinas de comunicação de MPI são abordadas nas secções seguintes.

6.7.2 Rotinas de Comunicação

O MPI define um conjunto de várias rotinas de comunicação destinadas à troca de mensagens ou ao estabelecimento de sincronismo entre os vários processos que cooperam na resolução de um determinado problema. Assim, há rotinas que se limitam, cada vez que são invocadas, ao envio ou à recepção de dados de um único processo, outras permitem a comunicação entre um grupo de processos. Há, ainda, algumas que sincronizam a execução das tarefas entre cada um dos processos. Todavia, antes de serem referidas as principais rotinas de comunicação do MPI, vai proceder-se à definição de alguns dos conceitos básicos relacionados com a comunicação por MPI. As rotinas de comunicação de MPI podem ser classificadas de acordo quer com o número de processos envolvidos na comunicação quer com o tipo de transmissão de mensagens utilizado. Neste contexto, quanto ao número de processos envolvidos na comunicação, as rotinas podem ser de comunicação ponto-a-ponto ou de comunicação colectiva. As rotinas de comunicação ponto-a-ponto envolvem a troca de mensagens entre dois processos distintos que partilham um mesmo comunicador: um processo que emite e outro que recebe uma determinada mensagem. Pelo contrário, as rotinas de comunicação colectiva envolvem todos os processos de um determinado comunicador⁵⁶. Neste caso, todos os processos envolvidos devem invocar a mesma rotina.

Em relação ao tipo de transmissão de mensagens, as rotinas de comunicação podem ser bloqueantes ou não-bloqueantes. Em termos gerais, uma rotina de comunicação é dita bloqueante, se apenas regressa após a conclusão efectiva da operação para a qual foi invocada. Pelo contrário, uma rotina de comunicação não-bloqueante regressa de imediato, o que, embora possibilite aos processos desempenharem outras tarefas em simultâneo com as de comunicação, não garante que a operação para a qual a rotina foi invocada tenha sido concluída de modo efectivo. Assim, um dos objectivos da utilização do tipo não-bloqueante de comunicação consiste no melhoramento do desempenho das aplicações, visto não ocorrer o bloqueio de processos. Estes aspectos serão abordados com maior detalhe nas secções seguintes.

6.7.2.1 Comunicação Ponto-a-Ponto

As rotinas de comunicação ponto-a-ponto baseiam-se nos comandos de envio⁵⁷ e de recepção⁵⁸ de mensagens entre dois processos (*vd.* figura 6.19). Estas podem assumir, de acordo com as necessidades de programação, tipos de transmissão bloqueantes ou não-bloqueantes. A selecção de um determinado tipo de transmissão pode estar relacionada com a sincronização requerida pelos processos ou com a necessidade de desempenho imposta por determinadas aplicações.

⁵⁴Do inglês: *communicator*.

⁵⁵Do inglês: *rank*.

⁵⁶A importância da definição do comunicador prende-se com o facto da comunicação apenas poder ocorrer entre processos que partilhem o mesmo comunicador. Não obstante o MPI permitir a definição de comunicadores adicionais, no seguimento do texto considerar-se-á implicitamente, sem perda de generalidade, que todos os processos envolvidos numa comunicação partilham o comunicador geral `MPI_COMM_WORLD`.

⁵⁷Do inglês: *send*.

⁵⁸Do inglês: *receive*.

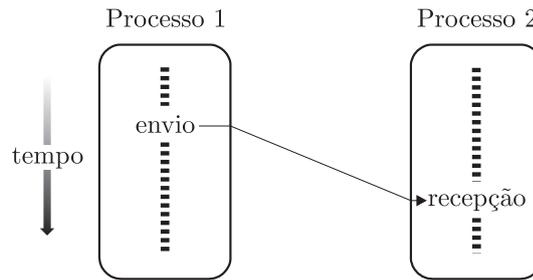


Figura 6.19: Representação esquemática da passagem de mensagem através de comandos de envio e de recepção.

Uma rotina de envio é dita bloqueante, se não permitir que o processo emissor continue a ser executado até que a zona de armazenamento da mensagem (*buffer*) possa ser reutilizada pelo referido processo, *i.e.* aquando da conclusão da operação de envio. Este tipo de comportamento garante que os dados armazenados no *buffer* de emissão não sofrem qualquer tipo de modificação até à sua transmissão para a rede de interligação. No entanto, atenda-se ao facto de não se garantir a correcta recepção da mensagem pelo processo-alvo; apenas se garante que a mensagem é correctamente transmitida pelo processo de emissão. Analogamente, uma rotina de recepção é dita bloqueante, se permitir que o processo receptor continue a ser executado unicamente após a recepção integral da mensagem comunicada, *i.e.* aquando da recepção total da mensagem por parte do *buffer* de recepção.

No que concerne ao tipo de envio bloqueante, o MPI define quatro modos de comunicação ponto-a-ponto:

1. Síncrono⁵⁹ — o processo emissor somente retoma a sua execução, após se ter iniciado o recebimento da mensagem por parte do *buffer* de recepção, assim que se conclua a transferência de dados a partir do *buffer* de emissão;
2. Pronto⁶⁰ — a mensagem é enviada para a rede de interligação logo que ocorra a execução do comando de envio pronto por parte do processo emissor. No entanto é necessário que este processo tenha já recebido uma notificação previamente enviada por parte do processo receptor, informando-o de que a transferência pode ser efectuada. Caso contrário, ocorre um erro no programa;
3. Armazenado⁶¹ — a mensagem é copiada do *buffer* de emissão do processo emissor para um *buffer* de sistema, o qual deve ser previamente definido pelo programador. Após a conclusão da operação de cópia, o processo emissor retorna ao seu modo de execução. Deste modo, este processo pode proceder a alterações nos dados do seu *buffer* de emissão, visto que estas não se irão reflectir na mensagem que será enviada;
4. Padrão⁶² — depende da implementação de MPI considerada [MPIF 1995]. Em geral podem ocorrer duas situações distintas, consoante o tamanho da mensagem a ser transmitida seja ou não superior a um valor crítico, designado valor-limiar⁶³. No primeiro caso, o processo de comunicação ocorre de um modo que em parte se assemelha ao verificado quando se utiliza o comando de envio síncrono. No segundo caso, verifica-se que, após a execução do comando de envio padrão, a mensagem é copiada, através da rede de interligação, do *buffer* de emissão do

⁵⁹Do inglês: *synchronous*.

⁶⁰Do inglês: *ready*.

⁶¹Do inglês: *buffered*.

⁶²Do inglês: *standard*.

⁶³Do inglês: *threshold*.

processo emissor para um *buffer* do sistema localizado no nó associado ao processo receptor, retornando o processo emissor ao seu modo de execução logo que se completa a transferência da mensagem no *buffer* de emissão.

Aos modos de envio bloqueante correspondem as rotinas de comunicação ponto-a-ponto bloqueante `MPI_SSEND` (envio síncrono), `MPI_RSEND` (envio pronto), `MPI_BSEND` (envio armazenado) e `MPI_SEND` (envio padrão). No entanto, no MPI é definido um único modo de recepção bloqueante, a que corresponde a rotina de comunicação ponto-a-ponto bloqueante `MPI_RECV`. A recepção bloqueante caracteriza-se pelo facto de o processo receptor apenas retomar a sua execução assim que se verificar o recebimento integral da mensagem por parte do *buffer* de recepção.

Em contraste, as rotinas de envio e de recepção não-bloqueantes permitem que um processo continue a ser executado logo após a sua invocação. Assim, embora possibilitem aos processos desempenharem outras tarefas em simultâneo com as de comunicação, não garantem que a operação para a qual foram invocadas tenha sido concluída. Deste modo, não é seguro proceder-se à modificação do conteúdo de um *buffer* antes de se ter a certeza de que a transferência de dados tenha sido concluída de modo efectivo. Neste contexto, são providenciadas rotinas auxiliares que possibilitam testar se a comunicação foi ou não concluída (`MPI_WAIT` e `MPI_TEST`). Um dos principais objectivos da utilização do tipo de transmissão não-bloqueante consiste na melhoria do desempenho das aplicações. No que concerne ao tipo de envio não-bloqueante, o MPI define os mesmos quatro modos de comunicação ponto-a-ponto que para o tipo de envio bloqueante, a que correspondem as rotinas de comunicação ponto-a-ponto não-bloqueante `MPI_ISSEND` (envio síncrono), `MPI_IRSEND` (envio pronto), `MPI_IBSEND` (envio armazenado) e `MPI_ISEND` (envio padrão). De modo semelhante, no MPI é definido um único modo de recepção não-bloqueante, a que corresponde a rotina de comunicação ponto-a-ponto não-bloqueante `MPI_Irecv`. As rotinas não-bloqueantes apresentam a vantagem de os processos emissor e receptor poderem continuar o seu modo de execução, mesmo que a mensagem ainda não tenha sido completamente transferida do *buffer* de emissão ou para o *buffer* de recepção, respectivamente. Este facto permite a eliminação de fenómenos de bloqueio mútuo⁶⁴ e a redução do *overhead* de sistema. No entanto, a sua utilização exige um controlo mais cuidadoso por parte do programador.

No Apêndice B apresenta-se uma análise detalhada dos principais aspectos relativos ao processo de passagem de mensagens em cálculo paralelo e distribuído utilizando rotinas de comunicação ponto-a-ponto, quer bloqueante quer não-bloqueante.

6.7.2.2 Comunicação Colectiva

As comunicações colectivas diferem das ponto-a-ponto no sentido que envolvem a comunicação coordenada entre todos os processos de um dado grupo, os quais são identificados por um comunicador. Por defeito, o MPI considera que todos os processos existentes se encontram envolvidos nas comunicações. No entanto, o programador pode definir, de acordo com as suas necessidades, um grupo específico de processos (comunicador).

As várias comunicações colectivas, que consistem em múltiplas comunicações ponto-a-ponto, correspondem a combinações ou a variações de quatro rotinas elementares: `MPI_Broadcast`, `MPI_Gather`, `MPI_Scatter` e `MPI_Reduce` [Caglar 2004]. Em termos da quantidade de processos emissores e receptores, as rotinas de comunicação colectiva podem ser classificadas em três grupos distintos: de um para vários processos, de vários processos para um e de vários processos para vários. As rotinas de comunicação dos tipos de um para vários processos e de vários processos para vários requerem a existência de um processo mestre, também designado por processo raiz⁶⁵. Como se

⁶⁴Do inglês: *deadlock*. O fenómeno de bloqueio mútuo ocorre quando todos os processos se encontram simultaneamente à espera da ocorrência de um evento ou da disponibilidade de um recurso. Assim, qualquer dos processos fica indefinidamente à espera de que um dos restantes realize uma determinada acção para que possa prosseguir a sua execução.

⁶⁵Do inglês: *root*.

verá, este é o processo que procede à difusão, dispersão⁶⁶, recolha⁶⁷ ou redução⁶⁸ dos dados. Em termos de funcionalidade, as rotinas de comunicação colectiva podem ser alternativamente classificadas em rotinas de sincronização de tarefas, de movimentação de dados e de computação global.

Sincronização de Tarefas

A rotina `MPI_BARRIER` (vd. figura 6.20) é utilizada na sincronização de todos os processos que constituem um determinado grupo. Ela bloqueia os processos que vão procedendo à sua invocação até que a totalidade dos processos que constituem o comunicador o tenham feito. Na figura 6.20 ilustra-se a sincronização de n processos recorrendo-se a uma barreira⁶⁹: os processos vão sendo bloqueados conforme procedem à execução do comando `MPI_BARRIER`, até que, após a enésima execução do referido comando, em particular pelo processo j , os restantes processos retomam a sua execução de um modo sincronizado.

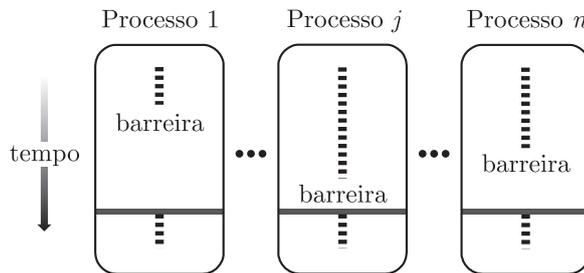


Figura 6.20: Representação esquemática da rotina `MPI_BARRIER`.

Movimentação de Dados

As principais rotinas de movimentação de dados correspondem, de acordo com a figura 6.21, a:

1. `MPI_BCAST` — permite a difusão dos dados armazenados no *buffer* do processo raiz para todos os outros processos do mesmo grupo, incluindo o próprio processo raiz. A quantidade de dados difundidos pelo processo emissor deve ser exactamente a mesma que a recebida por cada um dos processos receptores;
2. `MPI_GATHER` — permite que os dados armazenados nos *buffers* de emissão dos vários processos do mesmo grupo sejam recolhidos no *buffer* de recepção do processo raiz;
3. `MPI_SCATTER` — possibilita a dispersão dos dados armazenados no *buffer* de emissão do processo raiz pelos *buffers* de recepção dos vários processos do mesmo grupo;
4. `MPI_ALLGATHER` — permite que os dados armazenados nos *buffers* de emissão dos vários processos do mesmo grupo sejam recolhidos nos *buffers* de recepção de todos os processos do comunicador;
5. `MPI_ALLTOALL` — possibilita a dispersão de dados armazenados no *buffer* de emissão de cada processo pelos *buffers* de recepção dos vários processos do mesmo grupo, permitindo que cada processo recolha uma porção de dados de todos os processos do grupo.

⁶⁶Do inglês: *scattering*.

⁶⁷Do inglês: *gathering*.

⁶⁸Do inglês: *reduction*.

⁶⁹Do inglês: *barrier*.

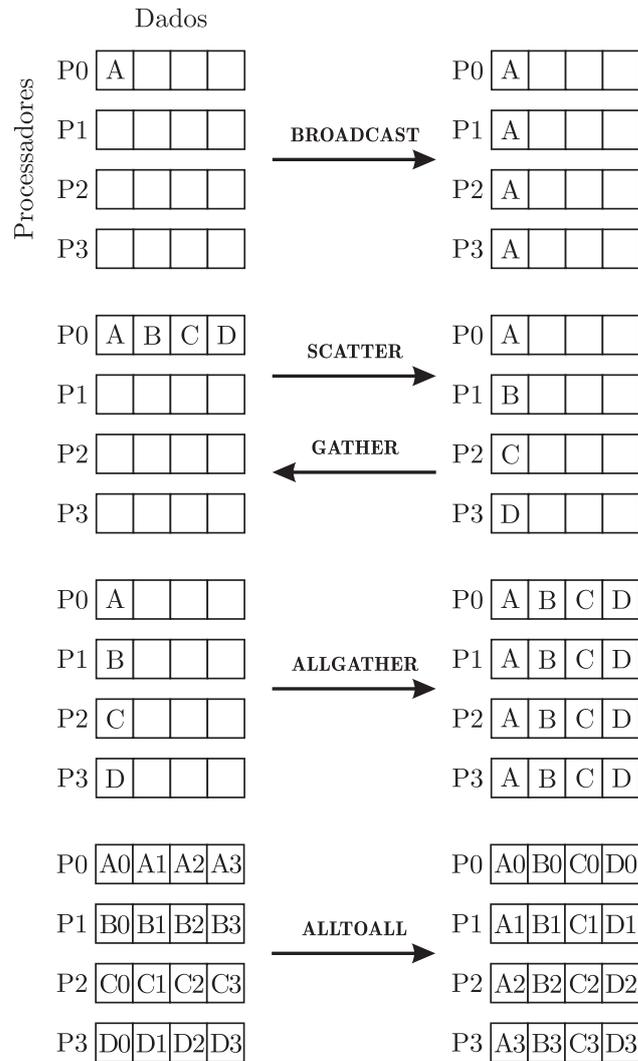


Figura 6.21: Representação esquemática das principais rotinas de movimentação de dados para um grupo de quatro processos.

Existem ainda as rotinas `MPI_GATHERV`, `MPI_SCATTERV`, `MPI_ALLGATHERV` e `MPI_ALLTOALLV` que estendem⁷⁰ as funcionalidades das rotinas `MPI_GATHER`, `MPI_SCATTER`, `MPI_ALLGATHER` e `MPI_ALLTOALL`, respectivamente, ao permitirem quer a comunicação de blocos com diferentes números de dados para diferentes processadores quer a localização não-sequencial das mensagens em memória.

Computação Global

As operações colectivas de computação global correspondem a operações globais de redução efectuadas num determinado conjunto de dados. De entre os principais tipos predefinidos de operação de redução destacam-se: `MPI_MAX` — valor máximo, `MPI_MIN` — valor mínimo, `MPI_SUM` — somatório e `MPI_PROD` — produtório. As principais rotinas de computação global correspondem a:

1. `MPI_REDUCE` — aplica uma operação de redução sobre os dados armazenados nos *buffers* com operando de redução de todos os processos do grupo e armazena o resultado no *buffer* de resultados do processo raiz (*vd.* figura 6.22);
2. `MPI_GATHER` — permite que os dados armazenados nos *buffers* de emissão dos vários processos do mesmo grupo sejam recolhidos no *buffer* de recepção do processo raiz;
3. `MPI_ALLREDUCE` — aplica uma operação de redução sobre os dados armazenados em cada um dos *buffers* com operando de redução e armazena o resultado nos *buffers* de resultados de todos os processos do grupo (*vd.* figura 6.23);
4. `MPI_SCAN` — permite que cada processo armazene no seu *buffer* os resultados da operação de redução sobre os seus dados e os de todos os processos do comunicador que possuem uma ordem inferior à sua (*vd.* figura 6.24).

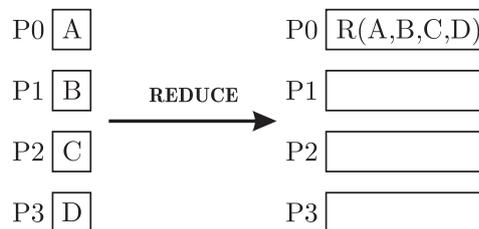


Figura 6.22: Representação esquemática da rotina `MPI_REDUCE` de computação global.

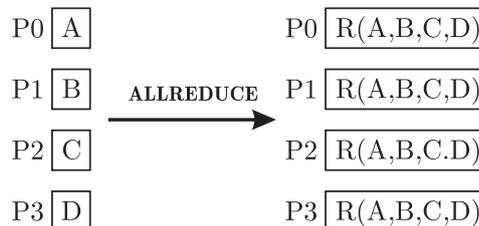


Figura 6.23: Representação esquemática da rotina `MPI_ALLREDUCE` de computação global.

⁷⁰O carácter *V* no final dos comandos alude à natureza variável quer do tamanho quer da localização em memória das mensagens envolvidas na comunicação colectiva de movimentação de dados.

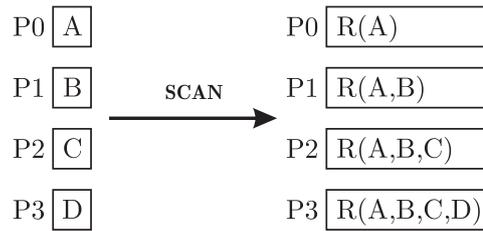


Figura 6.24: Representação esquemática da rotina MPI_SCAN de computação global.

Atenda-se ao facto de nas comunicações colectivas, à excepção da sincronização de tarefas, um processo regressar ao seu modo de execução, assim que a sua participação na rotina de comunicação colectiva finalizar. No entanto, nada obriga a que os restantes processos tenham já completado as respectivas participações. Deste modo, à excepção da rotina MPI_BARRIER, uma comunicação colectiva poderá ter ou não o efeito de sincronização de todos os processos nela envolvidos.

Por fim, refira-se que, por uma questão de não se enquadrarem no âmbito deste trabalho, não foram abordados vários aspectos da interface normalizada para passagem de mensagens MPI, tais como, por exemplo, a gestão dinâmica de processos, o acesso remoto a zonas de memória partilhada, paralelismo em operações de entrada/saída e extensões a operações colectivas. Estes e outros aspectos da interface normalizada para passagem de mensagens MPI pode ser consultada em [Snir *et al.* 1998, Gropp *et al.* 1998].

Capítulo 7

Resolução de Sistemas de Equações Lineares

Referem-se, de um modo sucinto, os principais métodos de resolução numérica de sistemas esparsos de equações lineares associados à computação científica, nomeadamente à análise numérica por elementos finitos. Tecem-se algumas considerações gerais acerca dos métodos directos e dos métodos iterativos. Apresentam-se alguns métodos iterativos estacionários e métodos iterativos não-estacionários. Posteriormente, tecem-se algumas considerações acerca do método do gradiente conjugado e de algumas técnicas de condicionamento. Por fim, apresenta-se o método do gradiente conjugado condicionado.

7.1 Introdução

A análise numérica por elementos finitos de um determinado problema resulta, após se proceder à discretização da equação diferencial considerada, num sistema de equações lineares do tipo

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \tag{7.1}$$

em que a matriz (não-singular) $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é esparsa, *i.e.* constituída por relativamente poucas componentes não-nulas. $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ correspondem aos vectores de incógnitas e de termos independentes¹, respectivamente.

Constata-se que a maior fracção de tempo despendido em computação científica (*e.g.* análise numérica por elementos finitos) corresponde precisamente à resolução de sistemas de equações lineares [van der Vorst 2003]. Assim, a selecção de um método numérico de resolução deste tipo de sistemas deve ser feita de um modo criterioso. Em geral, um sistema esparsa de equações lineares e de grandes dimensões pode ser resolvido com base em uma de duas técnicas distintas: (i) métodos directos e (ii) métodos iterativos [Meurant 1999].

¹Na realidade, em virtude das condições de fronteira impostas no problema, obtêm-se geralmente vectores \mathbf{x} e \mathbf{b} que contêm incógnitas do problema. Todavia, a resolução deste tipo de sistema será oportunamente considerada, sem perda de generalidade, em secções subsequentes.

Os métodos directos baseiam-se na obtenção da solução com base na modificação e combinação das diversas linhas da matriz \mathbf{A} , *i.e.* na factorização da matriz \mathbf{A} . O método de eliminação de Gauss, ou factorização \mathbf{LU} , constitui um exemplo paradigmático do método directo. Outros exemplos de métodos directos consistem nas factorizações \mathbf{QR} e de Cholesky (*vd.*, por exemplo, [Golub e van Loan 1996]). A robustez e a precisão evidenciadas na resolução de sistemas de equações lineares levam a que, ainda nos dias de hoje, este tipo de método seja bastante utilizado no cálculo computacional. No entanto, a aplicação deste tipo de método a matrizes esparsas apresenta a principal desvantagem de requerer a utilização de avultadas capacidades de memória computacional. Isto resulta da alteração do padrão da esparsidade da matriz de coeficientes do sistema. De facto, na aplicação do método de eliminação de Gauss, por exemplo, verifica-se que posições originalmente nulas da matriz \mathbf{A} passam a ser ocupadas por componentes não-nulas. Este fenómeno, designado por enchimento², resulta na transformação de uma matriz originalmente esparsa numa matriz densa.

Os métodos directos apresentam, ainda, um baixo grau de paralelismo, o que limita a escalabilidade em sistemas de computação paralela que recorram a estas técnicas de resolução de sistemas de equações lineares. Além disso, a propagação de erros numéricos nas operações aritméticas pode traduzir-se em problemas de precisão numérica da solução obtida. Mais detalhes sobre métodos directos para matrizes esparsas podem ser consultados, por exemplo, em [Duff *et al.* 1989].

Os métodos iterativos correspondem a técnicas em que se define inicialmente uma aproximação, $\mathbf{x}^{(0)}$, para a solução, \mathbf{x} , do sistema de equações lineares 7.1. Posteriormente, com base num processo iterativo, gera-se uma sucessão de vectores-solução $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}\}$ até que a solução obtida seja suficientemente precisa, *i.e.* suficientemente próxima da solução exacta, \mathbf{x}^* . De um modo geral, um método iterativo diz-se convergente se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*. \quad (7.2)$$

Neste contexto, um processo iterativo corresponde a uma técnica em que, dada a aproximação inicial da solução $\mathbf{x}^{(0)}$, se visa minimizar o erro $\mathbf{e} = \mathbf{x}^* - \mathbf{x}$ ou, de modo equivalente, o resíduo $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ relativos ao sistema 7.1.

Os métodos iterativos são geralmente classificados em (i) métodos estacionários e (ii) métodos não-estacionários. Os métodos não-estacionários distinguem-se dos estacionários no sentido em que os dados utilizados são alterados no decorrer de cada iteração. Embora apresentem um nível de complexidade superior, os métodos não-estacionários revelam-se mais eficientes que os estacionários [Saad 2003].

De um modo geral, as principais vantagens dos métodos iterativos relativamente aos métodos directos são:

1. Os métodos iterativos não exigem a definição explícita da matriz de coeficientes do sistema de equações lineares, pelo que se revelam adequados para paralelização;
2. A possibilidade de introduzir informação prévia no processo iterativo de resolução, por via da aproximação inicial, pode permitir a melhoria do desempenho computacional do processo de resolução;
3. Os métodos iterativos permitem predefinir a precisão com que se pretende obter a solução do problema;
4. Ao contrário dos métodos directos, os métodos iterativos não alteram o padrão da esparsidade da matriz de coeficientes do sistema, pelo que exigem menores quantidades de memória computacional.

No entanto, refira-se que, ao contrário do que ocorre com um método directo, na aplicação de um método iterativo não é possível prever antecipadamente o número de iterações necessárias para se

²Do inglês: *fill-in* (*cf.* [Júdice e Patrício 1996]).

obter uma determinada precisão na solução. Assim, embora ambos os métodos apresentem vantagens e desvantagens intrínsecas, é usualmente a natureza do problema em análise que determina qual o método de resolução mais adequado.

7.2 Métodos Iterativos Estacionários

Num método iterativo estacionário considera-se a decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ da matriz de coeficientes para equação 7.1. Assim, para uma determinada aproximação inicial da solução, $\mathbf{x}^{(0)}$, define-se o termo $k + 1$ da sucessão de vectores-solução, de acordo com

$$\mathbf{M}\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{N}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}. \quad (7.3)$$

Tal como se referiu anteriormente, o carácter estacionário do processo iterativo advém do facto de qualquer iteração seguir a mesma regra (*cf.* equação 7.3), não dependendo as matrizes \mathbf{M} e \mathbf{N} do contador k de iteração. Em seguida, apresentam-se, de forma sucinta, alguns dos principais métodos iterativos estacionários.

7.2.1 Método de Jacobi

No método de Jacobi considera-se a decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{D}_\mathbf{A} + \mathbf{L}_\mathbf{A} + \mathbf{U}_\mathbf{A}$, em que $\mathbf{D}_\mathbf{A} \doteq \text{diag}(\mathbf{A})$. $\mathbf{L}_\mathbf{A}$ e $\mathbf{U}_\mathbf{A}$ correspondem às partes triangulares estritamente inferior e superior de \mathbf{A} , respectivamente. Assumindo a existência de $\mathbf{D}_\mathbf{A}^{-1}$ e considerando $\mathbf{M} = \mathbf{D}_\mathbf{A}$ e $\mathbf{N} = -(\mathbf{L}_\mathbf{A} + \mathbf{U}_\mathbf{A})$ na equação 7.3, obtém-se

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -\mathbf{D}_\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{L}_\mathbf{A} + \mathbf{U}_\mathbf{A})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{D}_\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}. \quad (7.4)$$

Utilizando a notação indicial, a equação 7.4 resulta³, após a manipulação algébrica dos seus termos, em

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n A_{ij}x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, \dots, n. \quad (7.5)$$

Devido ao facto de envolver apenas a inversão da matriz diagonal $\mathbf{D}_\mathbf{A}$, este método é de fácil implementação e exige um esforço computacional mínimo. Além disso, este método é intrinsecamente paralelizável, devido ao facto de as componentes de $\mathbf{x}^{(k+1)}$ dependerem unicamente das de $\mathbf{x}^{(k)}$. O método de Jacobi converge sempre que \mathbf{A} é diagonalmente dominante em sentido estrito⁴. No entanto, esta convergência é geralmente bastante lenta.

Uma generalização do condicionamento de Jacobi consiste na aplicação desta técnica a blocos de matrizes. Neste contexto, considere-se a seguinte partição da matriz \mathbf{A} em $q \times q$ submatrizes mutuamente disjuntas:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1(q-1)} & \mathbf{A}_{1q} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{A}_{2(q-1)} & \mathbf{A}_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{(q-1)1} & \mathbf{A}_{(q-1)2} & \cdots & \mathbf{A}_{(q-1)(q-1)} & \mathbf{A}_{(q-1)q} \\ \mathbf{A}_{q1} & \mathbf{A}_{q2} & \cdots & \mathbf{A}_{q(q-1)} & \mathbf{A}_{qq} \end{bmatrix}. \quad (7.6)$$

³Em conformidade com a bibliografia de referência (*e.g.* [Golub e van Loan 1996, Meurant 1999]), utiliza-se a notação $\sum_{j=1}^{i-1} + \sum_{j=i+1}^n$, $i = 1, \dots, n$ para representar $\sum_{j \neq i}$, $i, j = 1, \dots, n$. Esta notação pressupõe que um termo seja nulo sempre que um dos índices tome valores fora do campo de definição do problema, Assim, se o problema é definido para $j = 1, \dots, n$, então $\sum_{j=1}^0 = \sum_{j=n+1}^n = 0$.

⁴Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é designada diagonalmente dominante em sentido estrito se $\forall i \in \{1, \dots, n\}$, $|A_{ii}| > \sum_{j \neq i} |A_{ij}|$, $j = 1, \dots, n$.

Assumindo a não-singularidade de qualquer submatriz \mathbf{A}_{ii} , a resolução do sistema 7.1 pode ser obtida com base em

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \mathbf{A}_{ii}^{-1} \left[\mathbf{b}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{A}_{ij} \mathbf{x}_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^q \mathbf{A}_{ij} \mathbf{x}_j^{(k)} \right], \quad i = 1, \dots, q. \quad (7.7)$$

\mathbf{x}_i e \mathbf{b}_i correspondem a subvectores de \mathbf{x} e \mathbf{b} , respectivamente, associados à partição de \mathbf{A} . Esta técnica é denominada por método de Jacobi por blocos. Atenda-se ao facto de uma iteração deste método requerer a resolução de q sistemas de equações lineares (*cf.* equação 7.7). A utilização do método iterativo de Jacobi por blocos pode revelar-se útil em situações de cálculo paralelo, nomeadamente quando se procede à decomposição do domínio por vários processadores de um multicomputador.

7.2.2 Método de Gauss-Seidel

Neste método utiliza-se a mesma decomposição de \mathbf{A} que no método de Jacobi. No entanto, consideram-se matrizes $\mathbf{M} = \mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A$ e $\mathbf{N} = -\mathbf{U}_A$. Assumindo que \mathbf{M} é não-singular, obtém-se

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -(\mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A)^{-1} \mathbf{U}_A \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A)^{-1} \mathbf{b}. \quad (7.8)$$

Manipulando algebricamente a equação 7.8 e utilizando a notação indicial, obtém-se

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n A_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, \dots, n. \quad (7.9)$$

Devido ao carácter triangular inferior de $\mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A$ verifica-se que, ao contrário do método de Jacobi (*vd.* equação 7.5), o método de Gauss-Seidel utiliza os valores de $x_i^{(k+1)}$ previamente determinados (*cf.* equação 7.9). Deste modo, este método recorre a valores actualizados das componentes do vector-solução, logo que estes se encontrem disponíveis⁵. Neste contexto, o método de Gauss-Seidel converge pelo menos duas vezes mais rapidamente que o método de Jacobi. No entanto, a utilização dos valores actualizados dificulta a paralelização eficiente deste método. Tal como no método de Jacobi, o método de Gauss-Seidel converge se \mathbf{A} é diagonalmente dominante em sentido estrito.

7.2.3 Método da Sobre-relaxação Sucessiva

O método da sobre-relaxação sucessiva⁶ (SOR) obtém-se pela generalização do método de Gauss-Seidel, recorrendo ao uso de um parâmetro de ponderação $w \in \mathbb{R}^+$. Neste método são utilizadas as matrizes $\mathbf{M} = \frac{1}{w} \mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A$ e $\mathbf{N} = \frac{1-w}{w} \mathbf{D}_A - \mathbf{U}_A$. Assumindo que a inversa da matriz \mathbf{M} existe, obtém-se

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D}_A + w\mathbf{L}_A)^{-1} [(1-w)\mathbf{D}_A - w\mathbf{U}_A] \mathbf{x}^{(k)} + w(\mathbf{D}_A + w\mathbf{L}_A)^{-1} \mathbf{b}. \quad (7.10)$$

Verifica-se que, para $w = 1$, o método SOR degenera no método de Gauss-Seidel. A selecção de um valor óptimo para w permite obter uma velocidade de convergência cerca de uma ordem de grandeza superior à do método de Gauss-Seidel. O método SOR converge se \mathbf{A} é diagonalmente dominante em sentido estrito e $w \in]0, 1]$.

⁵Por esta razão o método de Gauss-Seidel é conhecido por método das substituições sucessivas, enquanto o método de Jacobi é, por vezes, designado por método das substituições simultâneas.

⁶Do inglês: *Successive Over-Relaxation*.

7.2.4 Método da Sobre-relaxação Sucessiva Simétrica

O método da sobre-relaxação sucessiva simétrica⁷ (SSOR) é obtido a partir de duas aplicações sucessivas do método SOR. No entanto, atenda-se ao facto de o segundo varrimento das variáveis ser feito por ordem inversa [Meurant 1999]. Esta técnica resulta numa matriz de iteração, $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$, simétrica. No método SSOR são utilizadas matrizes

$$\mathbf{M} = \frac{w}{2-w} \left(\frac{1}{w} \mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A \right) \mathbf{D}_A^{-1} \left(\frac{1}{w} \mathbf{D}_A + \mathbf{U}_A \right) \quad e \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N} = & \frac{w}{2-w} \left(\frac{1}{w} \mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A \right) \mathbf{D}_A^{-1} \left(\frac{1-w}{w} \mathbf{D}_A - \mathbf{L}_A \right) \\ & \times \left(\frac{1}{w} \mathbf{D}_A + \mathbf{L}_A \right)^{-1} \left(\frac{1-w}{w} \mathbf{D}_A - \mathbf{U}_A \right). \end{aligned} \quad (7.12)$$

Assumindo a não-singularidade da matriz \mathbf{M} , obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(k+1)} = & (\mathbf{D}_A + w\mathbf{U}_A)^{-1} [(1-w)\mathbf{D}_A - w\mathbf{L}_A] (\mathbf{D}_A + w\mathbf{L}_A)^{-1} [(1-w)\mathbf{D}_A - w\mathbf{U}_A] \mathbf{x}^{(k)} \\ & + (2w - w^2) (\mathbf{D}_A + w\mathbf{U}_A)^{-1} \mathbf{D}_A (\mathbf{D}_A + w\mathbf{L}_A)^{-1} \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Tal como o método SOR, o SSOR converge se \mathbf{A} é diagonalmente dominante em sentido estrito e $w \in]0, 1]$. Verifica-se que a taxa de convergência deste método é geralmente inferior à do SOR [Young 1971]. No entanto, este método iterativo revela-se menos sensível ao parâmetro w que o método SOR. Além disso, ao invés do que ocorre para os métodos de Gauss-Seidel e SOR, a simetria associada ao método SSOR permite que este seja utilizado em conjunto com métodos iterativos não-estacionários [Meurant 1999]. Este assunto será abordado, oportunamente, no decorrer do presente trabalho.

7.3 Métodos Iterativos Não-Estacionários

Os métodos iterativos não-estacionários distinguem-se dos estacionários pelo facto de os cálculos associados a cada iteração envolverem informação que se altera com o decorrer do processo. Actualmente, os métodos iterativos não-estacionários mais populares pertencem ao conjunto de métodos baseados em subespaços de Krylov. Estes métodos procuram uma solução aproximada do sistema 7.1 num subespaço de \mathbb{R}^n . Assim, sendo $\mathbf{x}^{(0)}$ uma solução aproximada inicial do sistema 7.1, procura-se uma solução aproximada $\mathbf{x}^{(m)}$ num subespaço afim $\mathbf{x}^{(0)} + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)})$ de dimensão m . $K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)})$ é o subespaço de Krylov gerado por $\{\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^2\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^3\mathbf{r}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{m-1}\mathbf{r}^{(0)}\}$, em que $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$ é o resíduo inicial.

São as características da matriz de coeficientes \mathbf{A} , referente ao sistema de equações lineares 7.1, que determinam a utilização dos diferentes tipos de método iterativo não-estacionário baseado em subespaços de Krylov. Assim, dependendo da matriz \mathbf{A} deverá utilizar-se, de acordo com o ilustrado na figura 7.1, um método iterativo adequado:

1. No caso de \mathbf{A} ser simétrica e definida positiva⁸, o método do gradiente conjugado⁹ (CG) [Hestenes e Stiefel 1952] é o mais indicado. Em cada iteração, este método gera $\mathbf{x}^{(m)} \in \mathbf{x}^{(0)} + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)})$ de modo a minimizar $(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(m)})^T \mathbf{A} (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(m)})$. Esta minimização só existe no caso de \mathbf{A} ser simétrica e definida positiva. O nome deste método deriva do facto de se utilizar uma sequência de vectores conjugados (*i.e.* ortogonais) que correspondem aos resíduos das iterações efectuadas. Estes resíduos correspondem ao gradientes de uma função quadrática, cuja minimização equivale à resolução do sistema 7.1;

⁷Do inglês: *Symmetric Successive Over-Relaxation*.

⁸Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diz-se definida positiva se $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$.

⁹Do inglês: *Conjugate Gradient*. No entanto, refira-se que originalmente o nome deste método era *Conjugate Gradients* (*cf.* [Hestenes e Stiefel 1952]).

2. Sendo \mathbf{A} simétrica e indefinida deve utilizar-se o método do resíduo mínimo¹⁰ (MINRES) ou alternativamente o método de LQ simétrico¹¹ (SYMMLQ) [Paige e Saunders 1975]. No método MINRES procede-se à minimização da norma euclidiana dos resíduos. Pelo contrário, no método SYMMLQ, os resíduos são apenas mantidos ortogonais, não havendo lugar a qualquer processo de minimização;
3. No caso de \mathbf{A} não ser simétrica, deve utilizar-se o método do resíduo mínimo generalizado¹² (GMRES) [Saad e Schultz 1986] ou, alternativamente, o método do gradiente biconjugado estabilizado¹³ (Bi-CGSTAB) [van der Vorst 1992]. Os métodos GMRES e Bi-CGSTAB consistem em generalizações para sistemas não-simétricos dos métodos MINRES e CG, respectivamente.

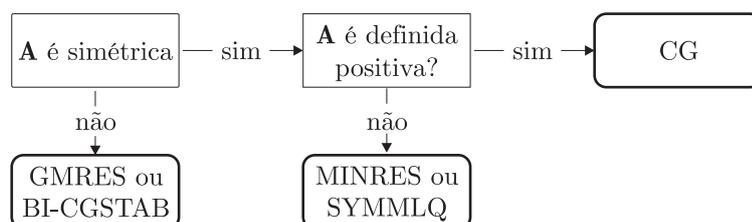


Figura 7.1: Representação dos critérios genéricos de selecção dos principais métodos iterativos não-estacionários.

Uma descrição detalhada dos métodos referidos e de muitos outros pode ser consultada, por exemplo, em [Barrett *et al.* 1994] e [Saad e van der Vorst 2000]. Na secção seguinte aborda-se, em detalhe, o método CG — o método iterativo utilizado neste trabalho.

7.4 Método do Gradiente Conjugado

O método do gradiente conjugado é considerado, nos dias de hoje, uma das técnicas mais eficientes para a resolução de sistemas de equações lineares com matrizes de coeficientes simétricas e definidas positivas [Golub e O’Leary 1989].

Logo após o seu desenvolvimento nos anos 50 [Hestenes e Stiefel 1952], o método do gradiente conjugado foi considerado um método directo. Isto deve-se ao facto de este método permitir obter, em termos de aritmética exacta, a solução de um sistema de n equações lineares num máximo de n iterações¹⁴. No entanto, rapidamente se constatou que os erros provenientes do arredondamento numérico destruíam a propriedade de convergência finita deste método, pelo que este não constituía uma alternativa eficiente para a factorização de sistemas densos de equações lineares. Neste contexto, o método CG não mereceu grande atenção por parte da comunidade científica, até que, nos anos 70, as suas capacidades como método iterativo foram evidenciadas¹⁵ por Reid [Reid 1971]. Apesar disso, o método CG continuou a ser considerado como incapaz de suplantar a velocidade de cálculo dos métodos directos [Irons e Ahmad 1980]. No entanto, o método CG tem vindo a demonstrar a sua competitividade face aos métodos directos [Farhat e Wilson 1987]. Umas

¹⁰Do inglês: *Minimal Residual*.

¹¹Do inglês: *Symmetric LQ*.

¹²Do inglês: *Generalised Minimal Residual*.

¹³Do inglês: *Bi-Conjugate Gradient Stabilized*.

¹⁴De um modo mais preciso, o método do gradiente conjugado permite determinar, em termos de precisão infinita, a solução num número finito e predeterminado de operações.

¹⁵Na realidade, as mesmas observações já tinham sido publicadas cerca de uma década antes [Engeli *et al.* 1959]. No entanto, parecem ter passado despercebidas à comunidade científica.

das razões para esta competitividade deve-se à utilização de preconditionadores¹⁶. Na realidade, verifica-se que a velocidade de convergência do método CG é altamente dependente do condicionamento do sistema de equações lineares [Barrett *et al.* 1994]. Assim, a utilização de técnicas de preconditionamento de um sistema de equações lineares permite obter velocidades de cálculo superiores às dos métodos directos [Saint-Georges *et al.* 1996]. No entanto, ao contrário do que se passa com os métodos directos, o uso conveniente dos métodos iterativos exige, por parte do utilizador, um conhecimento relativamente profundo das várias técnicas de preconditionamento, aliado a alguma experiência.

A utilização do método CG não obriga ao armazenamento das componentes nulas da matriz \mathbf{A} (esparsa). Além disso, a simetria desta matriz possibilita ainda o não-armazenamento de uma das suas partes triangulares (estritamente) superior ou inferior. Por outro lado, a natureza intrinsecamente paralelizável do método CG, em particular, e de grande parte dos métodos iterativos, em geral, constitui também uma vantagem relevante deste método em relação aos métodos directos.

De acordo com o que foi referido na Secção 7.3, a resolução do sistema de equações 7.1 com o método do gradiente conjugado baseia-se na técnica de projecção ortogonal num subespaço afim $\mathbf{x}^{(0)} + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)})$. Para uma matriz \mathbf{A} simétrica e definida positiva, esta técnica corresponde [Axelsson 1996] à minimização da função quadrática

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - \mathbf{Ax})^T \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}). \quad (7.14)$$

Em cada iteração, o método do gradiente conjugado procura minimizar φ ao longo do vector $\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)}$, em que $\mathbf{x}^{(k)}$ é a solução aproximada actual e α_{k+1} um escalar que actua segundo a direcção de busca $\mathbf{p}^{(k+1)}$, isto é,

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)}. \quad (7.15)$$

Substituindo a expressão 7.15 na equação 7.14, derivando esta última em ordem a α_{k+1} e aplicando a condição de estacionariedade, obtém-se¹⁷

$$\alpha_{k+1} = \frac{\mathbf{p}^{(k+1)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{p}^{(k+1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}}, \quad (7.16)$$

em que $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^{(k)}$ é o resíduo actual. Por outro lado, de acordo com a equação 7.15, o novo resíduo consiste em

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}. \quad (7.17)$$

Multiplicando ambos os termos da equação 7.17 por $\mathbf{p}^{(k+1)T}$ e substituindo nesta a equação 7.16, obtém-se

$$\mathbf{p}^{(k+1)T} \mathbf{r}^{(k+1)} = 0. \quad (7.18)$$

Assumindo que as direcções de busca são conjugadas¹⁸ relativamente a \mathbf{A} , tem-se para duas direcções consecutivas que

$$\mathbf{p}^{(k+1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k)} = 0. \quad (7.19)$$

A direcção de procura $\mathbf{p}^{(k+1)}$ é definida recursivamente por

$$\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} + \beta_k \mathbf{p}^{(k)}, \quad (7.20)$$

¹⁶As técnicas de preconditionamento e a sua aplicação ao método do gradiente conjugado serão abordadas com maior detalhe em secções subsequentes.

¹⁷Atenda-se ao facto de, por uma questão de simplificação da notação utilizada e sem perda de generalidade, se omitirem os parêntesis externos na representação do vector transposto de um vector com índice superior de iteração, *e.g.* utiliza-se $\mathbf{p}^{(k+1)T}$ para representar $[\mathbf{p}^{(k+1)}]^T$.

¹⁸Os vectores \mathbf{x} e $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ dizem-se conjugados relativamente à matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e definida positiva se são ortogonais em relação ao produto interno $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{\mathbf{A}} \doteq \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y}$.

em que β_k é um escalar. Multiplicando ambos os termos da equação 7.20 por $\mathbf{r}^{(k)\text{T}}$, atendendo à equação 7.18 e substituindo na equação 7.16, vem

$$\alpha_{k+1} = \frac{\mathbf{r}^{(k)\text{T}}\mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{p}^{(k+1)\text{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}^{(k+1)}}. \quad (7.21)$$

Resta proceder à determinação do parâmetro β_k . Assim, transpondo a equação 7.20 e substituindo na equação 7.19, obtém-se

$$\beta_k = -\frac{\mathbf{r}^{(k)\text{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}^{(k)}}{\mathbf{p}^{(k)\text{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}^{(k)}}. \quad (7.22)$$

Multiplicando a equação 7.17 por $\mathbf{p}^{(k)\text{T}}$ e atendendo às equações 7.18 e 7.19, tem-se que

$$\mathbf{p}^{(k)\text{T}}\mathbf{r}^{(k+1)} = 0. \quad (7.23)$$

Por outro lado, multiplicando a equação 7.20 por $\mathbf{r}^{(k+1)\text{T}}$ e atendendo às equações 7.18 e 7.23, obtém-se

$$\mathbf{r}^{(k+1)\text{T}}\mathbf{r}^{(k)} = 0. \quad (7.24)$$

Assim, a substituição das equações 7.17, 7.21 e 7.24 na equação 7.22 resulta em

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}^{(k)\text{T}}\mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{r}^{(k-1)\text{T}}\mathbf{r}^{(k-1)}}. \quad (7.25)$$

As equações anteriores definem o método do gradiente conjugado¹⁹. O seu algoritmo encontra-se ilustrado na tabela 7.1. $N_{\text{máx}}$ corresponde ao número máximo de iterações admissível.

Tabela 7.1: Algoritmo do método do gradiente conjugado.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Definir $\mathbf{x}^{(0)}$ 2. $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$ 3. REPETIR — Ciclo iterativo em $k = 0, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 3.1 SE $k = 0$, ENTÃO $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)}$ SENÃO $\beta_k = (\mathbf{r}^{(k)\text{T}}\mathbf{r}^{(k)}) / (\mathbf{r}^{(k-1)\text{T}}\mathbf{r}^{(k-1)})$ $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} + \beta_k\mathbf{p}^{(k)}$ FIM SE 3.2 $\alpha_{k+1} = (\mathbf{r}^{(k)\text{T}}\mathbf{r}^{(k)}) / (\mathbf{p}^{(k+1)\text{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}^{(k+1)})$ 3.3 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1}\mathbf{p}^{(k+1)}$ 3.4 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1}\mathbf{A}\mathbf{p}^{(k+1)}$ ATÉ convergência ou $k + 1 = N_{\text{máx}}$

Embora seja difícil prever exactamente a taxa de convergência do método CG, é possível obter um limite superior para a norma do erro associada a cada iteração k . Este limite encontra-se

¹⁹Uma apresentação intuitiva e baseada em ilustrações geométricas do método do gradiente conjugado pode ser consultada em [Shewchuk 1994].

relacionado com o número de condição espectral²⁰ da matriz \mathbf{A} , $\kappa(\mathbf{A})$. De facto, considerando a norma- \mathbf{A}^{21} , a taxa de convergência pode ser avaliada [Ortega 1988] com base na expressão

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{A}} \leq 2 \left[\frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} + 1} \right]^k \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{A}}. \quad (7.26)$$

Assim, de acordo com a expressão 7.26, verifica-se que a norma- \mathbf{A} do erro $e^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*$ tende para zero quando $k \rightarrow +\infty$. Deste modo, a sequência da norma- \mathbf{A} do erro decresce monotonamente para 0. Este facto justifica a natureza iterativa do método do gradiente conjugado [Meurant 1999]. Além disso, constata-se que quanto mais próximo for $\kappa(\mathbf{A})$ de 1 maior será a taxa de convergência do processo iterativo²². Neste contexto, o precondicionamento consiste na obtenção de um sistema equivalente ao da expressão 7.1 em que a nova matriz de coeficientes possui um número de condição espectral mais próximo da unidade. Deste modo, esta técnica permite a obtenção da solução com uma taxa de convergência mais elevada.

Em seguida, abordam-se os principais aspectos relativos à técnica de precondicionamento e referem-se alguns precondicionadores usualmente aplicados ao método do gradiente conjugado.

7.5 Técnicas de Precondicionamento

De acordo com o que foi anteriormente referido, o precondicionamento²³ do sistema 7.1 consiste na sua transformação linear de modo a que o novo número de condição espectral resulte menor. Em particular, a aplicação desta técnica ao método do gradiente conjugado permite aumentar quer a sua eficiência quer a sua robustez. Neste contexto, sendo \mathbf{P} não-singular, pode substituir-se o sistema original da expressão 7.1 por

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}. \quad (7.27)$$

Constata-se que $\mathbf{P} = \mathbf{A}$ é o precondicionador ao qual corresponde a taxa de convergência máxima. De facto, neste caso resulta que $\kappa(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}) = 1$. No entanto, a determinação de \mathbf{P}^{-1} corresponde à resolução do sistema 7.1, pelo que esta situação não apresenta qualquer vantagem em relação à resolução directa do problema original. No entanto, infere-se que a matriz \mathbf{P} deverá aproximar²⁴ numericamente a matriz \mathbf{A} . A equação 7.27 corresponde ao denominado precondicionamento à esquerda. Pelo contrário, o precondicionamento à direita baseia-se na resolução do sistema

$$\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{b}, \quad (7.28)$$

em que

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{y}. \quad (7.29)$$

²⁰O número de condição espectral, κ , de uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e definida positiva corresponde à relação entres os valores próprios máximo, λ_{\max} , e mínimo, λ_{\min} , de \mathbf{A} , *i.e.* $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A})}$.

²¹Define-se a norma de um vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ em relação à matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e definida positiva como $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{A}} \doteq (\mathbf{x}, \mathbf{x})_{\mathbf{A}}^{1/2}$, *i.e.* $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{A}} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}$.

²²Embora neste trabalho se proceda à caracterização da taxa de convergência com base no número de condição espectral, deve referir-se que a distribuição espectral dos valores próprios de \mathbf{A} também influencia a taxa de convergência do método CG [Meurant 1999].

²³A técnica de precondicionamento foi introduzida em 1956 por Hestenes [Hestenes 1956]. No entanto, foi apenas nos anos 70 que a sua aplicação ao método do gradiente conjugado revelou o seu potencial [Ortega 1988]. Curiosamente, o termo precondicionamento parece ter sido utilizado pela primeira vez por Turing em 1948 numa publicação relacionada com erros de arredondamento em métodos directos [Turing 1948].

²⁴Neste caso, o precondicionador diz-se implícito. Se, pelo contrário, o precondicionador aproxima directamente a matriz \mathbf{A}^{-1} , então diz-se explícito (*e.g.* precondicionadores polinomiais). Neste trabalho apenas se consideram os precondicionadores implícitos, visto a maioria dos precondicionadores serem deste tipo [Barrett *et al.* 1994]. Uma abordagem detalhada dos precondicionadores explícitos pode ser consultada, por exemplo, em [Axelsson 1996, Meurant 1999].

Nesta situação mantém-se válido o raciocínio efectuado para o preconditionamento à esquerda.

Relativamente às propriedades que a matriz de preconditionamento \mathbf{P} deverá apresentar, refira-se que, no caso de a matriz \mathbf{A} ser simétrica e definida positiva, aquela deverá [Meurant 1999]:

1. Ser simétrica e definida positiva;
2. Ter uma esparsidade semelhante à da matriz \mathbf{A} ;
3. Ser de fácil construção;
4. Ser tal que o sistema $\mathbf{P}\mathbf{c} = \mathbf{d}$, com \mathbf{c} e $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, seja de fácil resolução;
5. Ser tal que $\kappa(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A})$ seja menor que $\kappa(\mathbf{A})$.

Em geral, a verificação simultânea de todas estas condições gera incompatibilidades, pelo que é difícil obter um preconditionador globalmente eficiente. Assim, a selecção adequada de um preconditionador deve ter em conta factores tais como, por exemplo, a dimensão do problema numérico, o padrão de esparsidade de \mathbf{A} , *etc.* No entanto, no caso de a matriz \mathbf{A} ser esparsa, simétrica e definida positiva as duas primeiras condições têm que ser necessariamente verificadas. Assim, dos métodos estacionários anteriormente referidos (*vd.* Secção 7.2), apenas os métodos de Jacobi e SSOR podem ser utilizados como preconditionadores de sistemas com matriz de coeficientes simétrica e definida positiva [Langtangen 2003]. De facto, a não-simetria das matrizes de preconditionamento associadas aos métodos de Gauss-Seidel e SOR inviabiliza a sua utilização no método do gradiente conjugado²⁵.

Uma estudo bastante detalhado dos preconditionadores utilizados em sistemas lineares de grandes dimensões pode ser consultado em [Benzi 2002].

7.5.1 Precondicionador de Jacobi

No preconditionamento de Jacobi, a matriz \mathbf{A} é aproximada pela sua diagonal, $\mathbf{D}_\mathbf{A}$. Assim, a matriz de preconditionamento, \mathbf{P} , corresponde a

$$P_{ij} = \begin{cases} A_{ij} & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} . \quad (7.30)$$

De acordo com o exposto na Secção 7.2.1, o preconditionamento de Jacobi corresponde a considerar $\mathbf{P} = \mathbf{M}$. Apesar da simplicidade associada a este preconditionador, a sua utilização pode revelar-se eficaz [Pool *et al.* 1992].

O preconditionador de Jacobi corresponde, de modo geral, ao preconditionador diagonal que melhor condiciona o sistema 7.1 [van der Sluis 1969]. Devido ao facto de poder ser constituído directamente a partir da matriz de coeficientes \mathbf{A} , este preconditionador é de fácil implementação. Além disso, apresenta também a vantagem de requerer muito pouca memória de armazenamento. Assim, de acordo com as características requeridas para um preconditionador (*cf.* Secção 7.5), constata-se que, à excepção da esparsidade, o preconditionador de Jacobi verifica as restantes condições.

O preconditionador de Jacobi por blocos associado à partição da matriz \mathbf{A} indicada na expressão 7.6 é constituído unicamente pelos seus blocos da diagonal. Os restantes blocos correspondem a

²⁵Na realidade, os métodos de Gauss-Seidel e SOR nunca são utilizados como preconditionadores [Barrett *et al.* 1994].

matrizes nulas. Assim, a matriz \mathbf{P} é definida por

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{A}_{(q-1)(q-1)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{A}_{qq} \end{bmatrix}. \quad (7.31)$$

A principal diferença entre as técnicas de preconditionamento simples e por blocos de Jacobi consiste no facto de esta última exigir a inversão de matrizes e não de escalares.

7.5.2 Precondicionador SSOR

O preconditionador de sobre-relaxação sucessiva simétrica [Evans 1968] corresponde, de acordo com o exposto na Secção 7.2.4, a considerar $\mathbf{P} = \mathbf{M}$. Sendo a matriz \mathbf{A} simétrica, tem-se que $\mathbf{U}_{\mathbf{A}} = \mathbf{L}_{\mathbf{A}}^T$, pelo que o preconditionador SSOR também é simétrico. Assim, tem-se

$$\mathbf{P} = \frac{w}{2-w} \left(\frac{1}{w} \mathbf{D}_{\mathbf{A}} + \mathbf{L}_{\mathbf{A}} \right) \mathbf{D}_{\mathbf{A}}^{-1} \left(\frac{1}{w} \mathbf{D}_{\mathbf{A}} + \mathbf{L}_{\mathbf{A}}^T \right), \quad (7.32)$$

em que $w \in]0, 2[$. Tal como o preconditionador de Jacobi, o preconditionador SSOR requer muito pouca memória de armazenamento e pode ser constituído directamente a partir da matriz de coeficientes, \mathbf{A} .

7.5.3 Factorizações Incompletas de Cholesky

A factorização (completa) de Cholesky consiste numa variante simplificada da factorização \mathbf{LU} . Na realidade, este método directo consiste numa modificação da técnica de eliminação de Gauss para matrizes simétricas e definidas positivas. Neste contexto, a factorização de Cholesky de uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e definida positiva corresponde à decomposição

$$\mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{G}^T, \quad (7.33)$$

em que $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz triangular inferior, denominada factor de Cholesky. Demonstra-se a existência da decomposição indicada na expressão 7.33 para qualquer matriz que seja simétrica e definida positiva [Golub e van Loan 1996]. Esta decomposição permite a resolução do sistema de equações lineares 7.1 através da resolução consecutiva dos sistemas triangulares

$$\mathbf{G}\mathbf{y} = \mathbf{b} \quad e \quad (7.34)$$

$$\mathbf{G}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}, \quad (7.35)$$

em que $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$. Verifica-se que a factorização de Cholesky de uma matriz \mathbf{A} esparsa resulta, de um modo geral, numa matriz \mathbf{G} consideravelmente menos esparsa que a matriz original. Este facto deve-se ao efeito de enchimento, *i.e.* a criação de elementos não-nulos em posições associadas a componentes inicialmente nulas da matriz \mathbf{A} . Assim, a factorização de Cholesky de matrizes esparsas de grandes dimensões requer um dispêndio de quantidades significativas de tempo de cálculo e de memória computacional. Neste contexto, é geralmente adoptada a decomposição

$$\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T + \mathbf{B}, \quad (7.36)$$

em que a matriz triangular inferior \mathbf{C} apresenta uma esparsidade superior à de \mathbf{G} . A matriz de erro, $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$, corresponde a um corrector da factorização resultante do aumento de esparsidade

de \mathbf{C} relativamente a \mathbf{G} . A decomposição indicada na expressão 7.36 define uma factorização incompleta de Cholesky (IC) correspondente a

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{C}\mathbf{C}^T. \quad (7.37)$$

Em termos de precondicionamento, a aproximação da matriz \mathbf{A} decorrente da sua factorização incompleta de Cholesky pode ser utilizada como precondicionador, \mathbf{P} (*cf.* equação 7.27). A matriz \mathbf{C} pode ser definida de diversos modos. O mais simples consiste em obter a matriz \mathbf{C} e anular posteriormente as componentes de \mathbf{L} que correspondam, em termos de posição, a componentes nulas na matriz \mathbf{A} . Todavia, esta técnica não se revela eficiente, visto requerer que se proceda a uma factorização completa da matriz original. Um modo mais expedito consiste em não permitir que durante o processo de factorização ocorra o fenómeno de enchimento. Este processo é designado por factorização incompleta de nível 0, *i.e.* IC(0). Na tabela 7.2 encontra-se ilustrado o algoritmo²⁶ da factorização incompleta de Cholesky (nível 0) associada à decomposição $\mathbf{C}\mathbf{C}^T$.

Tabela 7.2: Algoritmo da factorização $\mathbf{C}\mathbf{C}^T$ incompleta de Cholesky.

<pre> 1. Início Factorização $\mathbf{C}\mathbf{C}^T$ 1.1 $C_{11} = \sqrt{A_{11}}$ 2. Ciclo em $i = 2, \dots, n$ 2.1 Ciclo em $j = 1, \dots, i - 1$ 2.1.1 SE $A_{ij} = 0$, ENTÃO $C_{ij} = 0$ SENÃO SE $j = 1$, ENTÃO $C_{ij} = \frac{A_{ij}}{C_{jj}}$ SENÃO $C_{ij} = \frac{1}{C_{jj}} \left[A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} C_{ik}C_{jk} \right]$ FIM SE FIM SE Fim Ciclo em j 2.2 Determinar $C_{ii} = \sqrt{A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} C_{ik}^2}$ 3. Fim Ciclo em i 4. Fim Factorização $\mathbf{C}\mathbf{C}^T$ </pre>
--

De acordo com a tabela 7.2, o algoritmo da factorização IC(0) associada à decomposição $\mathbf{C}\mathbf{C}^T$ envolve o cálculo de raízes quadradas. Este tipo de operação é computacionalmente mais moroso que o associado a adições e multiplicações, pelo que deve ser evitado sempre que seja possível [Meurant 1999]. Neste contexto, esta decomposição é usualmente substituída pela decomposição \mathbf{LDL}^T , em que \mathbf{L} e \mathbf{D} são matrizes triangular inferior e diagonal, respectivamente. Esta decomposição apresenta ainda a vantagem de a existência de um radicando negativo associado a uma componente da diagonal de \mathbf{C} (*cf.* tabela 7.2) não impossibilitar o prosseguimento do algoritmo de factorização [Ortega 1988]. O algoritmo da factorização incompleta de Cholesky (nível 0) associada à decomposição \mathbf{LDL}^T encontra-se ilustrado na tabela 7.3.

²⁶Na realidade, existem seis algoritmos distintos da factorização incompleta de Cholesky. Este facto advém da possibilidade de permutar os índices i, j e k (*vd.* tabela 7.2) de seis modos distintos [Ortega 1988, Meurant 1999].

Tabela 7.3: Algoritmo da factorização \mathbf{LDL}^T incompleta de Cholesky.

```

1. Início Factorização  $\mathbf{LDL}^T$ 
  1.1  $D_{11} = A_{11}$ 
2. Ciclo em  $i = 2, \dots, n$ 
  2.1 Ciclo em  $j = 1, \dots, i - 1$ 
    2.1.1 SE  $A_{ij} = 0$ , ENTÃO
       $L_{ij} = 0$ 
    SENÃO
      SE  $j = 1$ , ENTÃO
         $L_{ij} = \frac{A_{ij}}{D_{jj}}$ 
      SENÃO
         $L_{ij} = \frac{1}{D_{jj}} \left[ A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} D_{kk} L_{jk} \right]$ 
      FIM SE
    FIM SE
  Fim Ciclo em  $j$ 
  2.2 Determinar  $D_{ii} = A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}^2 D_{kk}$ 
3. Fim Ciclo em  $i$ 
4. Fim Factorização  $\mathbf{LDL}^T$ 

```

O preconditionamento baseado na factorização incompleta de Cholesky de nível 0 associada às decomposições \mathbf{GG}^T e \mathbf{LDL}^T corresponde a considerar $\mathbf{P} = \mathbf{GG}^T$ e $\mathbf{P} = \mathbf{LDL}^T$, respectivamente.

Apesar da sua simplicidade, a factorização incompleta de Cholesky de nível 0 permite uma redução substancial do esforço computacional e da memória necessária para a factorização de sistemas esparsos de grandes dimensões [Benzi 2002]. Além disso, possibilita ainda a obtenção expedita de matrizes de preconditionamento com uma certa qualidade [Galiana *et al.* 1994]. De um modo geral, a aproximação obtida por via da factorização incompleta de Cholesky pode ser melhorada no caso de se permitir a ocorrência de enchimento. A situação mais simples consiste em permitir que este fenómeno se verifique para as entradas que envolvam apenas componentes originalmente associadas à matriz \mathbf{A} . Deste modo, restringe-se a ocorrência de enchimento baseado em entradas que tenham já sido por ele previamente geradas. Este processo é designado por factorização incompleta de nível 1, *i.e.* factorização IC(1). Esta técnica pode ser alargada a níveis superiores de enchimento. A consideração de níveis cada vez mais elevados de enchimento resulta numa factorização incompleta cada vez mais próxima da factorização completa de Cholesky, *i.e.* a matriz de erro $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{0}$ (*cf.* equação 7.36). Todavia, a utilização de níveis de enchimento superiores traduz-se, tal como já se referiu, num aumento do esforço computacional e da memória necessária para a factorização incompleta de Cholesky. Verifica-se que a utilização de factorizações incompletas de nível superior se traduz, geralmente, num custo computacional que não se revela compensador para o processo iterativo de resolução de um sistema de equações lineares preconditionado [Benzi 2002].

Por fim, refira-se que, ao contrário do que ocorre com a factorização completa de Cholesky, uma factorização incompleta de Cholesky de uma matriz simétrica e definida positiva pode não existir. Na realidade, para que isso se verifique basta que um dos coeficientes C_{ii} , para a decomposição \mathbf{GG}^T , ou D_{ii} , para a decomposição \mathbf{LDL}^T , seja nulo, com $i = 2, \dots, n - 1$. No entanto, Meijerink e van der Vorst demonstraram a existência de uma factorização incompleta de Cholesky quando \mathbf{A}

corresponde a uma matriz-M²⁷ [Meijerink e van der Vorst 1977]. Este resultado foi posteriormente generalizado por diversos investigadores, para a classe das matrizes-H²⁸ com componentes positivas da diagonal [Manteuffel 1980, Varga *et al.* 1980, Robert 1982]. Uma exposição mais detalhada dos diversos tipos de factorização incompleta de Cholesky, das suas características e peculiaridades pode ser consultada, por exemplo, em [Benzi 2002, Ortega 1988, Manteuffel 1980, Varga *et al.* 1980].

7.6 Método do Gradiente Conjugado Precondicionado

De acordo com o que foi referido na Secção 7.5, a utilização de uma matriz de preconditionamento \mathbf{P} não-singular permite a substituição do sistema 7.1 pelo sistema 7.27. No caso de \mathbf{P} ser simétrica e definida positiva, o facto de a matriz $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}$ ser também simétrica e definida positiva relativamente ao produto interno $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{\mathbf{P}} \doteq \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{y}$ permite que o método do gradiente conjugado possa ser directamente aplicado ao sistema de equações lineares 7.27. Neste contexto, procedendo à substituição do produto interno (euclidiano) associado ao método do gradiente conjugado (*vd.* tabela 7.1) pelo produto interno $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{\mathbf{P}}$ e definindo

$$\mathbf{z} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{r}, \quad (7.38)$$

obtém-se o método do gradiente conjugado preconditionado, cujo algoritmo se encontra ilustrado²⁹ na tabela 7.4. Assim, em termos práticos, o preconditionamento do método do gradiente conjugado exige que se proceda adicionalmente à determinação do resíduo preconditionado \mathbf{z} (*cf.* relação 7.38).

Tabela 7.4: Algoritmo do método do gradiente conjugado preconditionado.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Definir $\mathbf{x}^{(0)}$ 2. $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$ 3. REPETIR — Ciclo iterativo em $k = 0, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 3.1 Resolver $\mathbf{P}\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)}$ 3.2 SE $k = 0$, ENTÃO <ol style="list-style-type: none"> $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)}$ SENÃO <ol style="list-style-type: none"> $\beta_k = (\mathbf{z}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}) / (\mathbf{z}^{(k-1)T} \mathbf{r}^{(k-1)})$ $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)} + \beta_k \mathbf{p}^{(k)}$ FIM SE 3.3 $\alpha_{k+1} = (\mathbf{z}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}) / (\mathbf{p}^{(k+1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)})$ 3.4 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)}$ 3.5 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}$ ATÉ convergência ou $k + 1 = N_{\text{máx}}$
--

²⁷A matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ não-singular diz-se uma matriz-M (não-singular) se $A_{ij} \leq 0$ para $i \neq j$ e $B_{ij} \geq 0$, para $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $i, j \in \{1, \dots, n\}$ [Axelsson 1996].

²⁸A matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diz-se uma matriz-H se $\tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida por $|A_{ij}|$ se $i \neq j$ e $-|A_{ij}|$ se $i = j$ é uma matriz-M, para $i, j \in \{1, \dots, n\}$ [Axelsson 1996].

²⁹De acordo com o referido na Secção 7.4, por uma questão de simplificação da notação utilizada e sem perda de generalidade, omitem-se os parêntesis externos na representação do vector transposto de um vector com índice superior de iteração.

Capítulo 8

O Programa COMMA3D

Referem-se algumas das principais características do programa desenvolvido no decurso deste trabalho. Apresentam-se os tipos de elemento finito implementados. Descrevem-se sumariamente a interface gráfica de modelação geométrica utilizada e as ferramentas que permitem proceder quer à geração de células representativas unitárias quer à atribuição de condições de fronteira de periodicidade. Abordam-se algumas das questões relacionadas com o esquema de armazenamento matricial utilizado e com a aplicação de condições de fronteira de periodicidade e de valor prescrito. São referidos alguns aspectos relativos à resolução do sistema de equações lineares. Por fim, abordam-se questões relativas à implementação numérica do método de homogeneização por expansão assintótica e apresenta-se o algoritmo global de cálculo numérico em termoelasticidade linear, considerando o procedimento de homogeneização por expansão assintótica.

8.1 Introdução

O programa COMMA3D¹ é um programa de simulação numérica baseado no método dos elementos finitos. Este programa, desenvolvido em Fortran 90, constitui a base de uma plataforma de modelação numérica do comportamento termomecânico de materiais compósitos. Nas secções que se seguem, exploram-se os seus procedimentos mais importantes, dando-se ênfase especial aos aspectos relacionados com o funcionamento e a implementação do procedimento de homogeneização por expansão assintótica em termoelasticidade linear.

8.2 Elementos Finitos Implementados

A modelação numérica por elementos finitos envolve os processos de discretização espacial (*vd.* Secção 2.4) ou de semidiscretização espacial (*vd.* Secções 3.4 e 4.3.3), em que um corpo sólido é dis-

¹COMMA3D: acrónimo de *COM*posite *M*aterial *A*nalysers — *3-Dimensional*.

cretizado em elementos definidos por um conjunto de nós. No programa desenvolvido no presente trabalho foram implementados os seguintes elementos finitos isoparamétricos:

1. Tetraedro linear — elemento tetraédrico com 4 nós, funções de interpolação trilineares e 1 só ponto de integração (*vd.* figura 8.1a);
2. Tetraedro quadrático — elemento tetraédrico com 10 nós, funções de interpolação triquadráticas e 4 pontos de Gauss para integração completa (*vd.* figura 8.1b);
3. Hexaedro linear — elemento hexaédrico com 8 nós, funções de interpolação trilineares e 8 pontos de Gauss para integração completa (*vd.* figura 8.1c);
4. Hexaedro quadrático — elemento hexaédrico com 20 nós, funções de interpolação triquadráticas (elemento serendipítico²) e 27 pontos de Gauss para integração completa (*vd.* figura 8.1d).

Uma descrição detalhada dos principais aspectos relacionados com estes tipos de elemento finito pode ser consultada, por exemplo, em [Zienkiewicz e Taylor 1997, Oñate 1995].

A utilização do método de integração completa a problemas discretizados com elementos hexaédricos com 8 nós e funções de interpolação trilineares leva, muitas vezes, a fenómenos de rigidez excessiva³ (*vd.* [Olovsson *et al.* 2006]). Neste contexto, procedeu-se à implementação do método de integração reduzida selectiva $\bar{\mathbf{B}}$, utilizando a formulação da dilatação média para a determinação da componente hidrostática da matriz $\bar{\mathbf{B}}$ [Nagtegaal *et al.* 1974, Hughes 1980, Hughes 1987].

8.3 Pré- e Pós-Processamento

8.3.1 O Programa GiD

As tarefas de pré- e pós-processamento realizam-se com base na utilização do programa GiD. Este programa é uma interface gráfica de modelação geométrica, com várias características que o tornam útil nas fases de pré- e pós-processamento de problemas de simulação numérica. Para além de procedimentos de geração de malha com diversos tipos de elementos, de controlo de malha (estruturada ou não-estruturada) e de vários protocolos para importação de geometrias, o programa GiD fornece ao utilizador amplas possibilidades de configuração. Para a utilização do programa GiD como pré-processor é necessário predefinir toda a informação pedida ao utilizador, bem como o modo como os dados são fornecidos ao programa de simulação. As definições são distribuídas por ficheiros de configuração do programa GiD, em que se encontram descritos os dados gerais de definição do problema, as propriedades dos materiais, as condições de fronteira e o formato do ficheiro de entrada do programa de simulação. O conjunto das configurações de personalização é denominado problema-tipo do GiD. Com as alterações efectuadas, o processador gráfico funciona como interface gráfica para o programa COMMA3D. Para além da criação das geometrias, podem gerar-se malhas de elementos finitos, impor condições de fronteira, atribuir propriedades de materiais e especificar outros parâmetros de cálculo, sendo gerados ficheiros de dados com formatos previamente estabelecidos, que são lidos directamente pelo programa de cálculo. Por outro lado, em termos de pós-processamento, o programa COMMA3D fornece ficheiros de resultados com o formato de leitura predefinido no programa GiD.

8.3.2 O Programa SPHERECELL

A modelação numérica de células representativas unitárias de materiais compósitos com geometrias complexas exige um controlo rigoroso de alguns parâmetros geométricos, tais como, por exemplo,

²O adjectivo serendipítico deriva da palavra anglo-saxónica *serendipity*, que teve a sua origem numa carta escrita pelo escritor inglês Horace Walpole, em 1754. Walpole criou esta palavra, que significa “faculdade de fazer descobertas afortunadas acidentalmente”, com base no conto de fadas “Os príncipes de Serendip” (Serendip é um antigo nome do Sri Lanka), em que os protagonistas faziam, acidental e sagazmente, constantes descobertas.

³Do inglês: *locking*.

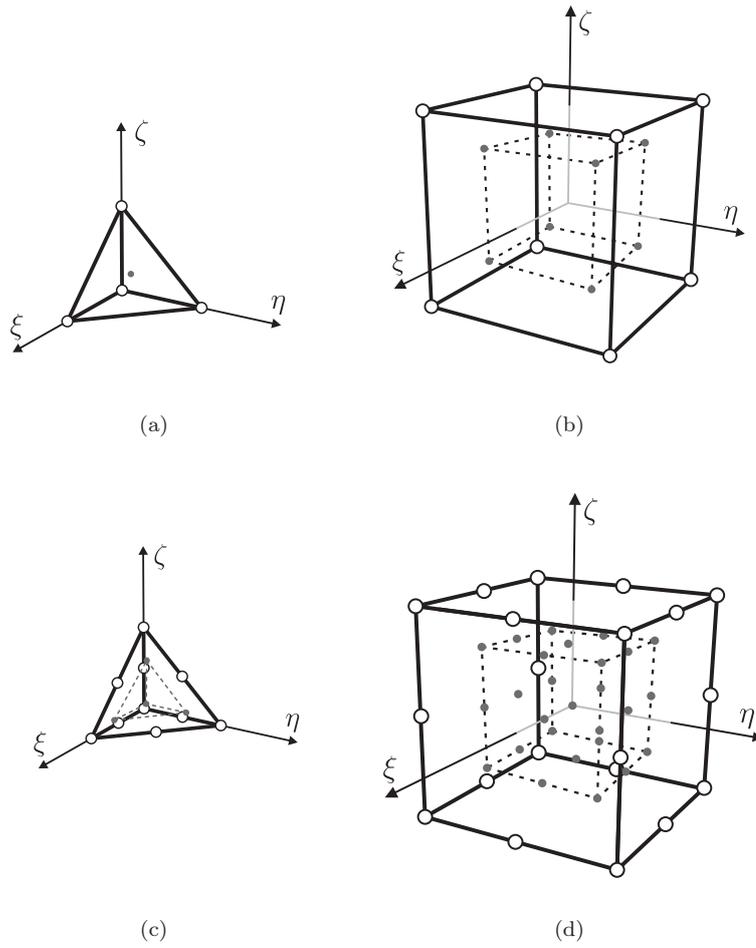


Figura 8.1: Elementos finitos implementados: (a) tetraedro linear, (b) hexaedro linear, (c) tetraedro quadrático e (d) hexaedro quadrático.

(i) a fracção volúmica dos materiais constituintes, (ii) a geometria e as dimensões do reforço, (iii) a distribuição do reforço e (iv) as condições de fronteira de periodicidade [Segurado e Llorca 2002, Oliveira *et al.* 2004]. Esta circunstância motivou o desenvolvimento do programa SPHERECELL [Oliveira *et al.* 2004, Oliveira 2006]. Este programa permite a geração de células representativas unitárias segundo três modelos distintos:

- Modelo predefinido — geração de células representativas unitárias com estrutura cúbica de corpo centrado ou estrutura cúbica de faces centradas, permitindo o controlo da fracção volúmica;
- Modelo aleatório com esferas — geração de células representativas unitárias com partículas esféricas de reforço, em que a posição e a dimensão das partículas de reforço são geradas de modo aleatório. Neste modelo, podem gerar-se geometrias com ou sem interferência de partículas de reforço, com limitação superior e/ou inferior do diâmetro das partículas e, ainda, com controlo do número de partículas de reforço;
- Modelo com fibras — geração de células representativas unitárias com fibras unidireccionais de reforço, podendo a distribuição do reforço ser obtida de modo aleatório ou confinada a regiões predefinidas da célula representativa unitária.

De modo a garantir a periodicidade geométrica das células representativas unitárias, para cada elemento de reforço que intersecte os limites da célula gera-se um conjunto de geometrias idênticas e complementares. Na figura 8.2 ilustra-se o esquema de geração das partículas complementares para uma célula com três partículas esféricas, bem como a sua periodicidade geométrica. A geração automática das características geométricas de uma célula representativa unitária é concluída com a geração dos ficheiros de definição geométrica no formato próprio do programa GiD.

8.3.3 A Sub-Rotina SLAVERY

No contexto da aplicação do método de homogeneização por expansão assintótica à termoelasticidade, é necessário garantir a periodicidade não só da geometria das células representativas unitárias mas também dos campos dos deslocamentos característicos e dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva, no problema termoelástico, e do campo de deslocamentos termocaracterísticos, no problema térmico (*cf.* Capítulo 5). Deve existir continuidade destes campos entre células contíguas e, conseqüentemente, entre regiões geometricamente opostas de uma célula representativa unitária. Assim, no que se refere aos campos de deslocamento, é necessário garantir a periodicidade da geometria original e da geometria deformada [Böhm 1998] (*vd.* figura 8.3). A periodicidade dos referidos campos numa célula representativa unitária é imposta por condições de fronteira de periodicidade. Neste contexto, os nós das fronteiras geométricas devem ser associados de modo a ser garantida a compatibilidade dos campos entre células contíguas. No programa COMMA3D utiliza-se a sub-rotina SLAVERY [Oliveira *et al.* 2004, Oliveira 2006] para se proceder, de modo expedito, à associação dos nós sujeitos a condições de periodicidade, bem como dos seus correspondentes graus de liberdade. Esta sub-rotina estabelece índices de associação entre nós pertencentes a fronteiras geométricas de células representativas unitárias de arestas ortogonais.

No caso de a malha de elementos finitos ser estruturada, a associação de nós de controlo e controlados é trivial, o que se deve ao facto de haver uma correspondência biunívoca entre os lugares geométricos dos nós a associar em regiões de controlo opostas. Pelo contrário, se a malha é não-estruturada, o algoritmo implementado permite uma correcta associação de graus de liberdade, apesar de o procedimento envolver selecções aproximadas. Os maiores compromissos exigidos envolvem associações ocasionais de múltiplos graus de liberdade a um único grau de liberdade de controlo, bastando para isso que a malha na região controlada seja localmente mais refinada que na região de controlo correspondente. Torna-se também necessário impor limitações a graus de liberdade de controlo que acabem por não ser associados a nenhum grau de liberdade controlado. Tal é efectuado de modo automático, no sentido de evitar que existam regiões das

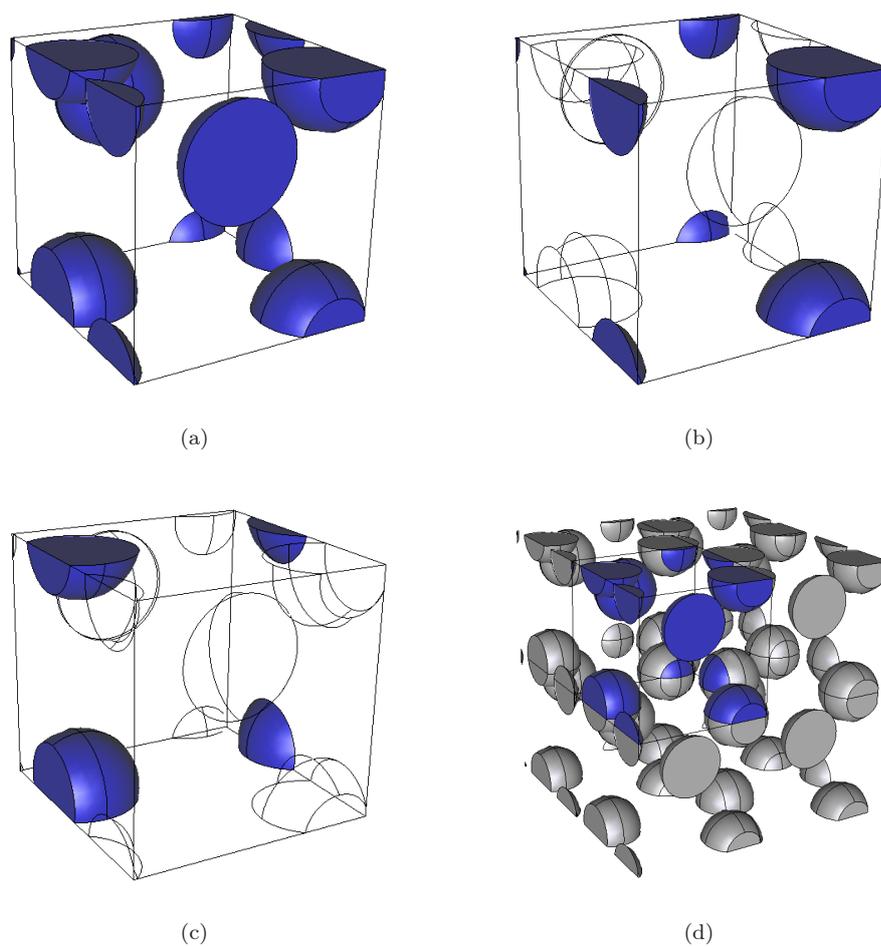


Figura 8.2: Esquema de geração de partículas complementares do programa SPHERECELL— (a) célula representativa unitária com três partículas esféricas, (b) geração de uma partícula nos vértices da célula representativa unitária, (c) geração de uma partícula nas faces/arestas da célula representativa unitária e (d) ilustração da periodicidade geométrica da célula representativa unitária.

fronteiras da célula representativa unitária que não se encontrem sujeitas a condições de fronteira de periodicidade. Uma descrição detalhada dos principais aspectos relacionados quer com a sub-rotina SLAVERY quer com o programa SPHERECELL pode ser consultada em [Oliveira 2006].

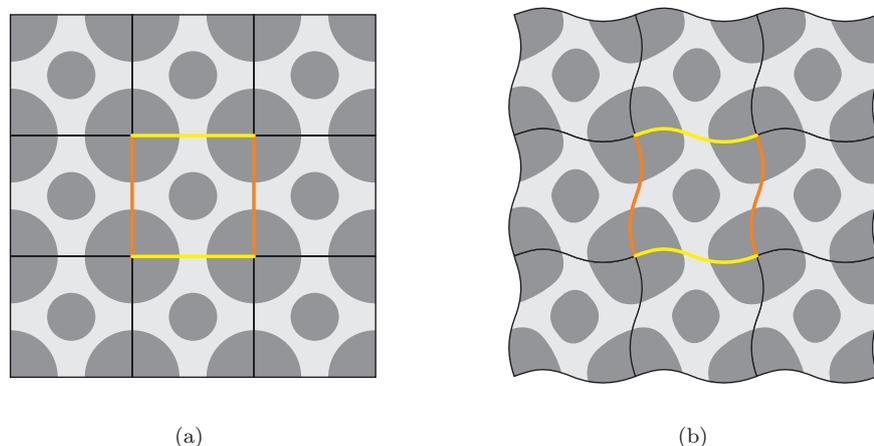


Figura 8.3: Representação esquemática da periodicidade de uma célula representativa unitária bidimensional — (a) geometria inicial e (b) geometria deformada.

8.4 Esquema de Armazenamento Matricial

Em grande parte das análises por elementos finitos, as matrizes de coeficientes são esparsas, constituindo os seus coeficientes não-nulos uma percentagem reduzida do número total de coeficientes. Assim, a consideração da totalidade dos coeficientes da matriz de coeficientes leva a uma redução da eficiência das operações matriciais. Esta situação torna-se mais patente com o aumento da dimensão do problema, uma vez que o número de coeficientes nulos tende a aumentar. Este facto leva a que o esforço computacional seja desperdiçado em multiplicações envolvendo factores nulos. Esta limitação pode ser evitada identificando os coeficientes nulos e eliminando, posteriormente, as correspondentes operações de multiplicação. Neste contexto, o algoritmo de armazenamento matricial seleccionado corresponde ao esquema CRS⁴. As vantagens deste esquema são significativas [Barrett *et al.* 1994], permitindo o armazenamento de $2n_{\bar{n}} + n + 1$ coeficientes, em oposição aos n^2 coeficientes do esquema de armazenamento total de uma matriz de dimensão $n \times n$. $n_{\bar{n}}$ é o número de coeficientes não-nulos da matriz de coeficientes. Com o intuito de ilustrar a aplicação do esquema de armazenamento CRS considere-se, a título de exemplo, a matriz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & 0 & b & 0 \\ 0 & c & 0 & d \\ e & f & 0 & 0 \\ g & h & 0 & i \end{bmatrix}.$$

O armazenamento CRS da matriz \mathbf{A} é especificado através dos vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \{ a \ b \ c \ d \ e \ f \ g \ h \ i \}, \\ \mathbf{i} &= \{ 1 \ 3 \ 2 \ 4 \ 1 \ 2 \ 1 \ 2 \ 4 \} \text{ e} \\ \mathbf{j} &= \{ 1 \ 3 \ 5 \ 7 \ 10 \}. \end{aligned}$$

⁴CRS: sigla de *Compressed Row Storage*.

Neste esquema, a matriz \mathbf{A} é armazenada no vector \mathbf{m} , que contém unicamente os valores não-nulos de \mathbf{A} . Os vectores \mathbf{i} e \mathbf{j} contêm o índice relativo à coluna de cada coeficiente não-nulo na matriz \mathbf{A} e o índice, em \mathbf{m} , do primeiro valor não-nulo de cada linha da matriz \mathbf{A} , respectivamente. A última componente do vector \mathbf{j} é usada no esquema de armazenamento matricial CRS para se especificar a dimensão $n_{\bar{n}}$ do vector \mathbf{m} , sendo o seu valor igual a $n_{\bar{n}} + 1$.

No esquema CRS é a própria conectividade da malha de elementos finitos que determina os índices dos vectores de ponteiros, \mathbf{i} e \mathbf{j} . Deste modo são evitados quaisquer procedimentos específicos relacionados com a ordenação dos graus de liberdade do sistema. Em rigor, a assemblagem é feita de forma natural: os índices globais são definidos pela relação entre a conectividade de cada elemento e a numeração dos graus de liberdade. Refira-se, ainda, a possibilidade de se alterar o esquema para, no caso de matrizes simétricas, armazenar somente a parte triangular superior (ou inferior), minimizando a memória necessária para o armazenamento. No entanto, esta alteração obriga à utilização de algoritmos mais complexos no que concerne quer ao acesso aos dados quer à realização de operações matriciais [Barrett *et al.* 1994]. No presente trabalho, a redução de memória não justifica a implementação de algoritmos de complexidade superior, optando-se pela melhoria do desempenho computacional em termos de velocidade de processamento.

Uma descrição detalhada do esquema CRS e de outros esquemas de armazenamento de matrizes pode ser consultada, por exemplo, em [Saad 2003, Stathis 2004].

8.5 Aplicação de Condições de Fronteira

Nesta secção descrevem-se alguns aspectos relativos à aplicação de condições de fronteira de deslocamento ou de temperatura. Distinguem-se as condições de fronteira de periodicidade das de prescrição de um determinado valor. Por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, dá-se especial ênfase às condições de fronteira de deslocamento.

8.5.1 Condições de Fronteira de Periodicidade

Em geral, a aplicação de condições de fronteira de periodicidade é efectuada recorrendo ao método de penalidade ou ao método dos multiplicadores de Lagrange.

Devido à simplicidade da sua implementação, o método de penalidade é o mais frequentemente utilizado. De um ponto de vista numérico, a imposição de uma condição de periodicidade de deslocamento, *e.g.* $u_i - u_j = 0$, consiste em considerar a ligação dos dois graus de liberdade a controlar por um elemento barra⁵, a que corresponde uma rigidez igual ao peso de penalidade w_p (*vd.* figura 8.4a). Neste contexto, a imposição da relação $u_i = u_j$ consiste, em termos práticos, na assemblagem da relação

$$w_p \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (8.1)$$

no sistema global de equações $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$. Deste modo, o sistema global de equações lineares resulta em

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & & \vdots & & \\ \dots & w_p + K_{ii} & \dots & -w_p + K_{ij} & \dots & \\ & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ \dots & -w_p + K_{ji} & \dots & w_p + K_{jj} & \dots & \\ & \vdots & & \vdots & \ddots & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \end{Bmatrix}. \quad (8.2)$$

⁵A imposição de uma condição de periodicidade de temperatura, *e.g.* $T_i - T_j = 0$, consiste na consideração da ligação dos dois graus de liberdade a controlar por um elemento com uma condutividade térmica igual ao peso de penalidade w_p .

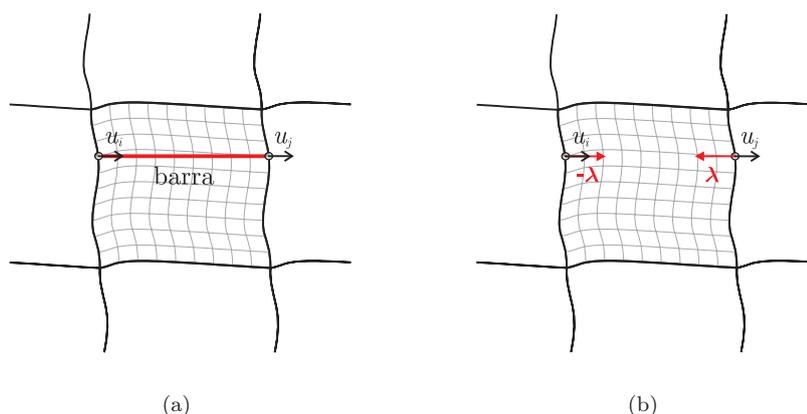


Figura 8.4: Representação esquemática do significado físico da aplicação de condições de fronteira de periodicidade com o método (a) de penalidade e (b) dos multiplicadores de Lagrange.

Um dos factores relevantes da aplicação deste método consiste na escolha adequada do peso de penalidade w_p . Este escalar corresponde ao peso da condição $u_i = u_j$ no sistema de equações, pelo que, idealmente, deveria ter-se $w_p = +\infty$. No entanto, o valor de w_p é limitado não só pelo valor de *overflow*⁶ do computador utilizado mas também por questões numéricas relativas ao condicionamento da matriz \mathbf{K} . Na realidade, o aumento do peso de penalidade torna a matriz de rigidez mal-condicionada. No limite, as linhas e as colunas associadas à condição de periodicidade tornam-se linearmente dependentes, o que resulta na singularidade da matriz global de rigidez. Deste modo, a consideração de um valor finito para w_p implica que a condição de periodicidade seja verificada de modo aproximado, *i.e.* $u_i - u_j \approx 0$. Assim, o valor de w_p deve ser suficientemente grande para que $u_i - u_j$ resulte numericamente insignificante. Uma selecção adequada de w_p pode ser efectuada utilizando um método heurístico designado regra da raiz quadrada. De acordo com esta regra, para uma matriz cujo maior coeficiente seja 10^k , com uma precisão de p dígitos, o peso de penalidade deverá ser $10^{k+p/2}$ [Felippa 2006].

Em termos de paralelismo físico com o método de penalidade, o método dos multiplicadores de Lagrange consiste na consideração dos carregamentos⁷ necessários para se estabelecer o equilíbrio mecânico pretendido, em vez de se proceder à manipulação da rigidez aparente do sistema. Assim, o estabelecimento da condição de periodicidade $u_i = u_j$ consiste na imposição de uma força com magnitude λ a um dos graus de liberdade e da sua simétrica ao restante grau de liberdade (*vd.* figura 8.4b). O escalar λ é o multiplicador de Lagrange e surge no vector de forças do sistema. No entanto, consistindo em mais uma incógnita, este escalar é transferido para o vector das incógnitas, o que obriga a uma expansão do sistema de equações. Neste contexto, a imposição da condição

⁶O *overflow* corresponde à existência de dados ou valores numéricos que são demasiadamente elevados para serem alocados na unidade de memória de um computador.

⁷Neste caso, a imposição de uma condição de periodicidade de temperatura $T_i - T_j = 0$ consiste na consideração dos fluxos superficiais de calor necessários para se estabelecer o equilíbrio térmico pretendido.

$u_i - u_j = 0$ consiste na transformação do sistema $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$ em

$$\begin{bmatrix}
 \ddots & \vdots & & \vdots & & 0 \\
 \dots & K_{ii} & \dots & K_{ij} & \dots & 1 \\
 & \vdots & \ddots & \vdots & & 0 \\
 \dots & K_{ji} & \dots & K_{jj} & \dots & -1 \\
 & \vdots & & \vdots & \ddots & 0 \\
 0 \dots 0 & 1 & 0 \dots 0 & -1 & 0 \dots 0 & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \vdots \\
 u_i \\
 \vdots \\
 u_j \\
 \vdots \\
 \lambda
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 \vdots \\
 f_i \\
 \vdots \\
 f_j \\
 \vdots \\
 0
 \end{pmatrix}. \quad (8.3)$$

Em relação ao método de penalidade, o método dos multiplicadores de Lagrange apresenta, como maior vantagem, o facto de ser um método exacto. Além disso, permite o cálculo expedito das reacções nos graus de liberdade com condições de fronteira e não exige o controlo de parâmetros de penalidade. No entanto, o método dos multiplicadores de Lagrange introduz incógnitas adicionais e obriga à utilização de algoritmos de armazenamento mais complexos, para se responder à necessidade de redimensionamento do sistema. A sua maior desvantagem relativamente ao método de penalidade consiste no facto de não ser aplicável a um algoritmo de resolução de sistemas de equações lineares baseado em matrizes definidas positivas, tal como, por exemplo, o método do gradiente conjugado (*cf.* Secção 7.4).

8.5.2 Condições de Fronteira de Valor Prescrito

As condições de fronteira de valor prescrito são usualmente efectuadas com base no método da eliminação da equação ou no método de penalidade.

No que concerne ao método da eliminação da equação, a imposição da condição de deslocamento prescrito $u_i = \bar{u}_i$ leva a que a equação correspondente a esse grau de liberdade possa ser eliminada, atribuindo-se o efeito do deslocamento prescrito às restantes equações. Deste modo, o método da eliminação da equação permite a diminuição do número de equações do sistema linear a resolver, mantendo-se as propriedades da matriz de rigidez global. No entanto, a sua aplicação não permite obter directamente o valor das reacções no grau de liberdade prescrito, visto a equação correspondente ter sido previamente eliminada do sistema de equações lineares.

A aplicação do método de penalidade na imposição da condição de deslocamento prescrito $u_i = \bar{u}_i$ consiste na multiplicação do coeficiente K_{ii} da matriz \mathbf{K} pelo peso de penalidade w_p e na substituição da componente de força f_i por $w_p K_{ii} \bar{u}_i$. Deste modo, resulta uma aproximação à condição de deslocamento prescrito $u_i = \bar{u}_i$. Este método não afecta as propriedades de banda e de simetria da matriz de rigidez.

8.6 Resolução do Sistema de Equações Lineares

Neste programa, o sistema de equações é construído localmente, sendo em cada nó construída a parte do sistema de equações respeitante a cada subdomínio. Apesar de ser possível construir todo o sistema no nó *master* e fazer a posterior comunicação aos nós responsáveis por cada um dos subdomínios, a opção implementada é significativamente mais eficiente [Kim e Im 2003]. Na

realidade, para além de se reduzir a quantidade de memória computacional exigida, esperam-se, nesta etapa, eficiências próximas de 100%. Este processo é perfeitamente escalável pelo facto de quer a formulação elementar quer a maior parte da assemblagem poderem ser realizadas sem necessidade de comunicação entre os diferentes processos. A gestão das condições de fronteira também é realizada localmente.

Uma das características do método do gradiente conjugado é o facto de não ser essencial assemblar globalmente a matriz de coeficientes, sendo apenas necessários os resultados das multiplicações de matrizes por vectores e dos produtos internos envolvidos no método. É por esta razão que os subdomínios podem ser tratados independentemente em cada um dos processos. Neste sentido, a única troca de informação entre diferentes processos, no que diz respeito à definição do sistema, consiste em completar as partes do sistema relativas a graus de liberdade das fronteiras dos domínios. Assim, cada processo necessita assemblar, também, a influência da rigidez dos elementos pertencentes aos outros subdomínios com conectividade em nós de fronteiras comuns. Esta operação é feita apenas no início da fase de resolução.

Em termos de processamento paralelo, em cada iteração existem apenas dois tipos de operações relevantes, os produtos internos e as multiplicações de matrizes por vectores [Kim e Im 2003]. No entanto, em cada processo, estas operações são executadas de forma independente sobre o subdomínio respectivo. Na realidade, o método do gradiente conjugado paralelizado tem um funcionamento idêntico ao da versão em série, sendo apenas necessário influenciar os diferentes subdomínios com a mesma direcção de busca para garantir que as várias partes do sistema reajam como se fossem processadas pelo mesmo processador. Assim, as actualizações dos vectores \mathbf{x} e \mathbf{r} são realizadas em cada processador (*vd.* equações 7.15 e 7.17). Em cada iteração, a convergência do processo é influenciada pelos coeficientes globais α e β (*vd.* tabela 7.1), calculados pelos produtos internos envolvendo os vectores de resíduo e as direcções de busca. Em rigor, estes constituem os dois pontos de sincronização dos processos paralelos, sendo os que requerem comunicações colectivas. Contudo, estas comunicações envolvem apenas os escalares provenientes dos produtos internos realizados em cada processador, sendo somados em todos os processadores. Em cada iteração é ainda necessário resolver o produto $\mathbf{A}\mathbf{p}$ que, mais uma vez, apresenta a vantagem de não necessitar do armazenamento explícito da matriz global, mas apenas da obtenção da parte do resultado respeitante a cada processador.

O condicionamento paralelo é feito com base na decomposição de Jacobi em blocos (*vd.* Secção 7.5.1) da matriz global. No entanto, em cada processador, é efectuada a resolução de um subsistema de equações lineares com base num condicionador local. Neste contexto, no presente trabalho utilizam-se o condicionador de Jacobi, o condicionador SSOR e o condicionador de factorização incompleta de Cholesky de nível 0. Uma descrição detalhada dos principais aspectos relacionados com a paralelização do método do gradiente conjugado e da utilização destes condicionadores, bem como das especificidades da sua implementação utilizando o esquema de armazenamento matricial CRS (*vd.* Secção 8.4) pode ser consultada, por exemplo, em [Barrett *et al.* 1994].

8.7 Homogeneização por Expansão Assimptótica

A determinação de propriedades efectivas de materiais compósitos é efectuada com base no método de homogeneização por expansão assimptótica (*vd.* Capítulo 5). Em seguida, abordam-se algumas questões relativas à sua implementação.

8.7.1 Cálculo dos Correctores Υ , χ e Ψ

Em termos de discretização pelo método dos elementos finitos, as equações 5.56, 5.123 e 5.124 correspondem a

$$\int_Y \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{k} \tilde{\mathbf{M}} dY \quad \Upsilon = \mathbf{F}^k, \quad (8.4)$$

$$\int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dY \quad \chi = \mathbf{F}^D \quad e \quad (8.5)$$

$$\int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dY \quad \Psi = \mathbf{F}^\beta, \quad (8.6)$$

respectivamente, em que

$$\mathbf{F}^k = \int_Y \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{k} dY, \quad (8.7)$$

$$\mathbf{F}^D = \int_Y \mathbf{B}^T \mathbf{D} dY \quad e \quad (8.8)$$

$$\mathbf{F}^\beta = \int_Y \mathbf{B}^T \beta dY. \quad (8.9)$$

$\tilde{\mathbf{M}}$ e \mathbf{B} são as matrizes globais das derivadas parciais das funções de forma, para os campos de temperaturas e de deslocamentos, respectivamente. \mathbf{k} , \mathbf{D} e β são as matrizes (globais) de condutividade térmica, de elasticidade e dos módulos térmicos, respectivamente. Υ e χ são as matrizes de deslocamentos termocaracterísticos e de deslocamentos característicos, respectivamente. Ψ é o vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva. \mathbf{F}^k e \mathbf{F}^D são as matrizes dos vectores de solicitações termocaracterísticas e de solicitações mecânicas características, respectivamente. As colunas das matrizes \mathbf{F}^k e \mathbf{F}^D constituem vectores de coeficientes independentes, que definem três e seis sistemas de equações lineares, respectivamente. As soluções destes sistemas de equações lineares correspondem às colunas dos correctores correspondentes. As matrizes \mathbf{F}^k e \mathbf{F}^D surgem por integração dos gradientes das propriedades térmicas e das propriedades elásticas dos materiais que constituem a célula representativa unitária, respectivamente. \mathbf{F}^β é o vector de solicitações termoelastocaracterísticas, a que corresponde um único sistema de equações lineares. Atenda-se ao facto de as relações 8.5 e 8.6 apresentarem a mesma matriz de coeficientes (matriz de rigidez), diferindo apenas no facto de se considerarem, na definição dos seus termos independentes, os gradientes da rigidez mecânica e os gradientes dos módulos térmicos, respectivamente.

8.7.2 Condições de Fronteira de Periodicidade

As condições de fronteira de periodicidade são aplicadas aos limites de uma célula representativa unitária. Representando por \mathbf{C}_r qualquer um dos correctores Υ , χ e Ψ tem-se, para uma célula paralelepipedica definida, em Y , por $y_1 \in [0, y_1^0]$, $y_2 \in [0, y_2^0]$ e $y_3 \in [0, y_3^0]$ (*cf.* figura 8.5), que as condições de periodicidade correspondem a

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_r(0, y_2, y_3) &= \mathbf{C}_r(y_1^0, y_2, y_3), \\ \mathbf{C}_r(y_1, 0, y_3) &= \mathbf{C}_r(y_1, y_2^0, y_3) \quad e \\ \mathbf{C}_r(y_1, y_2, 0) &= \mathbf{C}_r(y_1, y_2, y_3^0). \end{aligned} \quad (8.10)$$

Todavia, de modo a garantir a unicidade das soluções dos sistemas 8.4 a 8.6, é necessário impor restrições aos seis graus de liberdade, para o problema termoelástico, e a um grau de liberdade, para o problema térmico, de um ponto arbitrário na célula representativa unitária. Neste trabalho, esta restrição é imposta actuando apenas sobre os graus de liberdade relativos a um único vértice da célula representativa unitária. As relações 8.10 obrigam a que a esta restrição actue simultaneamente sobre a totalidade dos vértices da célula representativa unitária, pelo que, no caso do problema termoelástico, se previne a existência de movimento de corpo rígido.

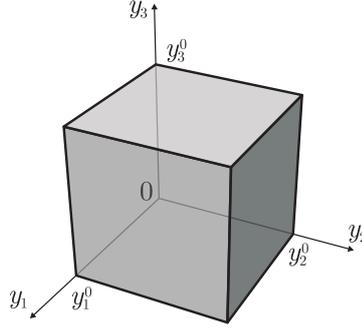


Figura 8.5: Sistema de eixos coordenados e limites das coordenadas de uma célula representativa unitária paralelepipedica definida em Y .

8.7.3 Cálculo Numérico de \mathbf{k}^h , \mathbf{D}^h e $\boldsymbol{\beta}^h$

Com base nas equações 5.62 e 5.129, as matrizes homogeneizadas de condutividade térmica \mathbf{k}^h e de elasticidade \mathbf{D}^h são obtidas, em termos do método dos elementos finitos, a partir das equações

$$\mathbf{k}^h = \sum_{k=1}^{n_{ef}} \frac{Y^k}{Y} \mathbf{k}^k \left(\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^k \boldsymbol{\Upsilon}^k \right) \quad \text{e} \quad (8.11)$$

$$\mathbf{D}^h = \sum_{k=1}^{n_{ef}} \frac{Y^k}{Y} \mathbf{D}^k \left(\mathbf{I} - \mathbf{B}^k \boldsymbol{\chi}^k \right), \quad (8.12)$$

respectivamente. Y^k e Y são os volumes de um elemento finito genérico k e o volume total da célula representativa unitária, respectivamente. \mathbf{I} é a matriz identidade e n_{ef} corresponde ao número total de elementos finitos utilizados na discretização da célula representativa unitária. Atenda-se ao facto de as matrizes com o índice superior k correspondem a quantidades elementares, *i.e.* não-globais. Por outro lado, o vector homogeneizado dos módulos térmicos $\boldsymbol{\beta}^h$ corresponde, atendendo à equação 5.130, a

$$\boldsymbol{\beta}^h = \sum_{k=1}^{n_{ef}} \frac{Y^k}{Y} \left(\boldsymbol{\beta}^k - \mathbf{D}^k \mathbf{B}^k \boldsymbol{\Psi}^k \right), \quad (8.13)$$

em que os vectores e as matrizes com o índice superior k corresponderem a quantidades elementares. Assim, verifica-se que no caso de o gradiente de um dos correctores ser nulo, a correspondente propriedade homogeneizada coincide com a sua média volúmica na microescala. Por fim, refira-se que o vector homogeneizado dos coeficientes de dilatação térmica $\boldsymbol{\alpha}^h$ é obtido, de acordo com a relação 3.7 e assumindo a não singularidade de \mathbf{D}^h , a partir da equação

$$\boldsymbol{\alpha}^h = \left(\mathbf{D}^h \right)^{-1} \boldsymbol{\beta}^h. \quad (8.14)$$

8.7.4 Processo de Localização

De acordo com as equações 5.157, 5.158 e 5.160, os campos microestruturais de fluxos superficiais de calor por condução, de deformação e de tensão, num determinado ponto de integração de um elemento finito da macroescala, correspondem a

$$\mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{k}^{\text{mic}} \left(\tilde{\mathbf{M}}^{\text{mic}} \boldsymbol{\Upsilon} - \mathbf{I} \right) \tilde{\mathbf{M}}^{\text{mac}} \mathbf{T}^{(0)}, \quad (8.15)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(1)} = \left(\mathbf{I} - \mathbf{B}^{\text{mic}} \boldsymbol{\chi} \right) \mathbf{B}^{\text{mac}} \mathbf{u}^{(0)} + \mathbf{B}^{\text{mic}} \boldsymbol{\Psi} \left(T^{(0)} - T_0 \right) \quad \text{e} \quad (8.16)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{(1)} = \mathbf{D}^{\text{mic}} \left(\mathbf{I} - \mathbf{B}^{\text{mic}} \boldsymbol{\chi} \right) \mathbf{B}^{\text{mac}} \mathbf{u}^{(0)} + \left(\mathbf{D}^{\text{mic}} \mathbf{B}^{\text{mic}} \boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\beta}^{\text{mic}} \right) \left(T^{(0)} - T_0 \right), \quad (8.17)$$

respectivamente. T_0 é a temperatura de referência e $T^{(0)}$ é a temperatura global do material homogeneizado associado à macroescala. $\mathbf{u}^{(0)}$ é o campo macroestrutural de deslocamentos. O índice superior mac denota matrizes (elementares) associadas ao elemento finito da macroescala — no qual se efectua o processo de localização — e o índice superior mic denota matrizes (globais) associadas aos elementos finitos da microescala, respectivamente.

8.7.5 Processo de Homogeneização em Termoelasticidade Linear

Nesta secção descreve-se o algoritmo global relativo ao cálculo numérico em termoelasticidade linear considerando o procedimento de homogeneização por expansão assimptótica. São também abrangidas as situações relativas aos processos de cálculo exclusivamente térmico, termoelástico e termomecânico (térmico e termoelástico). Os algoritmos de cálculo térmico e termoelástico encontram-se descritos sucintamente nas tabelas 8.1 e 8.2. Num problema termomecânico, a primeira parte da fase de cálculo corresponde à resolução do problema térmico, no qual se pode, eventualmente, invocar o procedimento de homogeneização por expansão assimptótica (*vd.* tabela 8.3). Posteriormente, procede-se à resolução do problema termoelástico, em que o procedimento de homogeneização por expansão assimptótica poderá ser novamente invocado. Refira-se ainda que, no caso de apenas se pretender obter as propriedades efectivas de um material compósito definido por uma determinada célula representativa unitária, basta proceder à utilização do procedimento de homogeneização por expansão assimptótica apresentado. Nos algoritmos apresentados, os vectores e as matrizes com o índice superior k correspondem, de acordo com o referido na Secção 8.7.3, a quantidades elementares.

Tabela 8.1: Algoritmo geral de cálculo térmico linear.

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Iniciação de variáveis do problema térmico 2. SE homogeneização, ENTÃO <ul style="list-style-type: none"> Cálculo de \mathbf{k}^h — EXECUTAR HEA FIM SE 3. REPETIR — Ciclo elementar em $k = 1, \dots$ <ul style="list-style-type: none"> SE homogeneização, ENTÃO <ul style="list-style-type: none"> $\mathbf{k}^k = \mathbf{k}^h$ FIM SE Cálculo de \mathbf{K}^k Cálculo de \mathbf{Q}^k e \mathbf{f}^k Assemblagem de \mathbf{K}, \mathbf{Q} e \mathbf{f} 4. Imposição de condições de fronteira 5. Cálculo de temperaturas 6. Cálculo de fluxos superficiais de calor 7. SE homogeneização com localização, ENTÃO <ul style="list-style-type: none"> Proceder a localização FIM SE 8. SE problema termomecânico, ENTÃO <ul style="list-style-type: none"> Cálculo de $\Delta\mathbf{T}$ para problema termoelástico EXECUTAR TE FIM SE |
|--|

Tabela 8.2: Algoritmo geral de cálculo termoelástico linear — módulo TE.

<p>1. Iniciação de variáveis do problema termoelástico</p> <p>2. SE homogeneização, ENTÃO Cálculo de \mathbf{D}^h e β^h — EXECUTAR HEA FIM SE</p> <p>3. REPETIR — Ciclo elementar em $k = 1, \dots$ SE homogeneização, ENTÃO $\mathbf{D}^k = \mathbf{D}^h$ $\beta^k = \beta^h$ FIM SE Cálculo de $\Delta \mathbf{T}^k$ e \mathbf{F}^k Cálculo de \mathbf{K}^k Assemblagem de \mathbf{K}_u e \mathbf{F}</p> <p>4. Aplicação de condições de fronteira a \mathbf{K}_u e \mathbf{F}</p> <p>5. Cálculo de deslocamentos \mathbf{u}</p> <p>6. Cálculo de deformações ϵ e tensões σ</p> <p>8. SE homogeneização com localização, ENTÃO Proceder a localização FIM SE</p>
--

Tabela 8.3: Algoritmo simplificado do procedimento de homogeneização por expansão assimptótica — módulo HEA.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Leitura inicial e gestão de variáveis 2. Leitura de geometria e de propriedades 3. Associação de nós e de graus de liberdade 2. SE cálculo de \mathbf{k}^h, ENTÃO <ol style="list-style-type: none"> 2.1 REPETIR — Ciclo elementar em $k = 1, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 2.1.1 Cálculo de $(\mathbf{K}^k)^k$ e $(\mathbf{F}^k)^k$ 2.1.2 Assemblagem de \mathbf{K}^k e \mathbf{F}^k 2.2 Aplicação de condições de fronteira de periodicidade a \mathbf{K}^k 2.3 Cálculo do corrector Υ — 3 sistemas de equações lineares 2.4 Armazenamento de Υ, para posterior localização 2.5 REPETIR — Ciclo elementar em $k = 1, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 2.5.1. Obtenção de Υ^k 2.5.2. Cálculo da contribuição elementar para \mathbf{k}^h 2.6 Definição de \mathbf{k}^h para macroescala 3. SENÃO <ol style="list-style-type: none"> 3.1 REPETIR — Ciclo elementar em $k = 1, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 3.1.1 Cálculo de $(\mathbf{K}^D)^k$, $(\mathbf{F}^D)^k$ e $(\mathbf{F}^\beta)^k$ 3.1.2 Assemblagem de \mathbf{K}^D, \mathbf{F}^D e \mathbf{F}^β 3.2 Aplicação de condições de fronteira de periodicidade a \mathbf{K}^D 3.3 Cálculo dos correctores χ e Ψ — 7 sistemas de equações lineares 3.4 Armazenamento de χ e Ψ, para posterior localização 3.5 REPETIR — Ciclo elementar em $k = 1, \dots$ <ol style="list-style-type: none"> 3.5.1. Obtenção de χ^k e Ψ^k 3.5.2. Cálculo da contribuição elementar para \mathbf{D}^h e β^h 3.6 Definição de \mathbf{D}^h e β^h para macroescala <p>FIM SE</p>

Parte III

Apresentação, Validação e Discussão de Resultados

Capítulo 9

Propriedades Termomecânicas Lineares de Materiais Compósitos

Aplicam-se o método numérico de homogeneização por expansão assintótica e alguns métodos analíticos na determinação de propriedades efectivas mecânicas e térmicas de materiais compósitos, quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas. Estes resultados são comparados com resultados de previsão de natureza numérica e de natureza analítica, e com resultados experimentais. Abordam-se, ainda, alguns aspectos relativos à modelação numérica do comportamento termoelástico de materiais compósitos com base na técnica de homogeneização por expansão assintótica.

No projecto de estruturas que envolvem a utilização de materiais compósitos utilizam-se, não raras vezes, valores para as propriedades termomecânicas destes materiais que correspondem a médias, no sentido macroestrutural, das propriedades dos seus constituintes — propriedades efectivas. Visto o processo experimental de determinação das propriedades efectivas de um material compósito se revelar, em geral, não só dispendioso mas também não-expedito, é usual recorrer-se a métodos não-experimentais de previsão. Estes métodos consistem, de um modo geral, em técnicas que podem ser de natureza analítica ou de natureza numérica (*e.g.* o método dos elementos finitos). Neste contexto, nas secções seguintes aplicam-se o método numérico de homogeneização por expansão assintótica e alguns métodos analíticos para a determinação de propriedades efectivas mecânicas e térmicas de materiais compósitos, quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas. Estes resultados são comparados com resultados de previsão de natureza numérica e de natureza analítica, e com resultados experimentais. Procedem-se, também, à abordagem dos principais aspectos relativos à modelação numérica do comportamento termoelástico de materiais compósitos com base na técnica de homogeneização por expansão assintótica.

Por uma questão não só de simplificação da análise mas também devido a limitações que advêm do âmbito do presente trabalho, assumem-se as seguintes premissas:

1. O material compósito apresenta, a nível microestrutural, uma distribuição de reforço de natureza periódica, podendo ser, deste modo, definida uma célula unitária representativa deste material — célula representativa unitária;

2. Existe uma aderência perfeita na interface dos materiais da matriz e de reforço, não sendo relevante o efeito da interface nas propriedades (termomecânicas) efectivas do material compósito;
3. O material compósito é constituído por duas fases distintas — a matriz e o reforço — que, em termos individuais, são materiais homogêneos com comportamentos termoelásticos lineares e propriedades isotrópicas;
4. Em termos de morfologia, o reforço é constituído por partículas esféricas ou por fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas, não existindo quaisquer imperfeições (*e.g.* porosidade) no seio do material compósito, nem se verificando a possibilidade da sua formação (dano).

9.1 Determinação de Propriedades Mecânicas de Materiais Compósitos

9.1.1 Estudo da Aplicabilidade de Malhas Não-Estruturadas de Elementos Finitos

Na presente secção avalia-se a aplicabilidade, em termos do método de homogeneização por expansão assintótica (HEA), de malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos na modelação de células representativas unitárias. Assim, efectua-se um estudo comparativo do comportamento dos vários tipos de elemento finito que foram implementados. Procede-se, ainda, à validação dos resultados numéricos obtidos recorrendo a resultados de previsão de natureza quer numérica quer analítica e a resultados experimentais. Neste contexto, considera-se um material compósito reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas. Na figura 9.1 ilustra-se, de modo esquemático, o material compósito e a célula representativa unitária considerada¹.

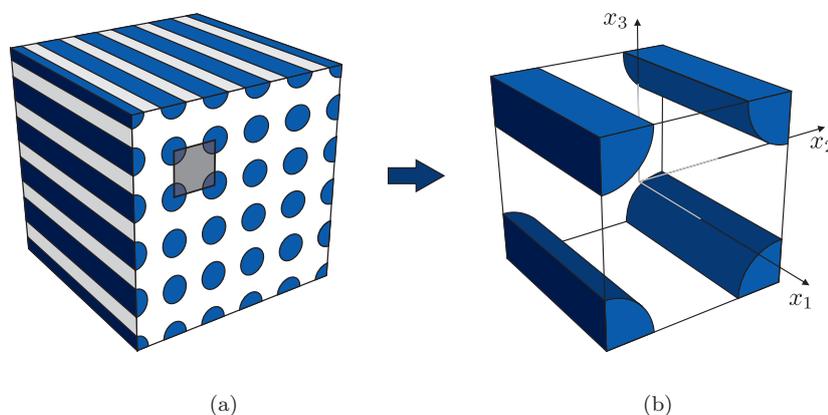


Figura 9.1: Representação esquemática (a) do material compósito reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas, e (b) da célula representativa unitária considerada.

Os materiais da matriz e do reforço do material compósito são o alumínio (Al) e o boro (B), respectivamente. As propriedades mecânicas elásticas destes materiais encontram-se indicadas na tabela 9.1 [Kenaga *et al.* 1987].

¹Ao material compósito ilustrado na figura 9.1 corresponde uma malha regular quadrada. No entanto, poderia ter sido também considerado outro tipo de malha regular, tal como, por exemplo, a malha hexagonal. Atenda-se ainda ao facto de a célula representativa unitária considerada corresponder a uma das infinitas células representativas

Tabela 9.1: Propriedades mecânicas elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade do material da matriz, E_m [GPa]	68,3
Coefficiente de Poisson do material da matriz, ν_m [-]	0,3
Módulo de elasticidade do material do reforço, E_r [GPa]	379,3
Coefficiente de Poisson do material do reforço, ν_r [-]	0,1

As propriedades mecânicas elásticas (homogeneizadas) do material compósito são determinadas para uma fracção volúmica de reforço $f_r = 47\%$. Efectuam-se várias simulações numéricas utilizando quatro tipos distintos de elemento finito: (i) tetraedros lineares (TL), (ii) tetraedros quadráticos (TQ), (iii) hexaedros lineares (HL) e (iv) hexaedros quadráticos (HQ). No caso dos hexaedros lineares, para além do método de integração completa, utiliza-se também o método de integração reduzida selectiva (método $\bar{\mathbf{B}}$ — HL-IRS). Neste contexto, procede-se, para cada um dos cinco casos anteriormente referidos, a um estudo de convergência [Rizzo 1991] da matriz homogeneizada de elasticidade \mathbf{D}^h associada à célula representativa unitária que define o material compósito reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas (*cf.* figura 9.1). No estudo de convergência consideram-se, para os 4 tipos de elemento finito, seis malhas distintas, cujas características são apresentadas na tabela 9.2. As simulações numéricas revelam que as matrizes homogeneizadas de elasticidade \mathbf{D}^h são características de um material ortotrópico, apresentando a forma genérica²

$$\mathbf{D}^h = \begin{bmatrix} D_{11}^h & D_{12}^h & D_{13}^h & 0 & 0 & 0 \\ D_{12}^h & D_{22}^h & D_{23}^h & 0 & 0 & 0 \\ D_{13}^h & D_{23}^h & D_{33}^h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44}^h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{55}^h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{66}^h \end{bmatrix}. \quad (9.1)$$

O carácter ortotrópico do material compósito considerado está em conformidade com o facto de este apresentar três planos mutuamente ortogonais de simetria material — x_1Ox_2 , x_2Ox_3 e x_1Ox_3 (*cf.* figura 9.1). Neste contexto, na figura 9.2 é apresentada, a título de exemplo, a evolução das 9 componentes não-nulas de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para uma célula representativa unitária modelada com elementos finitos tetraédricos quadráticos. O mesmo tipo de comportamento foi verificado para os restantes tipos de elementos finitos. Deste modo, as matrizes homogeneizadas de elasticidade \mathbf{D}^h obtidas nos ensaios de convergência definem um caso particular de material ortotrópico. Este material, denominado material tetragonal³ [Banks-Sills *et al.* 1997], é definido pela seguinte matriz homogeneizada de elasticidade:

$$\mathbf{D}^h = \begin{bmatrix} D_{11}^h & D_{12}^h & D_{12}^h & 0 & 0 & 0 \\ D_{12}^h & D_{22}^h & D_{23}^h & 0 & 0 & 0 \\ D_{12}^h & D_{23}^h & D_{22}^h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44}^h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{55}^h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{44}^h \end{bmatrix}. \quad (9.2)$$

unitárias que representam o material compósito com uma malha regular quadrada.

²Atenda-se ao facto de os coeficientes D_{44}^h , D_{55}^h e D_{66}^h relacionarem as tensões de corte τ_{12} , τ_{23} e τ_{13} com as deformações angulares γ_{12} , γ_{23} e γ_{13} , respectivamente.

³Refira-se que o facto de $D_{55}^h \neq \frac{D_{22}^h - D_{23}^h}{2}$ exclui a possibilidade de o material compósito ser transversalmente isotrópico.

Tabela 9.2: Características numéricas das malhas de elementos finitos utilizadas no estudo de convergência, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro.

Tipo de elemento	Referência da malha	Número de nós	Número de elementos
Tetraedro linear	MTL1	1 001	4 354
	MTL2	2 002	9 466
	MTL3	3 982	19 524
	MTL4	8 006	41 140
	MTL5	15 991	84 733
	MTL6	31 180	168 919
Tetraedro quadrático	MTQ1	1 022	577
	MTQ2	1 824	1 135
	MTQ3	4 067	2 506
	MTQ4	8 169	5 350
	MTQ5	16 032	10 609
	MTQ6	30 218	20 537
Hexaedro linear	MHL1	868	540
	MHL2	1 845	1 280
	MHL3	3 366	2 500
	MHL4	8 520	6 860
	MHL5	17 290	14 580
	MHL6	30 636	26 620
Hexaedro quadrático	MHQ1	1 077	160
	MHQ2	3 103	540
	MHQ3	6 761	1 280
	MHQ4	12 531	2 500
	MHQ5	20 893	4 320
	MHQ6	32 327	6 860

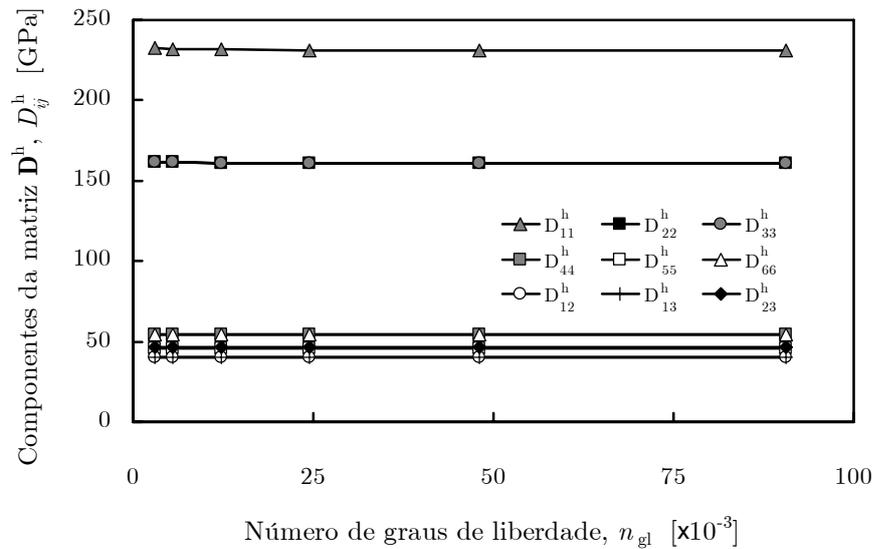


Figura 9.2: Evolução das componentes não-nulas de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para uma célula representativa unitária de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro modelada com elementos finitos tetraédricos quadráticos.

Nos estudos de convergência efectuados para os vários tipos de elemento finito, verificou-se a convergência simultânea das componentes da matriz \mathbf{D}^h . Deste modo, procede-se, com o intuito de simplificar a exposição dos resultados obtidos, à análise destes resultados considerando a evolução da norma de Frobenius⁴ da matriz \mathbf{D}^h , $\|\mathbf{D}^h\|$, com o número de graus de liberdade. Na figura 9.3 apresentam-se os resultados obtidos nos estudos de convergência. Por um lado, verifica-se que a evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, n_{gl} , para os vários tipos de elemento finito considerados não apresenta quaisquer características de instabilidade numérica (fenómenos de oscilação numérica ou de divergência numérica). Por outro lado, a evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade ocorre por valores inferiores ao suposto limite assintótico (limite de convergência) para os elementos finitos lineares e por valores superiores para os elementos finitos quadráticos. Este efeito, que se revela mais evidente para as malhas com menor número de graus de liberdade, pode explicar-se pelo facto de os gradientes de deslocamento serem aproximados de modo linear no interior dos elementos quadráticos. Além disso, à excepção dos elementos finitos hexaédricos lineares, verifica-se que os resultados numéricos se aproximam razoavelmente do limite de convergência para um número reduzido de graus de liberdade ($n_{gl} \approx 25\ 000$). Pelo contrário, os resultados numéricos relativos aos elementos finitos hexaédricos lineares apresentam uma aproximação mais gradual ao limite de convergência. Esta tendência manifesta-se nos resultados numéricos relativos seja ao método de integração completa seja ao método de integração reduzida selectiva. De facto, verifica-se que a utilização do método de integração completa ou de integração reduzida selectiva dão origem a resultados que, na prática, podem ser considerados idênticos. Assim, mesmo para $n_{gl} \approx 91\ 908$, constata-se que o valor de $\|\mathbf{D}^h\|$ para os elementos finitos hexaédricos é cerca de 0,85% inferior aos valores obtidos para os restantes tipos de elemento finito. Esta característica pode ser explicada pelo facto de, ao contrário do que ocorre numa análise por elementos finitos convencional, a convergência dos resultados numéricos associados à metodologia de HEA depender, em geral, não só do número de graus de liberdade mas também do número de elementos finitos que compõem a correspondente malha. De facto, embora numa análise por elementos finitos convencional se verifique que a convergência dos resultados numéricos

⁴Atenda-se a que a convergência da norma de Frobenius de uma matriz não é condição suficiente, apesar de ser necessária, para que se verifique a convergência simultânea de todas as suas componentes.

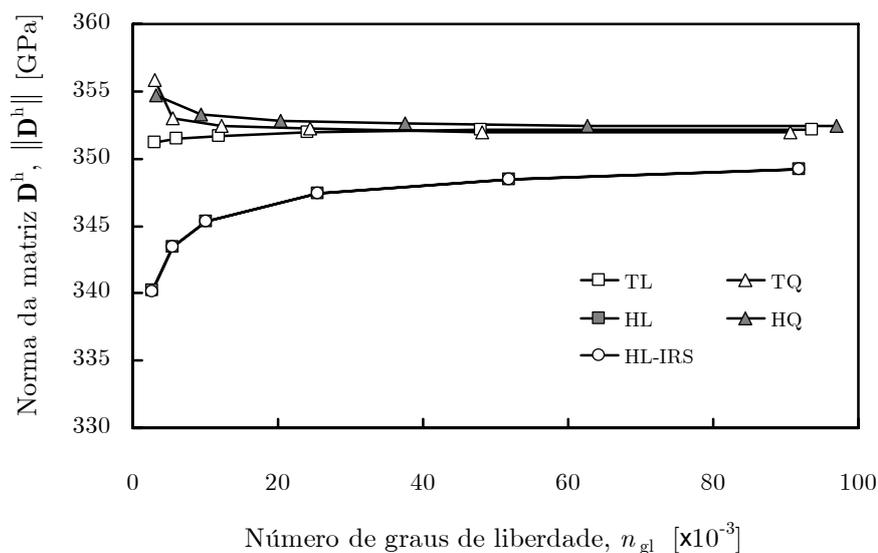


Figura 9.3: Evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para os vários estudos de convergência efectuados.

depende apenas do número de graus de liberdade utilizados [Rizzo 1991], na metodologia de HEA a matriz \mathbf{D}^h é obtida através de uma média volúmica das propriedades da microescala, as quais são afectadas pelos gradientes dos deslocamentos característicos da célula representativa unitária utilizada para caracterizar a microestrutura do material compósito (*vd.* equação 8.12). Deste modo, a metodologia de HEA requer, além da utilização de um maior número de nós na definição da malha de elementos finitos da célula representativa unitária, a utilização de um número de elementos finitos que seja suficiente para que a média volúmica das propriedades da microescala atinja o seu valor-limite assintótico. Assim, na metodologia de HEA torna-se necessário utilizar um número suficiente não só de graus de liberdade mas também de elementos finitos lineares. No entanto, para um determinado número de elementos finitos, a utilização de elementos quadráticos permite, em relação aos elementos finitos lineares, uma definição mais precisa dos gradientes dos deslocamentos característicos da célula representativa unitária, pelo que, na prática, o valor da média volúmica das propriedades da microescala resulta mais bem definido que no caso de os elementos serem lineares. Neste contexto, na figura 9.4 apresenta-se a evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos finitos n_{el} , para os vários ensaios realizados. Verifica-se que o número máximo de elementos finitos correspondente aos hexaedros lineares é cerca de 16% inferior ao número máximo de tetraedros lineares. No entanto, constata-se que a natureza quadrática dos tetraedros de 10 nós e dos hexaedros de 20 nós permite a obtenção de resultados admissíveis, utilizando um número máximo de elementos finitos ainda inferior ao de hexaedros lineares.

Na figura 9.5 ilustra-se a evolução da variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade n_{gl} , para os ensaios numéricos efectuados. É possível verificar que as malhas utilizadas dão origem, mesmo para malhas de elementos finitos grosseiras, aproximações com variações relativas sempre inferiores, em valor absoluto, a 1%. Os elementos hexaédricos lineares têm uma aproximação mais gradual ao limite de convergência. Adicionalmente, é perceptível a boa aproximação alcançada com os restantes tipos de elemento finito. Atendendo ao facto de o refinamento das malhas MTL4, MTQ4, MHL4 e MHQ4 (*cf.* tabela 9.2) dar origem a variações relativas da norma de \mathbf{D}^h inferiores a 0,5%, considera-se que as referidas malhas dão origem a soluções admissíveis [Rizzo 1991]. Na figura 9.6 encontram-se ilustradas as geometrias e as malhas de elementos finitos adoptadas, que são não-estruturadas para os elementos finitos tetraédricos e estruturadas para os elementos finitos hexaédricos.

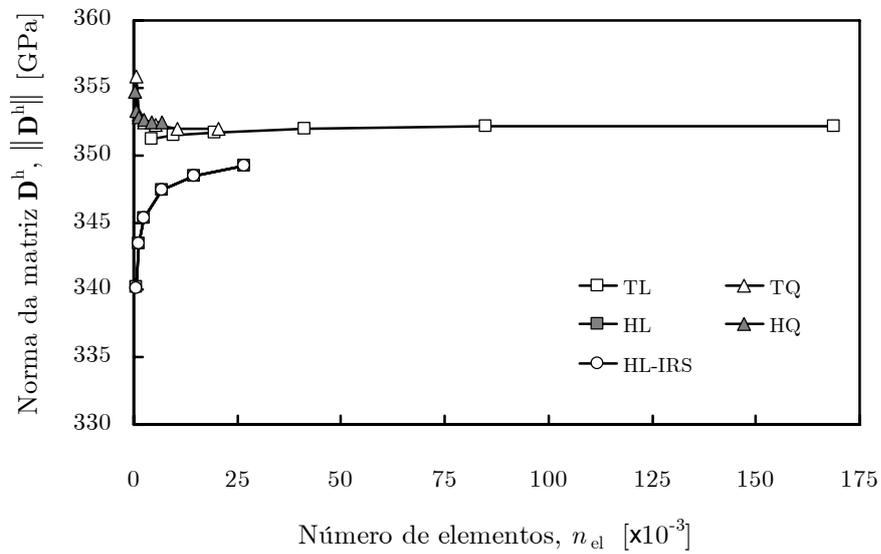


Figura 9.4: Evolução da norma de \mathbf{D}^h com o número de elementos finitos, para os vários estudos de convergência efectuados.

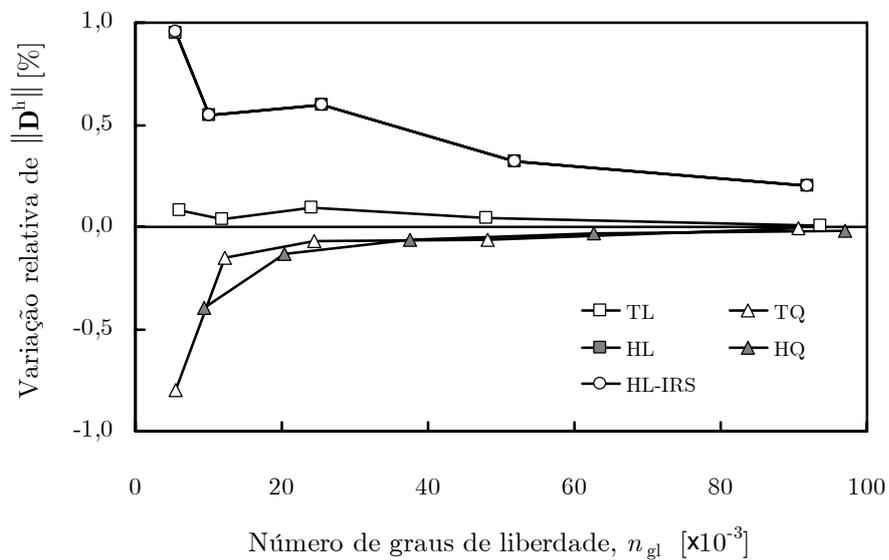


Figura 9.5: Evolução da variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para os vários estudos de convergência efectuados.

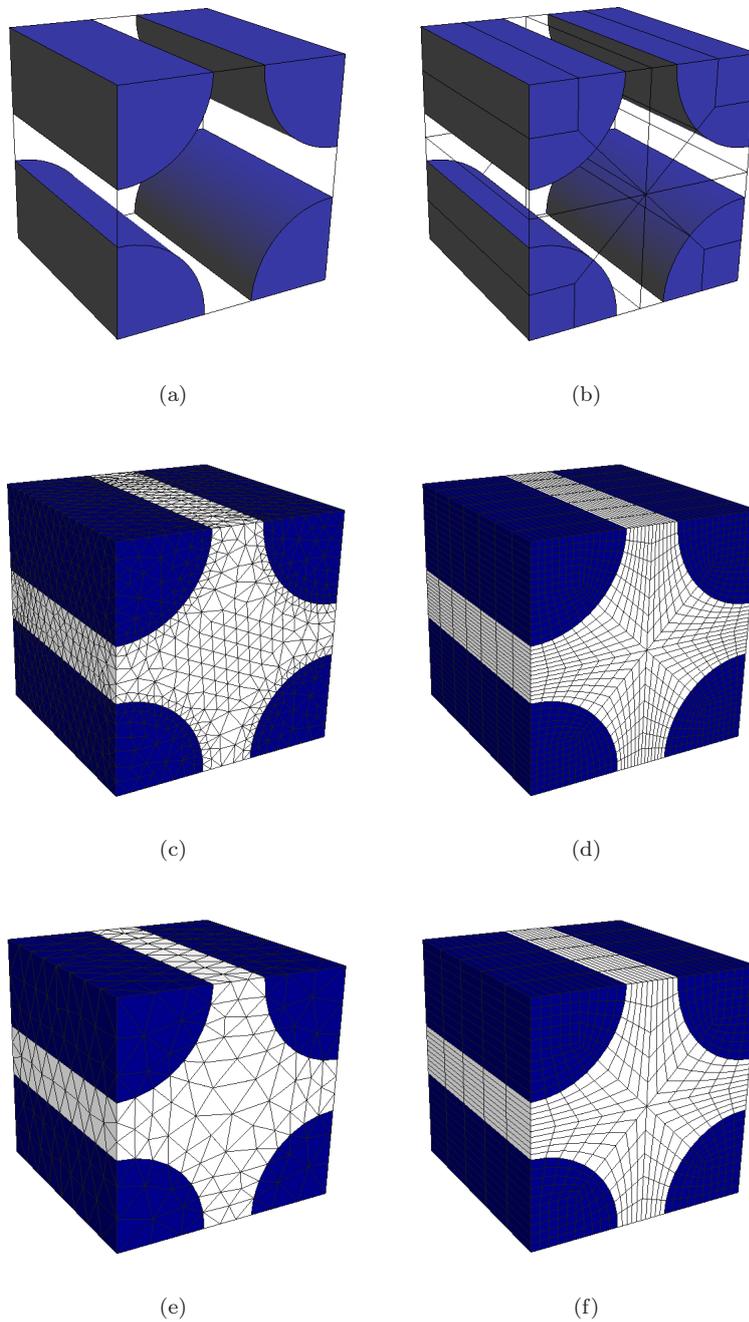


Figura 9.6: Célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro (47% vol.) — (a) geometria e malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos (c) lineares e (e) quadráticos, e (b) geometria e malhas estruturadas de elementos finitos hexaédricos (d) lineares e (f) quadráticos.

As matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com as malhas de elementos finitos apresentadas na figura 9.6 encontram-se esquematicamente ilustradas nas figuras 9.7 e 9.8, em que, de acordo com a equação 9.2, se ilustra o carácter tetragonal do material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de boro.

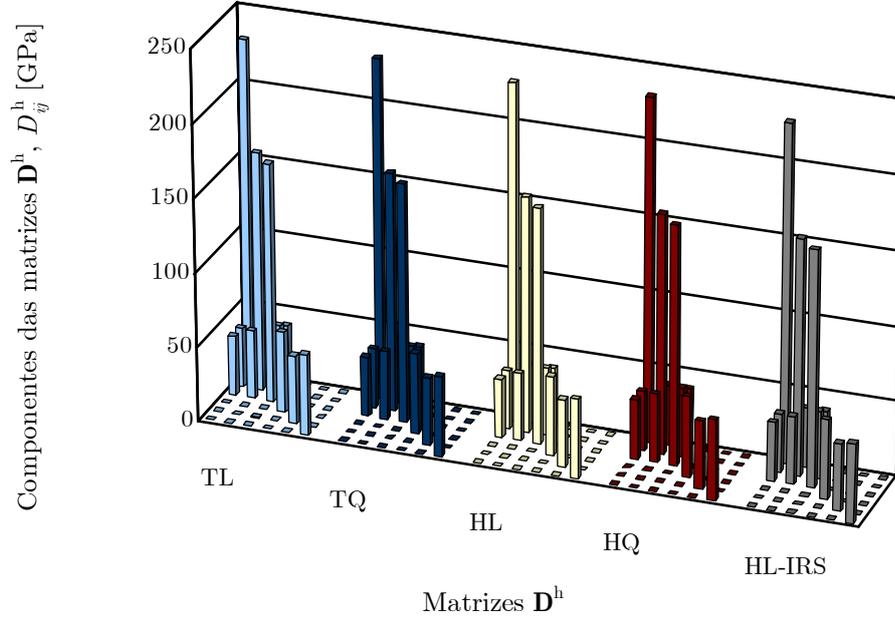


Figura 9.7: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com os vários tipos de elementos finitos, para uma célula representativa unitária de material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de boro (47% vol.).

A inversão da matriz (não-singular) de elasticidade \mathbf{D}^h resulta na matriz homogeneizada de flexibilidade⁵

$$\mathbf{S}^h = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{11}} & \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{1}{E_{22}} & \frac{-\nu_{23}}{E_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{-\nu_{23}}{E_{22}} & \frac{1}{E_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix}, \quad (9.3)$$

em que E_{11} e E_{22} são os módulos de elasticidade longitudinal na direcção das fibras e na direcção transversal às fibras, respectivamente. G_{12} , ν_{12} , G_{23} e ν_{23} são os módulos de corte (*i.e.* de elasticidade transversal) e os coeficientes de Poisson associados às direcções 1 e 2, e 2 e 3, respectivamente.

A consideração das componentes da matriz homogeneizada de flexibilidade associada à análise numérica realizada com a malha de elementos finitos tetraédricos lineares, por exemplo, permite obter as propriedades elásticas do material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas

⁵Note-se que para o material tetragonal considerado se tem que $E_{33} = E_{22}$, $G_{13} = G_{12}$ e $\nu_{13} = \nu_{12}$, sendo o material caracterizado por apenas 6 propriedades independentes: E_{11} , E_{22} , G_{12} , G_{23} , ν_{12} e ν_{23} . Refira-se que, atendendo ao facto de estas propriedades corresponderem, em termos macroscópicos, a valores homogeneizados, os seus índices superiores h foram omitidos por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade.

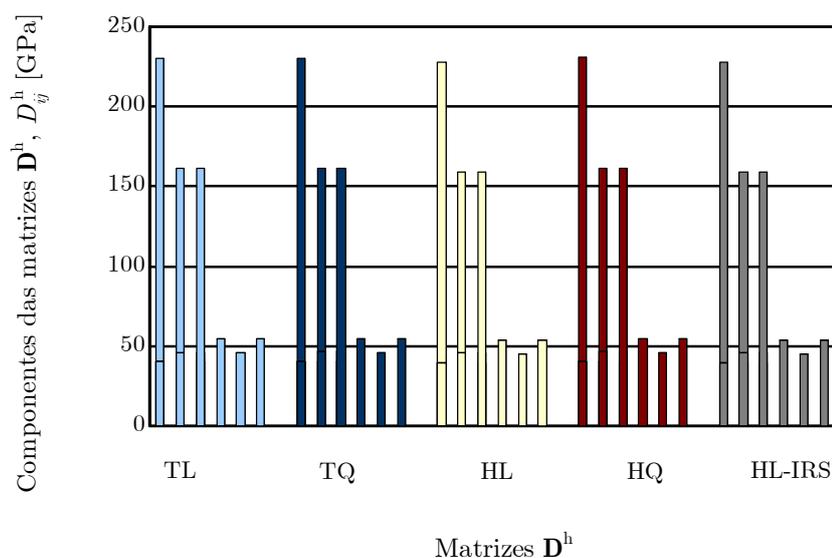


Figura 9.8: Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com os vários tipos de elementos finitos, para uma célula representativa unitária de material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidirecionais e contínuas de boro (47% vol.).

unidirecionais e contínuas de boro. Estas propriedades são apresentadas na tabela 9.3, em conjunto não só com resultados de previsão numérica (PN) e de previsão analítica (PA) mas também com resultados experimentais (RE) [Kenaga *et al.* 1987]. Em relação aos resultados de previsão, refira-se que Xia *et al.* [Xia *et al.* 2003] apresentaram resultados de previsão numérica obtidos a partir da combinação do método dos elementos finitos com condições explícitas de periodicidade formuladas com base nos trabalhos de modelação micromecânica desenvolvidos por Suquet [Suquet 1987]. Sun e Vaidya [Sun e Vaidya 1996] apresentaram resultados de previsão numérica obtidos com base na conjugação de princípios de equivalência de energia de deformação com o método de elementos finitos. Por outro lado, os resultados de previsão analítica de Whitney e Riley [Whitney e Riley 1966] baseiam-se na utilização de metodologias de balanço energético recorrendo à teoria clássica de elasticidade. Por fim, os resultados de previsão analítica de Sun e Chen [Sun e Chen 1991] e de Chamis [Chamis 1984] correspondem a soluções analíticas baseadas em modelos micromecânicos envolvendo condições de continuidade de deslocamentos e de equilíbrio de forças.

Tabela 9.3: Resultados obtidos por previsão numérica, por previsão analítica e de modo experimental, para as propriedades elásticas do material compósito de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidirecionais e contínuas de boro (47% vol.).

Resultados	E_{11} [GPa]	E_{22} [GPa]	G_{12} [GPa]	G_{23} [GPa]	ν_{12} [-]	ν_{23} [-]
PN — HEA	214,6	144,5	54,7	46,2	0,19	0,25
PN — Xia <i>et al.</i>	214	143	54,2	45,7	0,195	0,253
PN — Sun e Vaidya	215	144	57,2	45,9	0,19	0,29
PA — Sun e Chen	214	135	51,1	—	0,19	—
PA — Chamis	214	156	62,6	43,6	0,20	0,31
PA — Whitney e Riley	215	123	53,9	—	0,19	—
RE — Kenaga <i>et al.</i>	216	140	52	—	0,29	—

Verifica-se que os resultados obtidos com base no método de homogeneização por expansão assintótica aproximam de modo satisfatório os resultados obtidos experimentalmente. De facto, os valores obtidos para as propriedades E_{11} , E_{22} e G_{12} diferem, em valor absoluto, apenas 0,6%, 3,2% e 5,2% dos respectivos valores experimentais. Embora se verifique uma diferença de 34,5% entre o valor de ν_{12} obtido de modo experimental e de modo numérico, constata-se que a melhor aproximação de ν_{12} (Chamis) corresponde uma diferença de 31%. Atenda-se a que as discrepâncias existentes entre os resultados obtidos e os resultados experimentais podem ser relacionadas com o facto de na modelação numérica efectuada não se terem considerado aspectos como, por exemplo, a não-regularidade da disposição das fibras de reforço, a existência de defeitos no seio do material compósito, a aderência imperfeita entre fibra e matriz, etc. Neste contexto, os resultados obtidos numericamente podem ser considerados como estimativas válidas e aceitáveis das propriedades mecânicas (macroestruturais) do material compósito em análise.

Em comparação com os restantes métodos de previsão, constata-se que os resultados numéricos obtidos para E_{11} e ν_{12} são aqueles a que, em valor absoluto, correspondem menores discrepâncias, verificando-se diferenças relativas máximas de 0,28% (*e.g.* Xia *et al.*) e de 5% (Chamis), respectivamente. Por outro lado, as maiores discrepâncias encontram-se associadas à previsão dos valores de E_{22} e ν_{23} , a que, em valor absoluto, correspondem diferenças relativas de 17,5% (Whitney e Riley) e de 19,4% (Chamis), respectivamente.

Por fim, atenda-se ao facto de, no contexto do método da homogeneização por expansão assintótica, as propriedades homogeneizadas serem obtidas recorrendo ao corrector do campo de deslocamentos χ (*vd.* equação 8.12). Os deslocamentos característicos definidos pelo corrector fornecem uma medida da heterogeneidade da microestrutura do material compósito [Chung 1999].

Nas figuras 9.9 e 9.10 estão representados os 6 modos próprios de deformação χ_{kl} , associados aos deslocamentos característicos da célula representativa unitária para as malhas de elementos finitos tetraédricos e hexaédricos, respectivamente. Os deslocamentos característicos definidos pelas colunas de χ consistem nas (seis) soluções de um sistema de equações em que os vectores de força correspondem às (seis) colunas da matriz \mathbf{F}^D (*vd.* equação 8.5), denominados vectores das solicitações mecânicas características (*vd.* figuras 9.11 e 9.12). Verifica-se que a utilização de malhas estruturadas dá origem, devido à sua natureza intrinsecamente regular, a campos de deslocamento característico que se manifestam, na superfície da célula representativa unitária, de um modo não só preciso mas também pleno de minuciosos detalhes (*cf.* figura 9.10g). Pelo contrário, a utilização de malhas não-estruturadas dá origem, devido à sua natureza não-regular e não-homogénea, a campos de deslocamento característico que se revelam, na superfície da célula representativa unitária, mais difusos. Este facto leva a que, no caso de os gradientes de um determinado campo de deslocamento característico serem numericamente irrelevantes, as particularidades da sua variação sejam realçadas aquando da utilização de malhas estruturadas e praticamente dissimuladas no caso de se utilizarem malhas não-estruturadas. Esta situação pode ser observada quando se comparam os campos do deslocamento característico χ_{11} obtidos por meio de malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos (*vd.* figuras 9.9a e 9.9g) com os de malhas estruturadas de elementos finitos hexaédricos (*vd.* figuras 9.10a e 9.10g). Este facto não se manifesta veementemente no valor numérico da matriz \mathbf{D}^h visto esta corresponder, tal como foi já referido, a uma média volúmica das propriedades materiais da microescala afectadas pelos gradientes dos deslocamentos característicos.

O facto de as propriedades elásticas homogeneizadas obtidas com as diferentes malhas de elementos finitos convergirem para valores idênticos significa que o procedimento de homogeneização por expansão assintótica conduz a correctores χ representativos das mesmas heterogeneidades, apesar de as malhas corresponderem a distintos modos de discretização do domínio espacial da célula representativa unitária. Por sua vez, a periodicidade na microescala (Y-periodicidade) dos deslocamentos característicos da célula representativa unitária é ilustrada, para o caso particular do modo de corte χ_{23} , na figura 9.13, para 8 células representativas unitárias modeladas com malhas de elementos finitos tetraédricos (a) lineares e (b) quadráticos, e elementos finitos hexaédricos (c) lineares e (d) quadráticos. Mais uma vez, verifica-se haver coerência entre os resultados obtidos com malhas de elementos finitos não-estruturadas e estruturadas, quer lineares quer quadráticas.

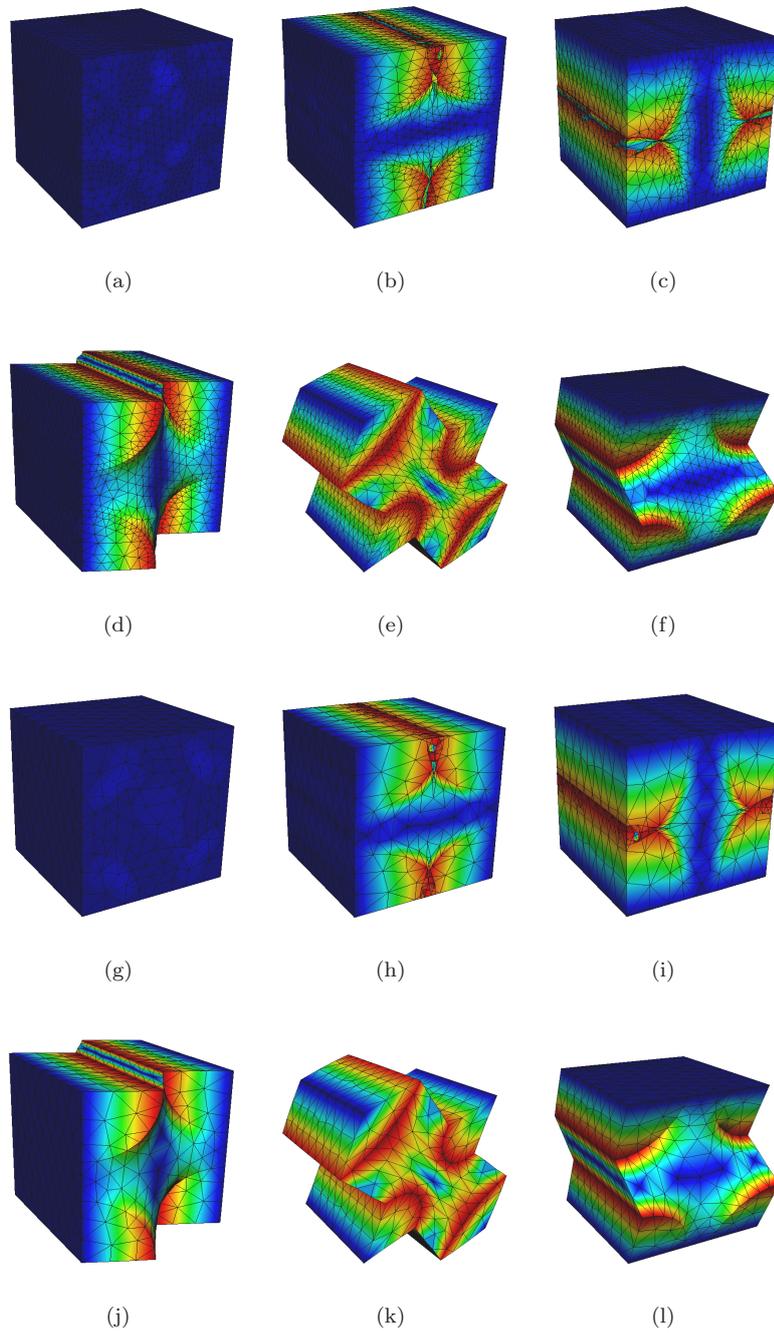


Figura 9.9: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos tetraédricos lineares — modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} e (c) χ_{33} , e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} e (f) χ_{13} , e para elementos finitos tetraédricos quadráticos — modos normais (g) χ_{11} , (h) χ_{22} e (i) χ_{33} , e modos de corte (j) χ_{12} , (k) χ_{23} e (l) χ_{13} .

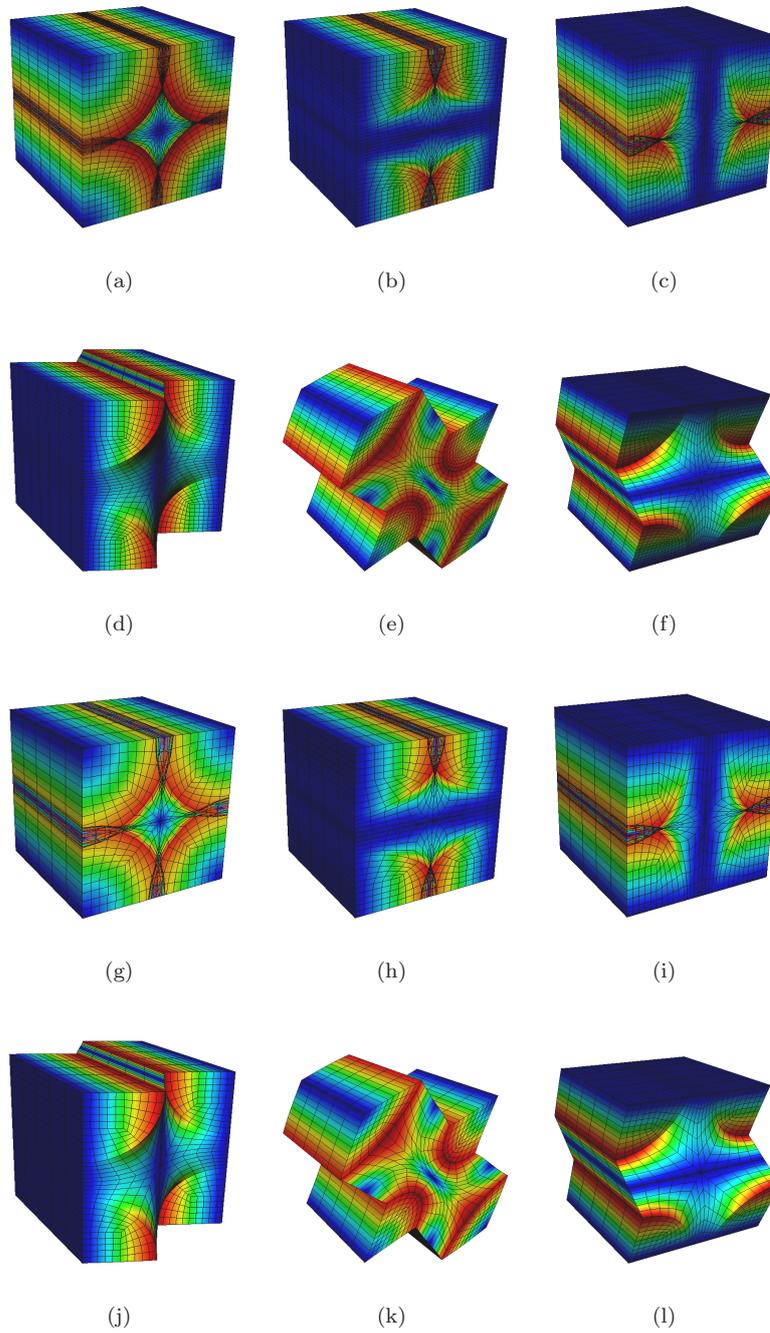


Figura 9.10: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos hexaédricos lineares — modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} e (c) χ_{33} , e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} e (f) χ_{13} , e para elementos finitos hexaédricos quadráticos — modos normais (g) χ_{11} , (h) χ_{22} e (i) χ_{33} , e modos de corte (j) χ_{12} , (k) χ_{23} e (l) χ_{13} .

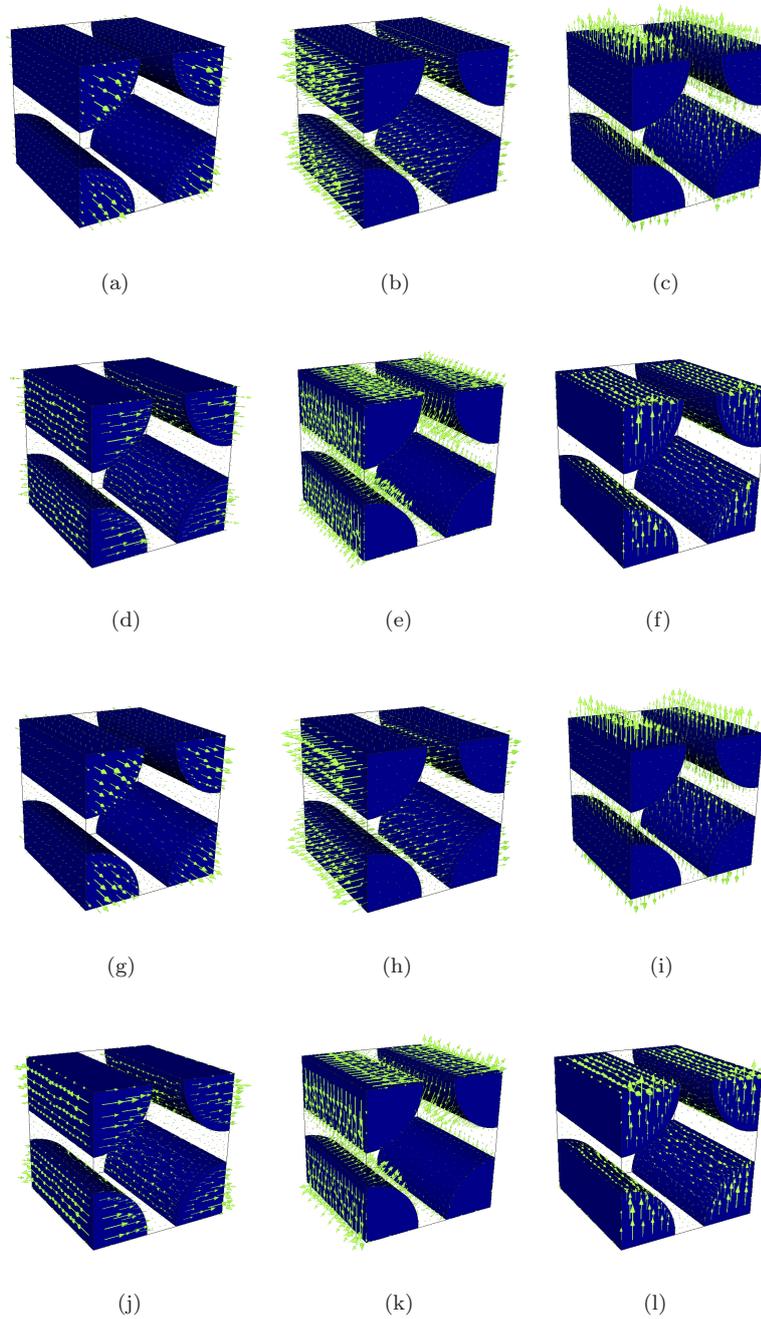


Figura 9.11: Vectors das solicitações mecânicas características da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos tetraédricos lineares — modos normais (a) \mathbf{F}_{11}^D , (b) \mathbf{F}_{22}^D e (c) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (d) \mathbf{F}_{12}^D , (e) \mathbf{F}_{23}^D e (f) \mathbf{F}_{13}^D , e para elementos finitos tetraédricos quadráticos — modos normais (g) \mathbf{F}_{11}^D , (h) \mathbf{F}_{22}^D e (i) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (j) \mathbf{F}_{12}^D , (k) \mathbf{F}_{23}^D e (l) \mathbf{F}_{13}^D .

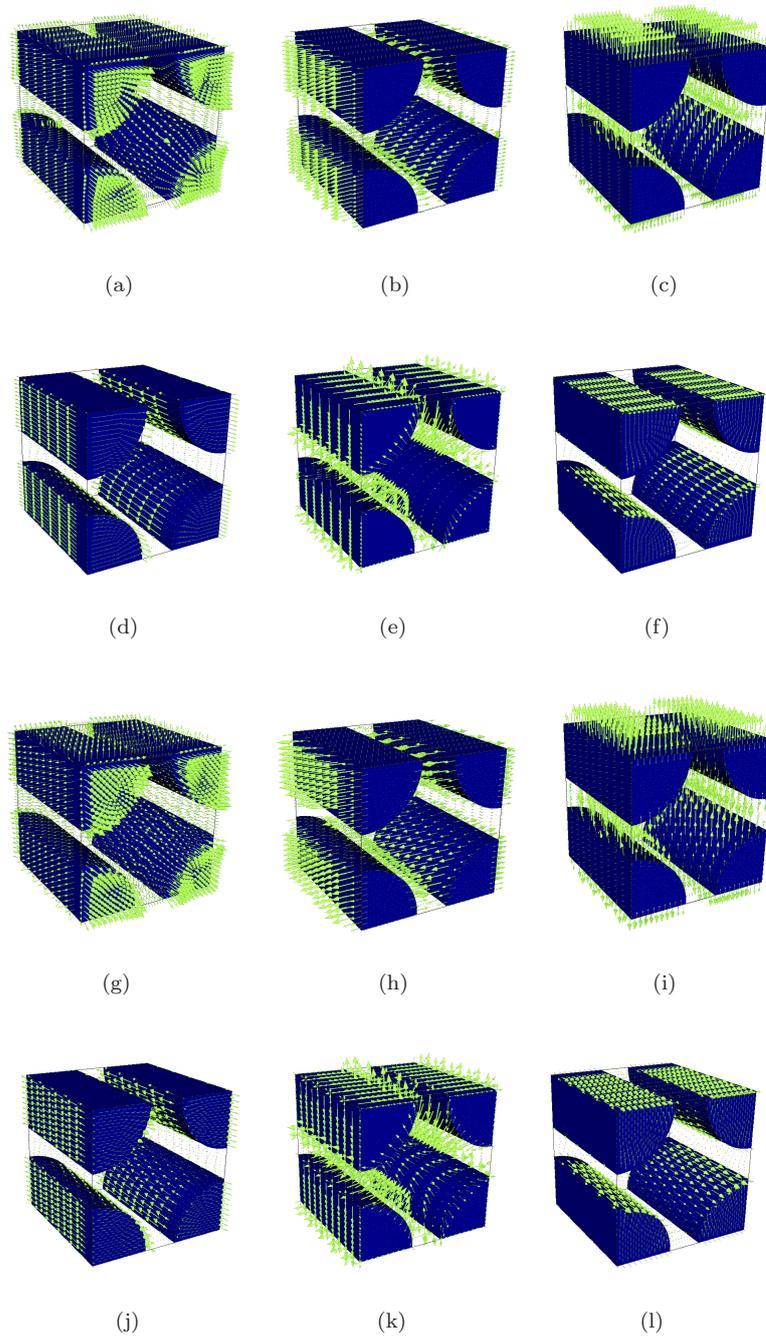


Figura 9.12: Vectors das solicitações mecânicas características da célula representativa unitária de material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras contínuas de boro, para elementos finitos hexaédricos lineares — modos normais (a) \mathbf{F}_{11}^D , (b) \mathbf{F}_{22}^D e (c) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (d) \mathbf{F}_{12}^D , (e) \mathbf{F}_{23}^D e (f) \mathbf{F}_{13}^D , e para elementos finitos hexaédricos quadráticos — modos normais (g) \mathbf{F}_{11}^D , (h) \mathbf{F}_{22}^D e (i) \mathbf{F}_{33}^D , e modos de corte (j) \mathbf{F}_{12}^D , (k) \mathbf{F}_{23}^D e (l) \mathbf{F}_{13}^D .

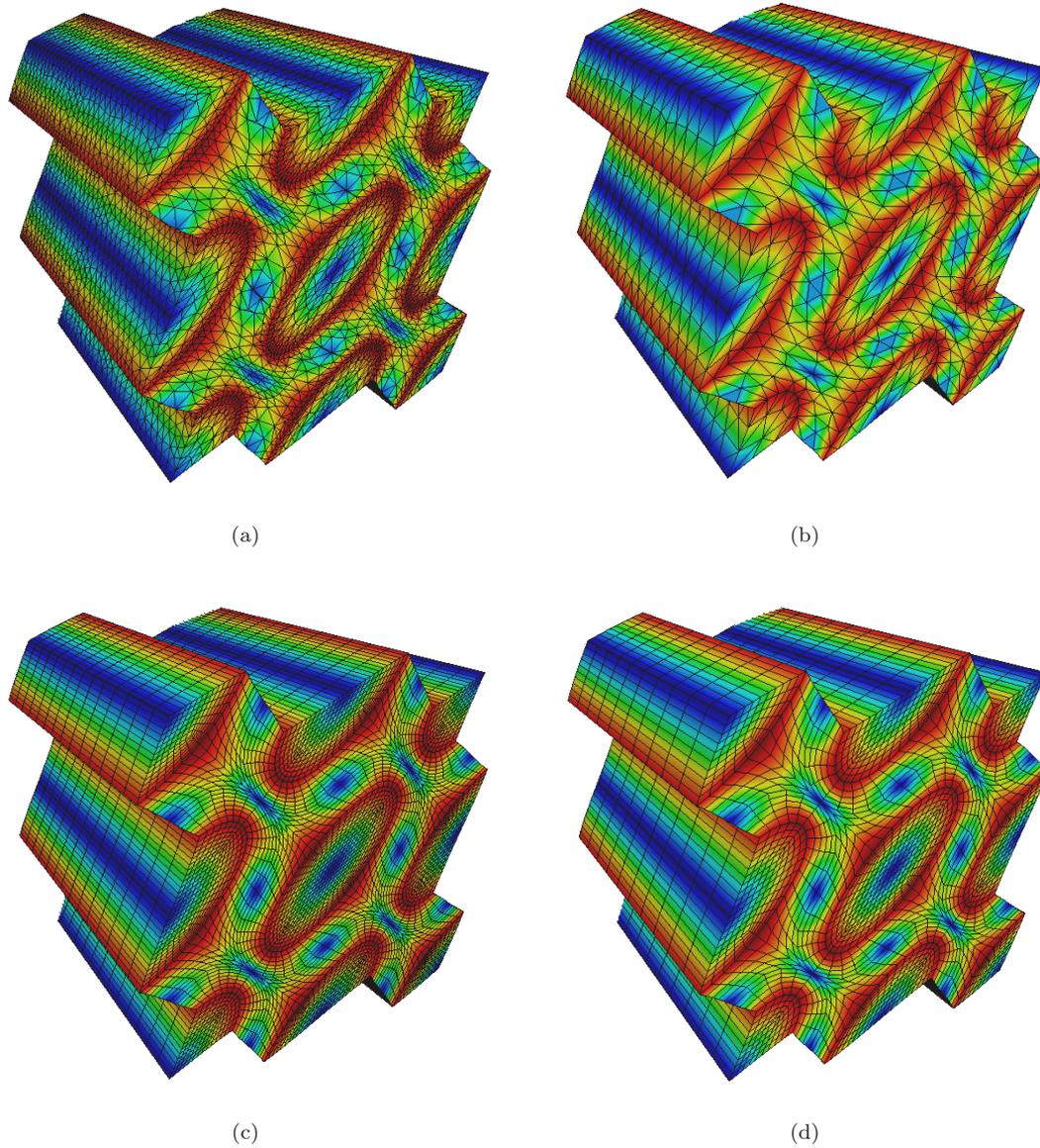


Figura 9.13: Y-periodicidade dos deslocamentos característicos — ilustração do modo de corte χ_{12} utilizando 8 células representativas unitárias com malhas de elementos finitos tetraédricos (a) lineares e (b) quadráticos, e de elementos finitos hexaédricos (c) lineares e (d) quadráticos.

9.1.2 Propriedades Mecânicas de Materiais Compósitos de Fibras Contínuas

Na presente secção procede-se à análise da influência da fracção volúmica de reforço de um material compósito reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas (*vd.* figura 9.1). Com base no estudo efectuado na Secção 9.1.1, utilizam-se malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos lineares na modelação de células representativas unitárias. Procede-se, ainda, à previsão analítica de resultados. Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica são comparados com resultados experimentais. Consideram-se para materiais da matriz e do reforço do material compósito a resina epóxida e o vidro, respectivamente. As suas propriedades mecânicas elásticas encontram-se indicadas na tabela 9.1 [Tsai 1964].

Tabela 9.4: Propriedades elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de resina epóxida reforçado com fibras contínuas de vidro.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade da matriz, E_m [GPa]	3,45
Coefficiente de Poisson da matriz, ν_m [-]	0,35
Módulo de elasticidade do reforço, E_r [GPa]	73,08
Coefficiente de Poisson do reforço, ν_r [-]	0,22

Na presente análise consideram-se fracções volúmicas de reforço de 10% a 75%. Atenda-se ao facto de, no caso de uma malha regular de natureza quadrada (*vd.* figura 9.1), à fracção volúmica de reforço corresponder um valor-limite⁶ $\frac{\Pi}{4} \approx 78,5\%$. Neste contexto, procedendo a um estudo de convergência da matriz \mathbf{D}^h para cada uma das fracções volúmicas de reforço consideradas (*cf.* Secção 9.1.1), obtêm-se as malhas associadas a soluções admissíveis. Na figura 9.14 encontram-se ilustradas as geometrias e as malhas de elementos finitos obtidas, para as várias fracções volúmicas de reforço consideradas, com base nos estudos de convergência efectuados. Na tabela 9.5 apresentam-se as características das referidas malhas de elementos finitos.

Tabela 9.5: Características numéricas das malhas de elementos finitos utilizadas no estudo de convergência, para o material compósito de matriz de resina epóxida reforçado com fibras contínuas de vidro.

Referência da malha	Número de nós	Número de elementos
MR-10	7 901	40 877
MR-20	7 953	41 095
MR-30	7 927	40 547
MR-40	7 933	40 915
MR-50	7 918	40 679
MR-60	8 027	41 188
MR-70	8 040	41 319
MR-75	8 129	41 724

As matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com as malhas de elementos finitos apresentadas na figura 9.14 encontram-se ilustradas de forma esquemática nas figuras 9.15 e 9.16. Nestas figuras pode observar-se, de acordo com a equação 9.2, o carácter tetragonal do material compósito de resina epóxida reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de vidro.

⁶Na literatura anglo-saxónica este valor-limite é usualmente denominado *percolation limit*.

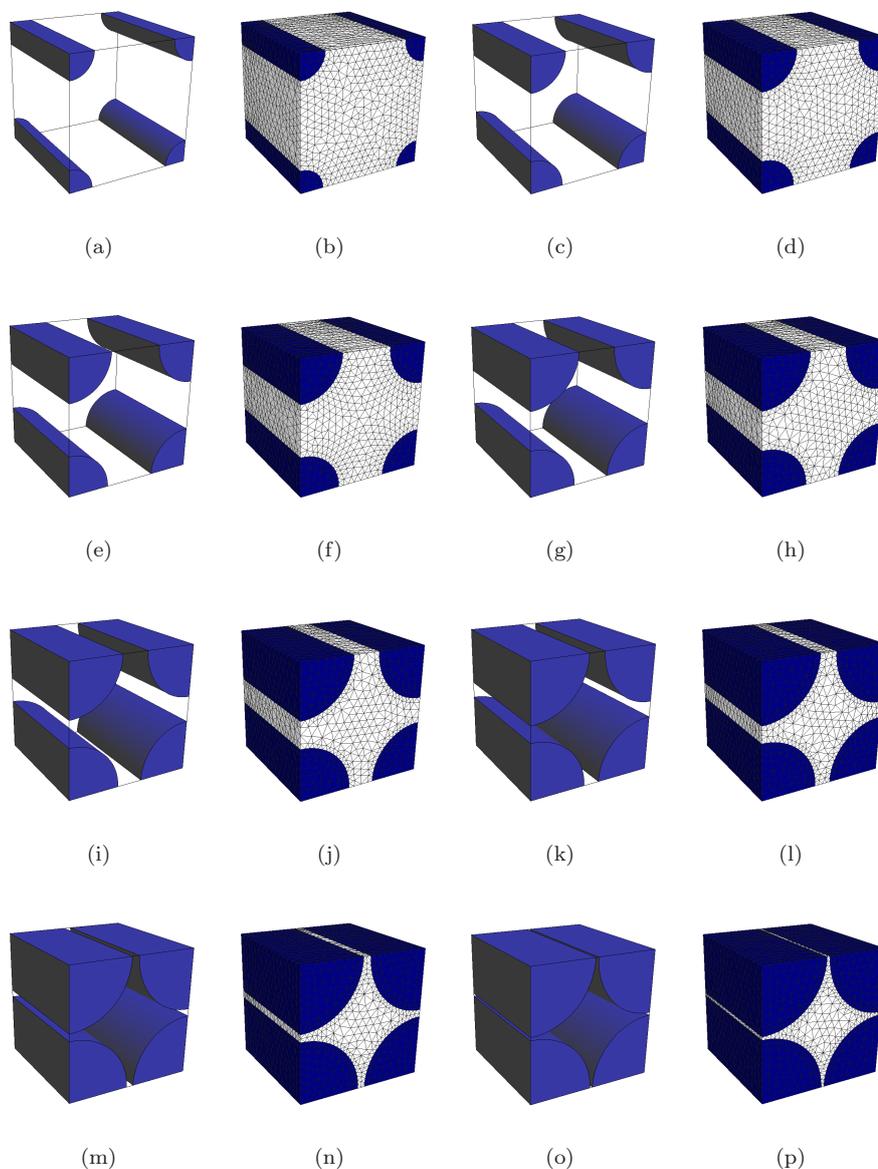


Figura 9.14: Células representativas unitárias do material compósito de matriz de resina epóxida reforçado com fibras contínuas de vidro — geometrias para fracções volúmicas de (a) 10%, (c) 20% (e) 30% (g) 40% (i) 50%, (k) 60%, (m) 70% e (o) 75% de reforço, e malhas de elementos finitos tetraédricos lineares para fracções volúmicas de (b) 10%, (d) 20% (f) 30% (h) 40% (j) 50%, (l) 60%, (n) 70% e (p) 75% de reforço.

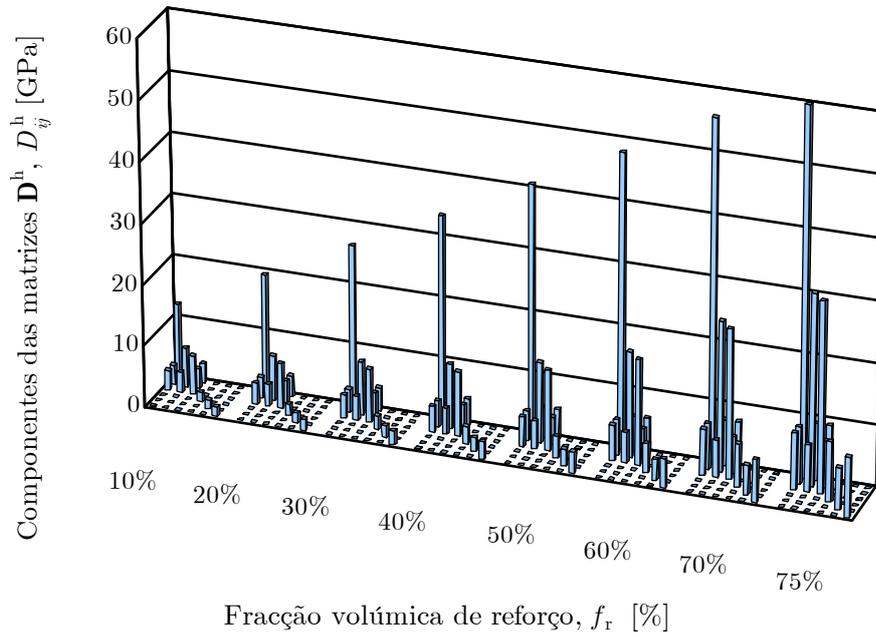


Figura 9.15: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h de células representativas unitárias de matriz de resina epóxida, para diferentes fracções volúmicas de reforço de fibras contínuas de vidro.

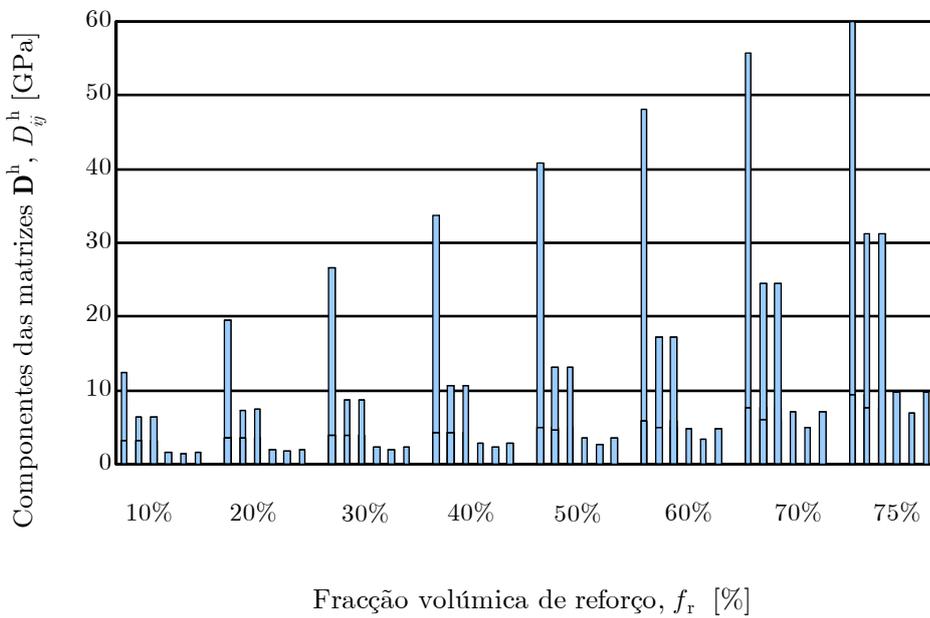


Figura 9.16: Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h de células representativas unitárias de matriz de resina epóxida, para diferentes fracções volúmicas de reforço de fibras contínuas de vidro.

As propriedades elásticas do material compósito de resina epóxida reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas de vidro são obtidas com base na inversão da matriz (não-singular) de elasticidade \mathbf{D}^h (cf. equação 9.3). Por outro lado, os resultados de previsão analítica obtêm-se, no presente trabalho, com base em dois tipos distintos de expressões da micromecânica: (i) as leis das misturas e das misturas inversas e (ii) as equações de Halpin-Tsai [Ashton *et al.* 1969].

De acordo com a teoria das misturas [Hull e Clyne 1996], os valores macroscópicos do módulo de elasticidade longitudinal na direcção das fibras E_{11} e do coeficiente de Poisson ν_{12} são dados pelas leis das misturas

$$E_{11} = E_r f_r + E_m (1 - f_r) \quad e \quad (9.4)$$

$$\nu_{12} = \nu_r f_r + \nu_m (1 - f_r). \quad (9.5)$$

Por outro lado, os valores macroscópicos do módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras E_{22} e do módulo de elasticidade transversal G_{12} são dados pelas leis das misturas inversas

$$E_{22} = \frac{E_r E_m}{(1 - f_r) E_r + f_r E_m} \quad e \quad (9.6)$$

$$G_{12} = \frac{G_r G_m}{(1 - f_r) G_r + f_r G_m}. \quad (9.7)$$

As equações 9.4 a 9.7 correspondem a expressões simplificadas que são obtidas a partir de modelos aproximados baseados na Resistência de Materiais.

No que concerne às equações de Halpin-Tsai, a sua forma para E_{22} corresponde a

$$E_{22} = E_m \frac{1 + \xi_1 \eta_1 f_r}{1 - \eta_1 f_r}, \quad (9.8)$$

em que

$$\eta_1 = \frac{E_r - E_m}{E_r + \xi_1 E_m}, \quad (9.9)$$

sendo $\xi_1 = 2$ para fibras cilíndricas dispostas em malha quadrada. Para G_{12} , a equação de Halpin-Tsai corresponde a

$$G_{12} = G_m \frac{1 + \xi_2 \eta_2 f_r}{1 - \eta_2 f_r}, \quad (9.10)$$

em que

$$\eta_2 = \frac{G_r - G_m}{G_r + \xi_2 G_m}, \quad (9.11)$$

com $\xi_2 = 1$ para fibras cilíndricas dispostas em malha quadrada. Por sua vez, as equações de Halpin-Tsai para E_{11} e ν_{12} coincidem com as leis das misturas 9.4 e 9.5. No entanto, atenda-se ao facto de que estas equações podem ser representadas por

$$E_{11} = E_m \frac{1 + \xi^* \eta^* f_r}{1 - \eta^* f_r} \quad e \quad (9.12)$$

$$\nu_{12} = \nu_m \frac{1 + \xi^* \eta^* f_r}{1 - \eta^* f_r}, \quad (9.13)$$

respectivamente, em que

$$\eta^* = \frac{E_r - E_m}{E_r + \xi^* E_m} \quad (9.14)$$

e $\xi^* = +\infty$. Refira-se que a consideração de $\xi^* = 0$ nas equações 9.12 a 9.14 daria origem, por sua vez, a leis das misturas inversas para E_{11} e ν_{12} .

As equações de Halpin-Tsai foram originalmente desenvolvidas com base nos trabalhos desenvolvidos por Hermans [Hermans 1967] e Hill [Hill 1963, Hill 1964], que se relacionavam com o desenvolvimento de um modelo autoconsistente para materiais compósitos reforçados com fibras contínuas [Halpin e Kardos 1976]. Em geral, verifica-se que as equações 9.8 e 9.10 dão origem a previsões que subestimam os valores de E_{22} e G_{12} para elevadas fracções volúmicas de reforço (*e.g.* $f_r = 70\%$) [Halpin e Kardos 1976]. Neste contexto, Hewitt e de Malherbe [Hewitt e de Malherbe 1970] propuseram que os coeficientes $\xi_1 = 2$ e $\xi_2 = 1$ das referidas equações fossem substituídos pelas relações

$$\xi_1 = 2 + 40f_r^{10} \quad \text{e} \quad (9.15)$$

$$\xi_2 = 1 + 40f_r^{10}, \quad (9.16)$$

respectivamente. A consideração da equação 9.15 nas expressões 9.8 e 9.9 ou da equação 9.16 nas expressões 9.10 e 9.11 resulta no que, no presente trabalho, se denomina uma equação de Halpin-Tsai corrigida.

Com base nas considerações que foram tecidas, na figura 9.17 são apresentados, em conjunto com resultados experimentais [Tsai 1964], os resultados de previsão numérica e de previsão analítica para o módulo de elasticidade longitudinal na direcção das fibras, E_{11} .

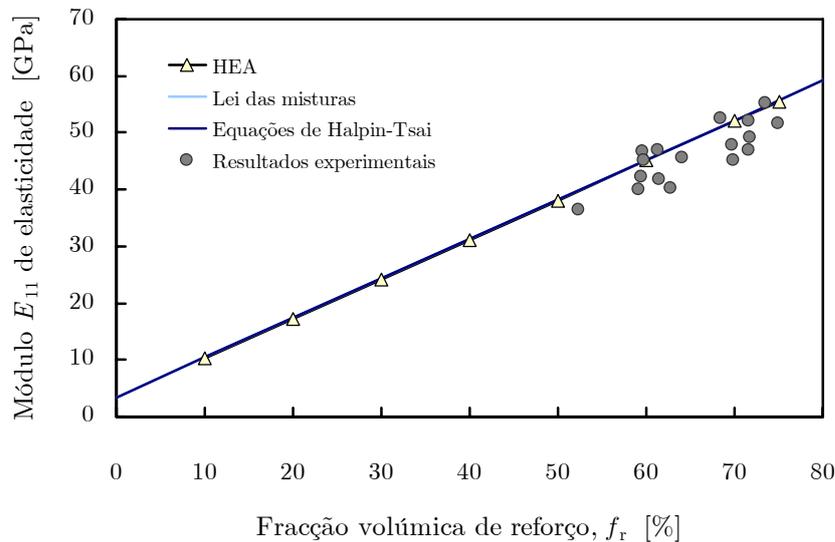


Figura 9.17: Variação do módulo de elasticidade longitudinal na direcção das fibras, E_{11} , com a fracção volúmica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias com matriz de resina epóxida.

Verifica-se que os resultados de previsão numérica coincidem com os de previsão analítica. Por outro lado, a distribuição dos resultados experimentais apresenta, em termos globais, uma tendência média a que correspondem, para os valores de fracção volúmica de reforço considerados a nível experimental (52,3% a 75,0%), valores de E_{11} cerca de 6% inferiores aos valores de previsão quer analítica quer numérica. Esta tendência pode ser explicada pelo facto de as hipóteses simplificativas previamente admitidas para os métodos de previsão, em particular as de regularidade da disposição geométrica de fibras cilíndricas no seio da matriz e de não-existência de imperfeições, resultarem numa sobrestimação da rigidez estrutural do material compósito.

Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica para o módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras, E_{22} , são apresentados, em conjunto com resultados experimentais [Tsai e Hahn 1980], na figura 9.18.

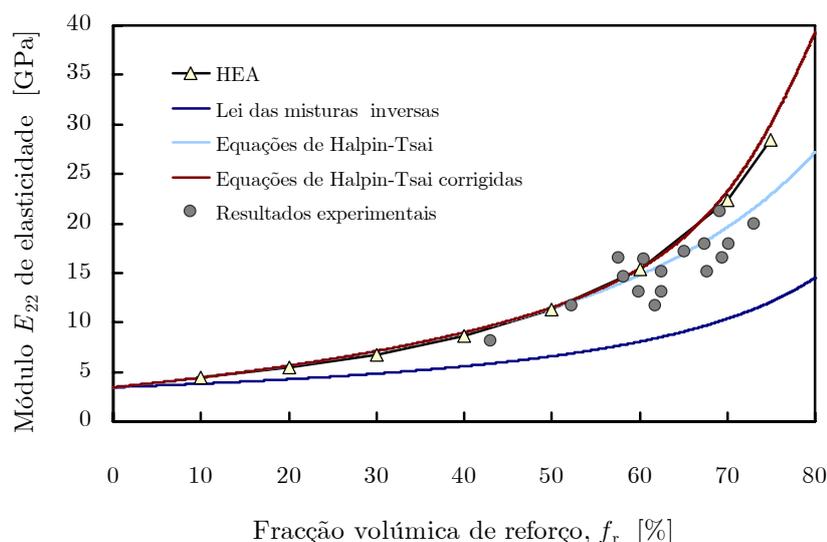


Figura 9.18: Variação do módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras, E_{22} , com a fracção volúmica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias com matriz de resina epóxida.

Mais uma vez se constata que a distribuição dos resultados experimentais apresenta, em termos globais, uma tendência média a que correspondem, para os valores de fracção volúmica de reforço considerados a nível experimental (43,1% a 73,1%), valores de E_{22} inferiores aos valores de previsão seja analítica seja numérica. Por outro lado, verifica-se que os resultados analíticos de Halpin-Tsai subestimam as previsões de E_{22} para fracções volúmicas de reforço superiores a 54,5%. No entanto, a correcção da equação 9.8 de Halpin-Tsai de acordo com a equação 9.15 resulta em previsões analíticas que praticamente coincidem com as previsões numéricas. Por outro lado, verifica-se que as previsões analíticas obtidas com base na lei das misturas inversas subestimam o valor do módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras.

Na figura 9.19 apresentam-se os resultados de previsão numérica e de previsão analítica para o módulo de corte (*i.e.* de elasticidade transversal) G_{12} , em conjunto com resultados experimentais [Tsai 1964, Whitney e Riley 1966, Greszczuk 1966, Adams e Doner 1967, Adams *et al.* 1967, Adams *et al.* 1969, Garg *et al.* 1973]. Neste caso, constata-se que as previsões analíticas obtidas com base na lei das misturas inversas subestimam o valor do módulo de elasticidade transversal G_{12} . No que concerne aos restantes resultados, verifica-se que para fracções volúmicas de reforço de 20,1% a 49,1% os resultados experimentais se encontram em conformidade com os resultados de previsão numérica e de previsão analítica. No entanto, a distribuição dos resultados experimentais apresenta, para valores superiores de fracção volúmica de reforço, uma tendência média a que correspondem valores de G_{12} superiores aos valores de previsão seja analítica seja numérica. Mais uma vez se verifica não só uma subestimação das previsões de G_{12} por parte dos resultados analíticos de Halpin-Tsai mas também que a correcção da equação 9.10 de Halpin-Tsai de acordo com a equação 9.16 leva a que, em termos numéricos, estas previsões analíticas se aproximem das previsões numéricas.

Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica para o coeficiente ν_{12} de Poisson são apresentados, em conjunto com resultados experimentais [Tsai 1964, Okoli e Smith 2000], na figura 9.20. Para as mais baixas fracções volúmicas de reforço, *i.e.* para valores de f_r inferiores a 47,1%, pode observar-se uma subestimação do coeficiente ν_{12} de Poisson por parte dos resultados de previsão analítica, observando-se o oposto para fracções volúmicas de reforço superiores. No entanto, verifica-se a existência de uma maior dispersão nos resultados experimentais para as mais

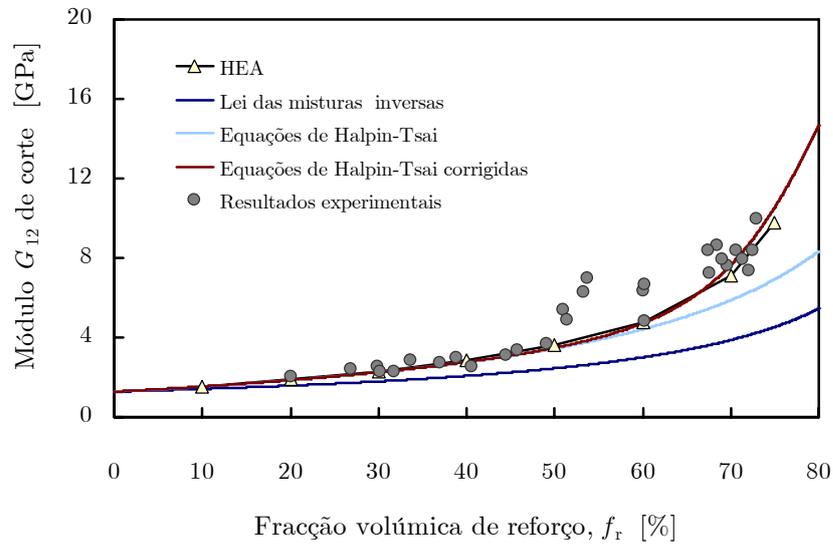


Figura 9.19: Variação do módulo G_{12} de corte (elasticidade transversal) com a fração volumica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias com matriz de resina epóxida.

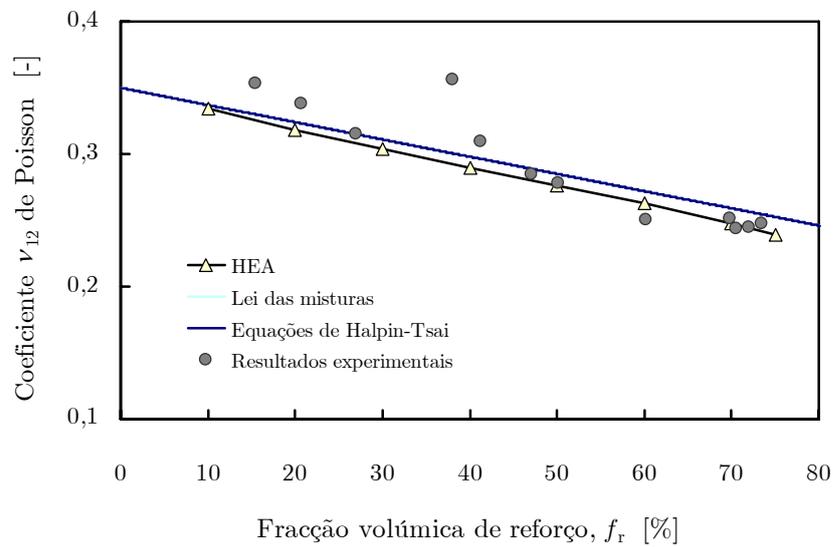


Figura 9.20: Variação do coeficiente ν_{12} de Poisson com a fração volumica de reforço de fibras contínuas de vidro, para células representativas unitárias de resina epóxida.

baixas fracções volúmicas de reforço. Por outro lado, os resultados experimentais encontram-se, para os valores de fracção volúmica de reforço não-inferiores a 47,1%, em conformidade com os resultados de previsão numérica.

9.1.3 Propriedades Mecânicas de Materiais Compósitos de Partículas Esféricas

Na presente secção analisa-se a influência da fracção volúmica de partículas esféricas de reforço nas componentes da matriz homogeneizada de elasticidade \mathbf{D}^h de um material compósito de matriz metálica. No que concerne à modelação numérica com base no método de homogeneização por expansão assintótica (HEA), utilizam-se malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos lineares para modelar as células representativas unitárias. Procedem-se à validação dos resultados numéricos obtidos para valores de módulo de elasticidade longitudinal e de coeficiente de Poisson do material compósito, recorrendo a resultados de previsão de natureza seja numérica seja analítica e, ainda, a resultados experimentais. Analisa-se, ainda, o efeito da dimensão das partículas esféricas de reforço nas componentes da matriz homogeneizada de elasticidade \mathbf{D}^h para uma fracção volúmica de reforço constante, procedendo-se, ainda, à comparação dos resultados de previsão numérica obtidos para os valores de módulo de elasticidade longitudinal e de coeficiente de Poisson do material compósito com os correspondentes resultados de previsão analítica.

Os materiais da matriz e do reforço do material compósito são o alumínio (liga AlCu4,5Mn) e o carboneto de silício (SiC), respectivamente. As suas propriedades mecânicas elásticas encontram-se indicadas na tabela 9.6 [Boller e Seeger 1987, Teixeira-Dias 1999].

Tabela 9.6: Propriedades mecânicas elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade do material da matriz, E_m [GPa]	69,1
Coefficiente de Poisson do material da matriz, ν_m [-]	0,33
Módulo de elasticidade do material do reforço, E_r [GPa]	410,0
Coefficiente de Poisson do material do reforço, ν_r [-]	0,24

As propriedades mecânicas elásticas (homogeneizadas) do material compósito são determinadas para fracções volúmicas de reforço, f_r , entre 10% e 50%, inclusive. Neste contexto, procede-se à geração aleatória⁷ de 5 células representativas unitárias para cada uma das fracções volúmicas de reforço consideradas. As geometrias das células representativas unitárias geradas encontram-se ilustradas na figura 9.21. Efectua-se, então, um estudo de convergência (*cf.* Secção 9.1.1) da matriz \mathbf{D}^h associada a cada uma das células representativas unitárias que definem o material compósito reforçado com partículas esféricas. As simulações numéricas revelam que as matrizes homogeneizadas de elasticidade \mathbf{D}^h são características de um material de natureza ortotrópica (*vd.* equação 9.1). Neste contexto, na figura 9.22 ilustra-se, a título de exemplo, a evolução, com o número de graus de liberdade, das 9 componentes significativas de \mathbf{D}^h associadas à primeira célula representativa unitária apresentada na figura 9.21a. Verifica-se que os valores das componentes significativas de \mathbf{D}^h não variam de modo acentuado com o número de graus de liberdade, o que indicia o facto de não ser necessário utilizar um número muito elevado de elementos finitos tetraédricos lineares para se obter uma aproximação razoável da matriz \mathbf{D}^h . Este facto é evidenciado na figura 9.23, onde se ilustra, para a referida célula representativa unitária, a evolução quer da norma da matriz \mathbf{D}^h quer

⁷A geração é dita aleatória no sentido em que a distribuição espacial das partículas esféricas é efectuada de modo a serem mantidas, para cada um dos valores de fracção volúmica de reforço considerados, dimensões semelhantes para as partículas esféricas (*cf.* Secção 8.3.2).

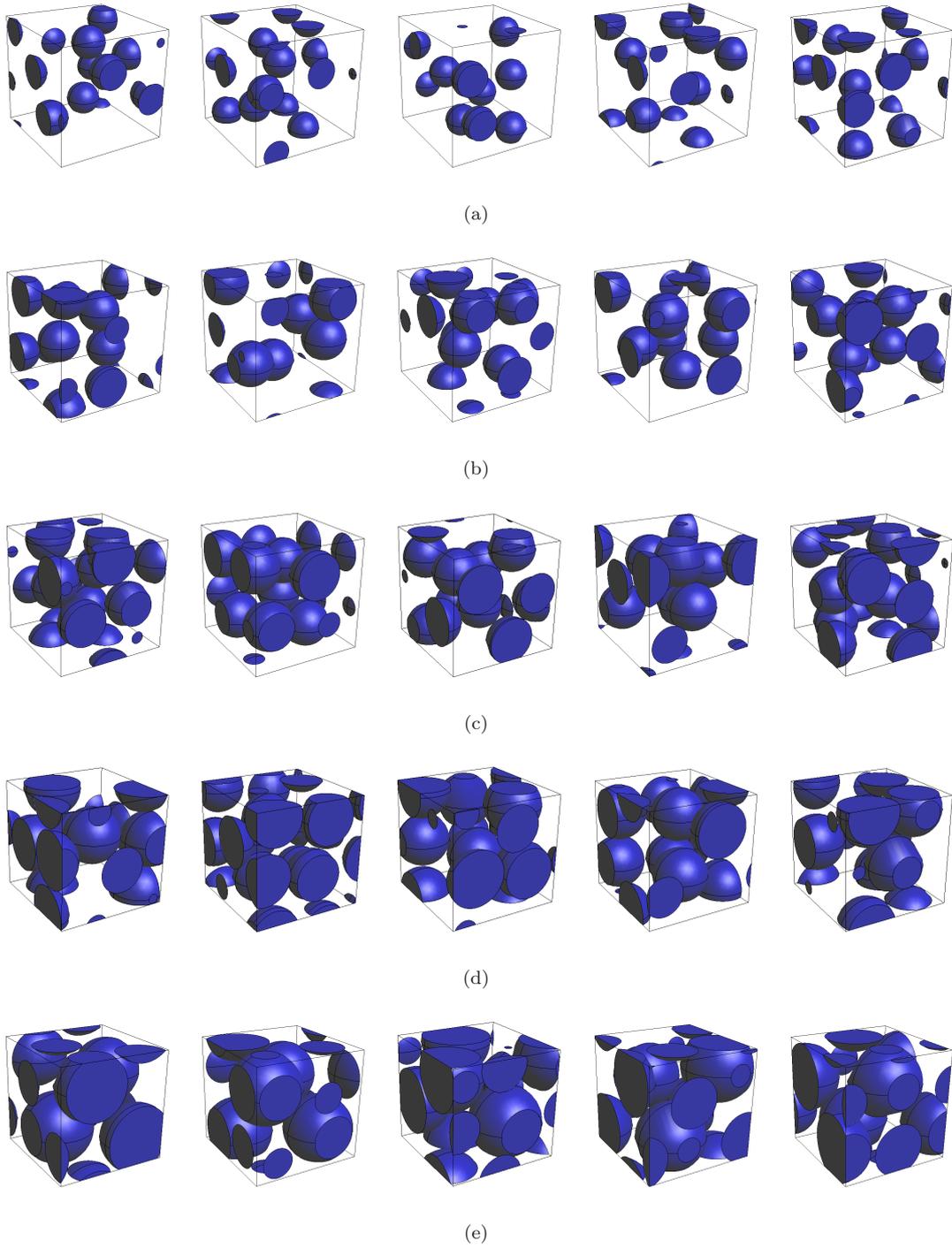


Figura 9.21: Geometrias das células representativas unitárias geradas com distribuições aleatórias de partículas esféricas, para frações volúmicas de reforço de (a) 10%, (b) 20%, (c) 30%, (d) 40% e (e) 50%.

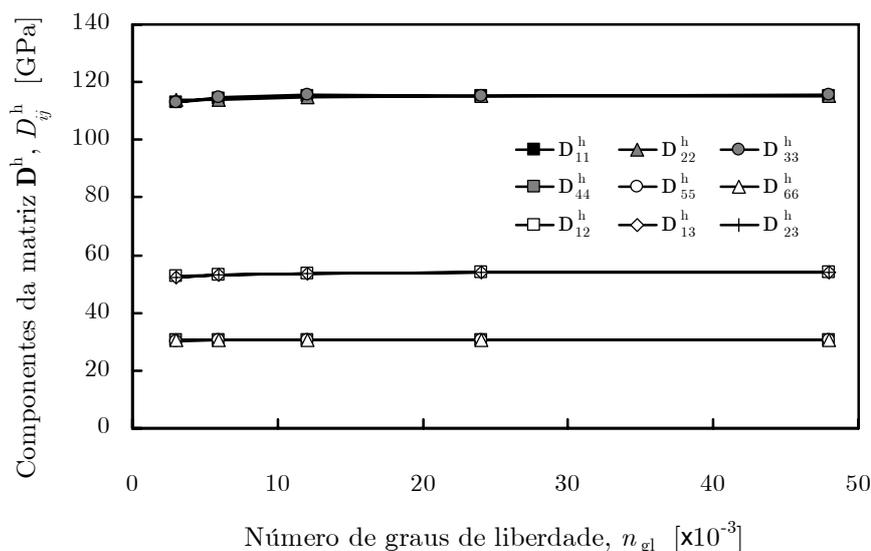


Figura 9.22: Evolução das componentes significativas de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício definido pela primeira célula representativa unitária apresentada na figura 9.21a.

da variação relativa da norma da matriz \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade. Constata-se que $\|\mathbf{D}^h\|$ apresenta uma evolução que indicia a convergência monótona do processo numérico com o refinamento da malha de elementos finitos. Além disso, atendendo a que o refinamento da malha de elementos finitos com 12 036 graus de liberdade para uma de 23 982 graus de liberdade leva a uma variação relativa da norma de \mathbf{D}^h inferior a 0,3%, considera-se que a malha constituída por 19 790 elementos finitos tetraédricos se encontra associada a uma solução admissível [Rizzo 1991]. Para as restantes células representativas unitárias foram observados comportamentos de convergência semelhantes, sendo as respectivas malhas de elementos finitos admissíveis também constituídas por cerca de 20 000 elementos finitos e de 12 000 graus de liberdade. Neste contexto, os resultados obtidos para as matrizes constitutivas \mathbf{D}^h das várias células representativas unitárias consideradas (*cf.* figura 9.21) encontram-se ilustrados nas figuras 9.24 a 9.26. Verifica-se, tal como foi já referido, que as componentes numericamente significativas das matrizes \mathbf{D}^h são as representativas de um comportamento ortotrópico. Na realidade, as restantes componentes são, no mínimo, cerca de 2 ordens de grandeza inferiores, pelo que a sua contribuição não influencia, de modo significativo, o comportamento elástico do material. Os valores mais significativos das componentes não-ortotrópicas das matrizes \mathbf{D}^h são obtidos para as fracções volúmicas de reforço mais elevadas, tal como se pode verificar, para $f_r = 50\%$, na figura 9.26.

O efeito da variação da fracção volúmica de reforço pode ser observado, em termos globais, na figura 9.27, em que se representam as componentes das várias matrizes \mathbf{D}^h previamente obtidas. Verifica-se que as componentes homónimas, *i.e.* com os mesmos índices, apresentam um crescimento proporcional, embora geralmente não-directo, à fracção volúmica de reforço. Por outro lado, constata-se que as componentes D_{11}^h , D_{22}^h e D_{33}^h diferem entre si para as várias fracções consideradas, especialmente para as fracções volúmicas de $f_r = 40\%$ e $f_r = 50\%$. Este facto exclui, *a priori*, a possibilidade das matrizes \mathbf{D}^h serem representativas do comportamento elástico de um material quer cúbico quer isotrópico [Dowling 2006]. Um material cúbico caracteriza-se pelo facto de apresentar as mesmas propriedades mecânicas segundo as três direcções de ortotropia, sendo a sua matriz constitutiva definida apenas por três parâmetros independentes: E , ν e G . Este tipo de material distingue-se do material isotrópico pelo facto de se ter que $G \neq \frac{E}{2(1+\nu)}$. No entanto, para fracções volúmicas de 10% a 30%, verifica-se, de acordo com as figuras 9.28 e 9.29, que a conside-

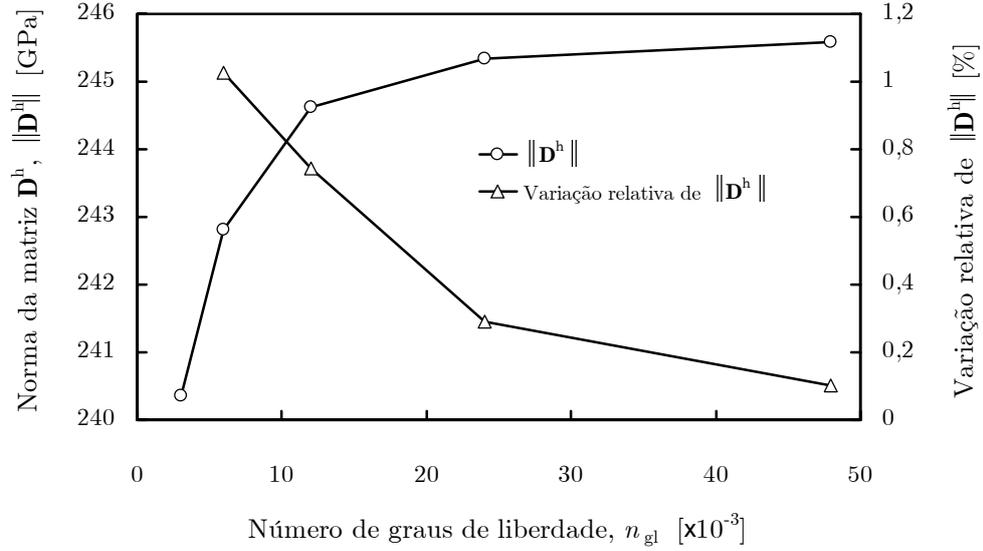


Figura 9.23: Evolução da norma de \mathbf{D}^h e da variação relativa da norma de \mathbf{D}^h com o número de graus de liberdade, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício definido pela primeira célula representativa unitária apresentada na figura 9.21a.

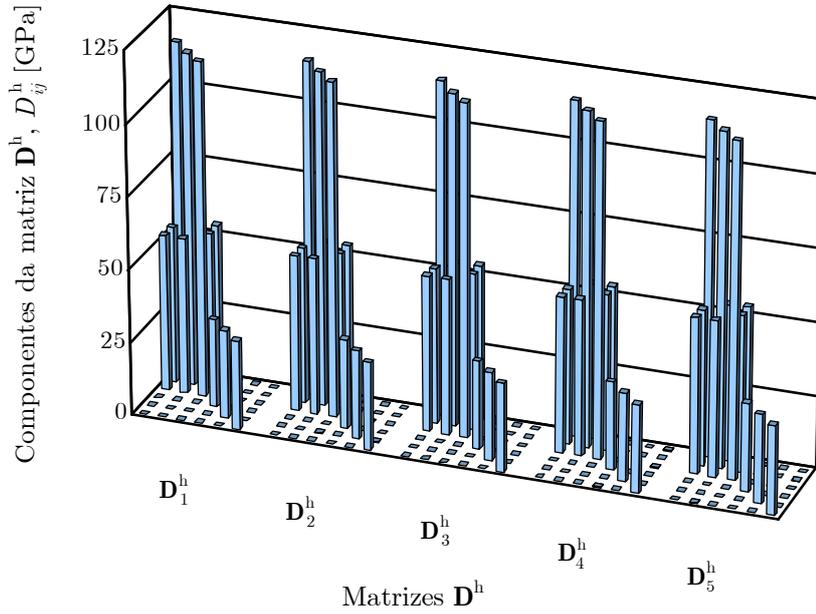
ração da média aritmética de várias matrizes \mathbf{D}^h obtidas dá origem a matrizes constitutivas que são representativas do comportamento de um material cúbico.

A inversão da matriz (não-singular) de elasticidade \mathbf{D}^h resulta, seja para um material cúbico seja para um material isotrópico, na matriz homogeneizada de flexibilidade⁸

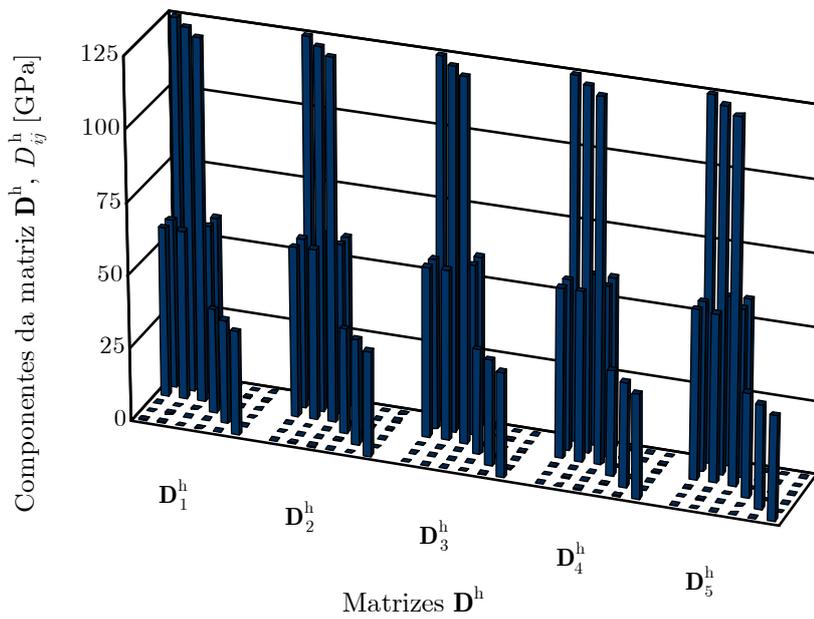
$$\mathbf{S}^h = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{bmatrix}. \quad (9.17)$$

Neste contexto, determinando as inversas das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h médias para as fracções volúmicas de reforço de 10%, 20% e 30% é possível definir univocamente os valores de E , ν e G para os respectivos materiais cúbicos. O carácter de isotropia do comportamento de cada um destes materiais pode assim ser determinado com base na diferença entre o valor do módulo de corte G obtido e o valor correspondente a um material isotrópico. Invertendo as matrizes constitutivas \mathbf{D}^h médias para as fracções volúmicas de reforço de 10%, 20% e 30%, verifica-se que os valores de G obtidos diferem $-0,23\%$, $0,41\%$ e $-3,37\%$ dos respectivos valores isotrópicos. Deste modo, pode concluir-se que as médias aritméticas das matrizes constitutivas obtidas para cada fracção volúmica de reforço apresentam um carácter que se revela isotrópico para $f_r = 10\%$ e $f_r = 20\%$, cúbico para $f_r = 30\%$ e ortotrópico para $f_r = 40\%$ e $f_r = 50\%$, embora as matrizes obtidas para as várias células representativas unitárias correspondam a comportamentos intrinsecamente ortotrópicos. No entanto, atenda-se ao facto de que, para as fracções volúmicas de reforço mais elevadas, a consideração de um número crescente de células representativas unitárias geradas aleatoriamente deverá supostamente resultar em matrizes constitutivas \mathbf{D}^h médias cujo carácter se vai aproximando do comportamento isotrópico [Pinho-da-Cruz *et al.* 2005, Oliveira 2006].

⁸Atendendo ao facto de as propriedades E , ν e G corresponderem, macroscopicamente, a valores homogeneizados, omitiram-se, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, os seus índices superiores h.

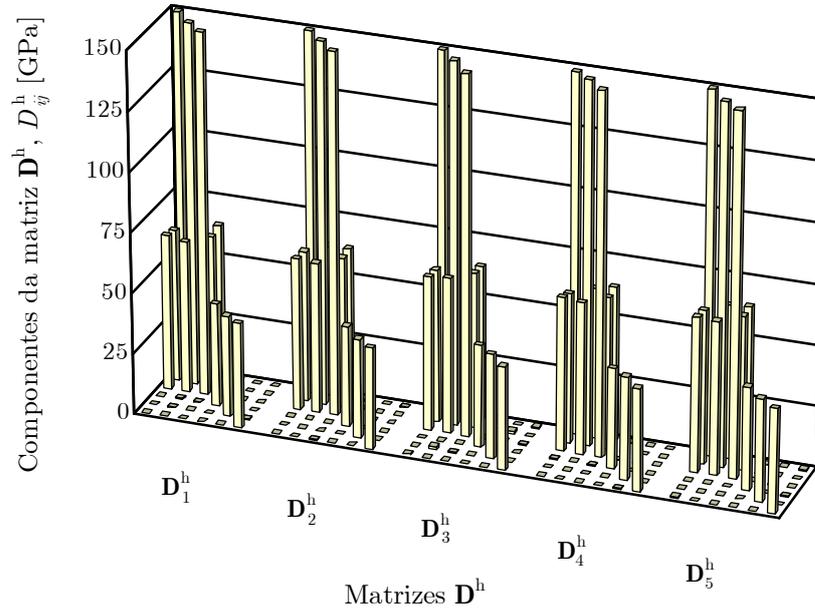


(a)

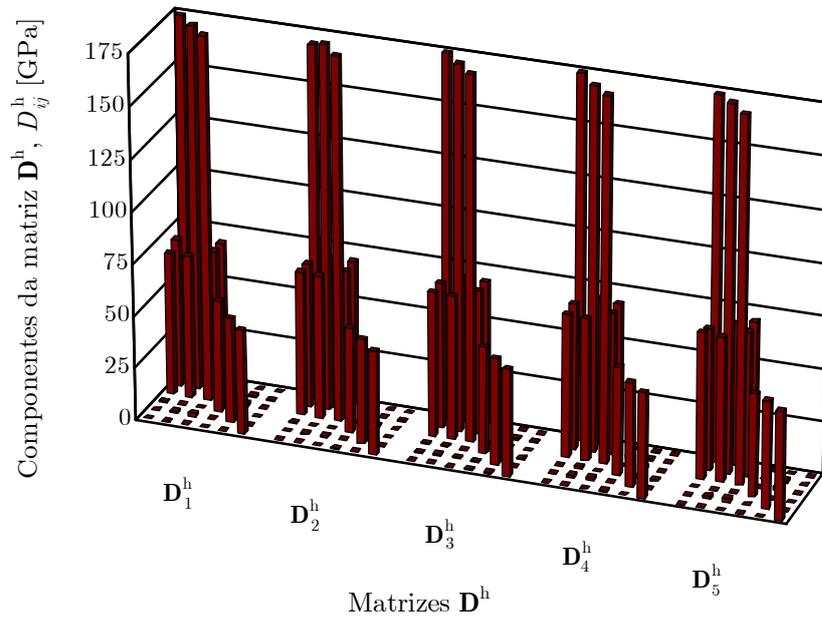


(b)

Figura 9.24: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com elementos finitos tetraédricos lineares, para cinco células representativas unitárias de material compósito de alumínio com (a) 10% e (b) 20% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.



(a)



(b)

Figura 9.25: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com elementos finitos tetraédricos lineares, para cinco células representativas unitárias de material compósito de alumínio com (a) 30% e (b) 40% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carbono de silício.

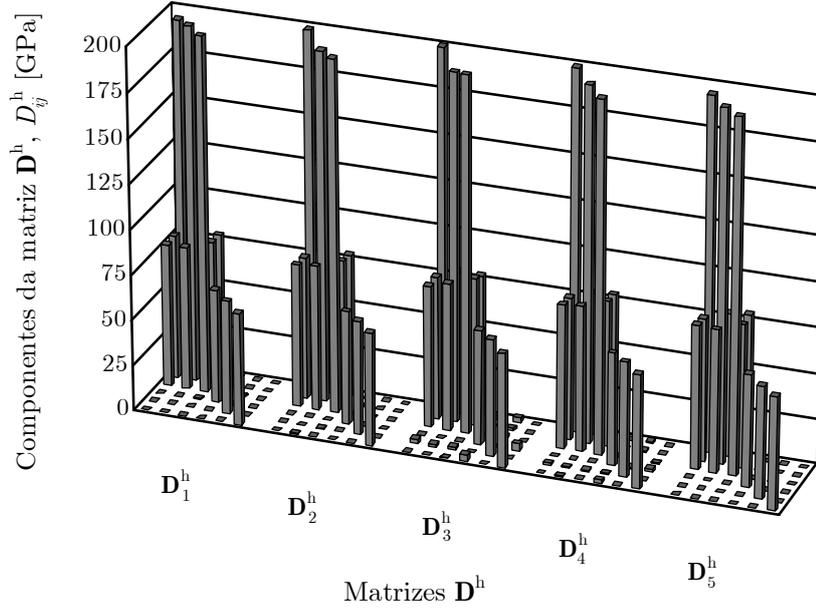


Figura 9.26: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h obtidas com elementos finitos tetraédricos lineares, para cinco células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.

Assim, constata-se que o método de homogeneização por expansão assintótica permite definir, de modo numérico, a totalidade das propriedades que definem o comportamento elástico de um material compósito. Além disso, para elevadas fracções volúmicas de reforço, a geometria da célula representativa unitária influencia de modo determinante as componentes da matriz constitutiva \mathbf{D}^h , afectando conseqüentemente o valor das referidas propriedades. Neste contexto, procede-se à comparação dos resultados de previsão numérica obtidos para o módulo de elasticidade longitudinal e o coeficiente de Poisson do material compósito com os correspondentes resultados de previsão analítica.

A previsão analítica do módulo de elasticidade longitudinal é efectuada, no presente trabalho, com base nas equações de Halpin-Tsai. As equações de Halpin-Tsai para materiais compósitos reforçados com partículas esféricas permitem estimar os módulos de incompressibilidade, κ , e de corte, G . Estas equações correspondem a [Halpin e Kardos 1976]

$$\kappa = \kappa_m \frac{1 + \xi_3 \eta_3 f_r}{1 - \eta_3 f_r} \quad \text{e} \quad (9.18)$$

$$G = G_m \frac{1 + \xi_4 \eta_4 f_r}{1 - \eta_4 f_r}, \quad (9.19)$$

em que

$$\eta_3 = \frac{\kappa_r - \kappa_m}{\kappa_r + \xi_3 E_m}, \quad (9.20)$$

$$\xi_3 = \frac{2(1 - 2\nu_m)}{1 + \nu_m}, \quad (9.21)$$

$$\eta_4 = \frac{G_r - G_m}{G_r + \xi_4 E_m} \quad \text{e} \quad (9.22)$$

$$\xi_4 = \frac{7 - 5\nu_m}{8 - 10\nu_m}. \quad (9.23)$$

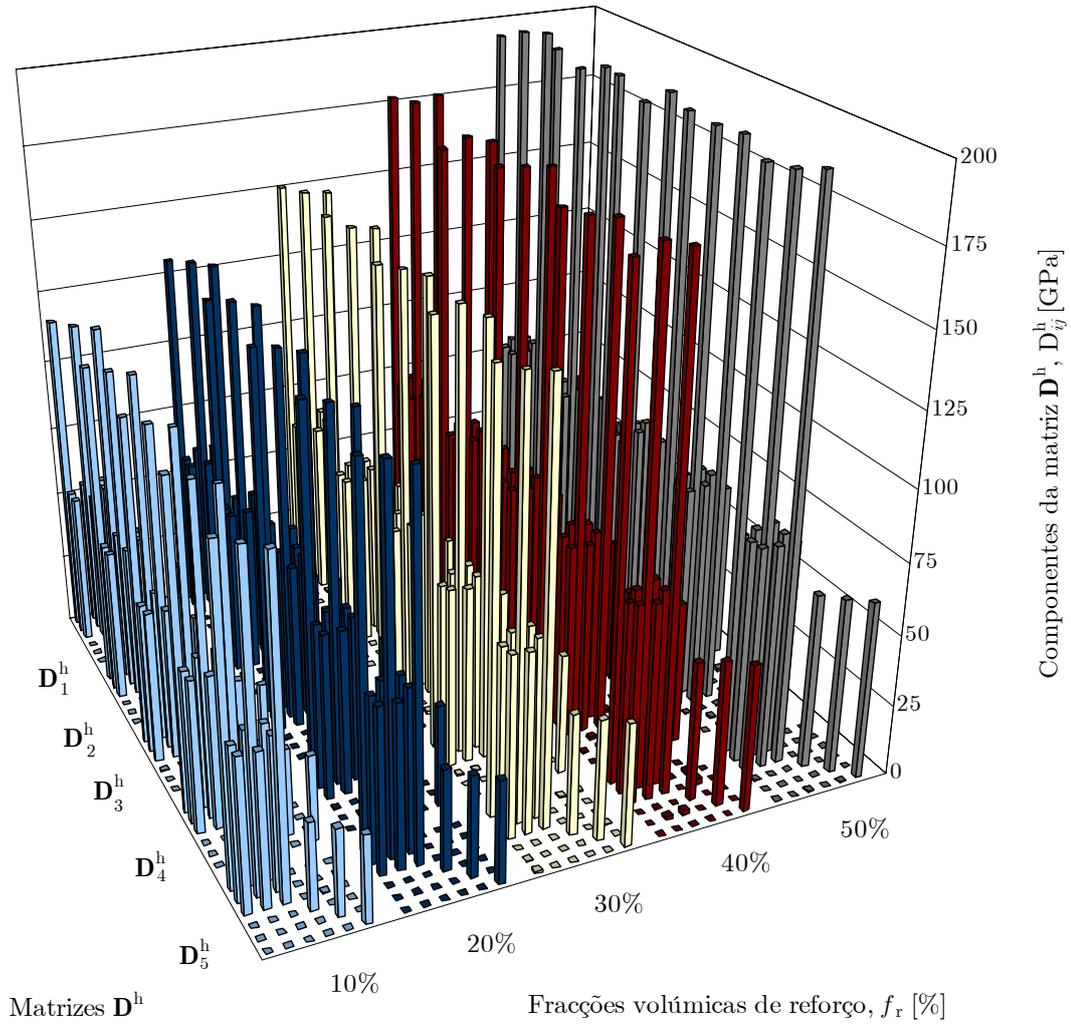


Figura 9.27: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas às diversas células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.

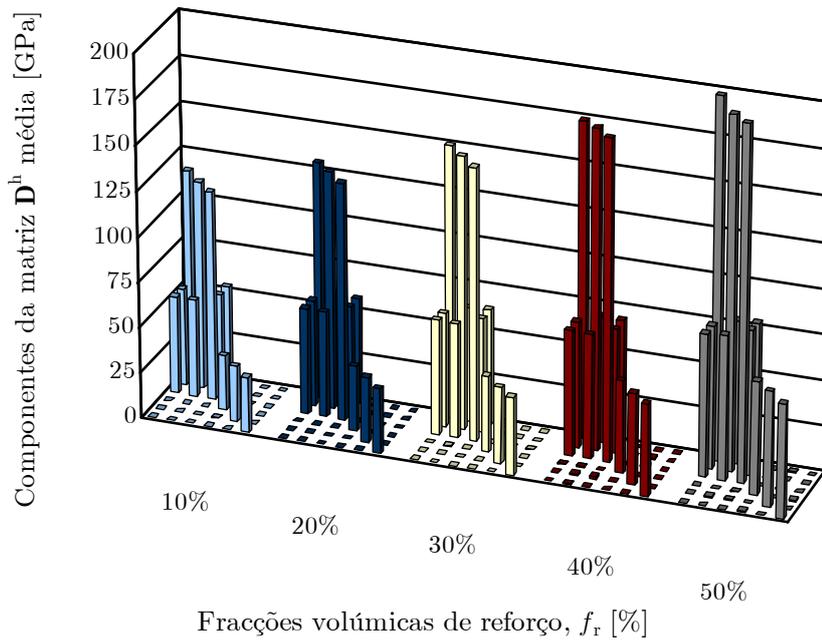


Figura 9.28: Componentes das matrizes constitutivas D^h médias, para células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.

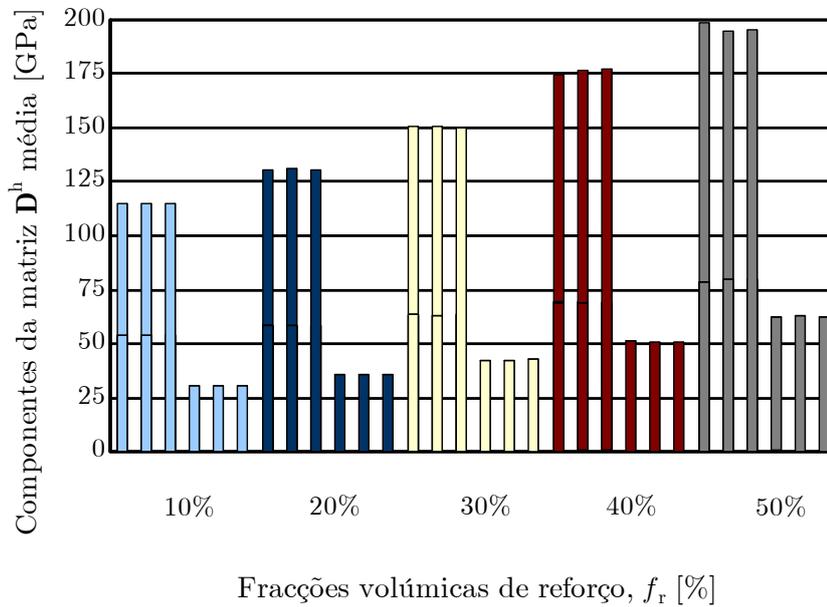


Figura 9.29: Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas D^h médias, para células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício.

Por outro lado, atendendo às relações

$$\kappa = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad \text{e} \quad (9.24)$$

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad (9.25)$$

resulta que a previsão analítica do módulo de elasticidade transversal corresponde a

$$E = \frac{9\kappa G}{3\kappa + G}. \quad (9.26)$$

De modo a complementar os resultados de previsão numérica e de previsão analítica, são ainda considerados os limites (analíticos) superiores e inferiores para o valor do módulo de elasticidade longitudinal associados aos modelos micromecânicos de Voigt-Reuss [Voigt 1889, Reuss 1929], de Hashin-Shtrikman [Hashin e Shtrikman 1963] e de Ravichandran [Ravichandran 1994]. Na figura 9.30 são representadas, de modo esquemático⁹, células representativas unitárias associadas a estes modelos micromecânicos.

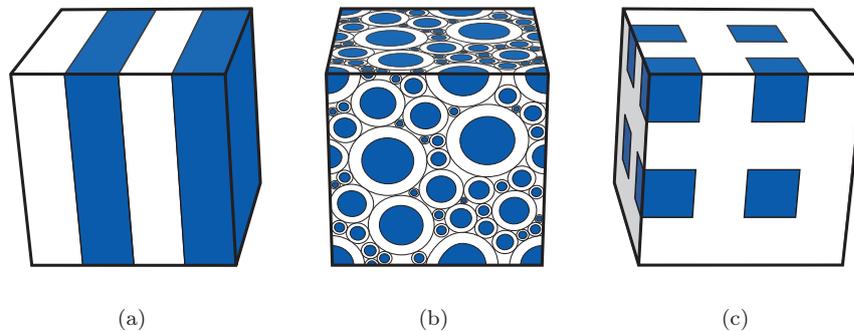


Figura 9.30: Representação esquemática de células representativas unitárias associadas aos modelos micromecânicos (a) de Voigt-Reuss, (b) de Hashin-Shtrikman e (c) de Ravichandran.

Os métodos que fornecem limites para os valores das propriedades mecânicas de materiais compósitos baseiam-se na consideração de campos aproximados de deformação ou de tensão do material compósito. Em termos gerais, assumindo um campo de deformação (tensão) aproximado, procede-se, com base num princípio variacional, à determinação do correspondente campo de tensão (deformação) através da minimização (maximização) de um funcional da deformação (tensão). Embora estes métodos não forneçam estimativas para as propriedades elásticas de um material compósito, permitem a obtenção de minorantes e de majorantes para as referidas propriedades.

Neste contexto, a consideração de dois tipos distintos de carregamento mecânico da célula representativa unitária apresentada na figura 9.30a dá origem aos denominados limites de Voigt-Reuss. No modelo de Voigt procede-se à minimização da energia potencial do material compósito assumindo um campo uniforme de deformação para o reforço e a matriz (campo de isodeformação). Atendendo ao facto de a energia potencial do material compósito apresentar um mínimo absoluto no caso de se verificar o equilíbrio global do material compósito, resulta que a energia potencial associada ao hipotético campo de isodeformação tem obrigatoriamente de ser não-inferior ao valor de

⁹No modelo de Hashin-Shtrikman assume-se (*cf.* [Hashin 1962]) que o material compósito é constituído por um arranjo de partículas esféricas de material de reforço (a cor azul) revestidas por uma camada concêntrica de material de matriz (a cor branca). Na realidade, estas partículas revestidas encontram-se dispostas de modo a não haver não só qualquer contacto entre partículas de reforço mas também qualquer espaço vazio no interior do compósito, o que obriga à consideração de partículas de reforço com diversas dimensões, inclusivamente infinitesimais.

equilíbrio, o que resulta na definição de um majorante para a rigidez estrutural do material compósito. Assim, considere-se o estado de isodeformação resultante do carregamento mecânico da célula representativa unitária 9.30a na direcção vertical, *i.e.* segundo a direcção que é simultaneamente paralela à interface das lâminas de matriz e reforço, e perpendicular à face superior da referida célula representativa unitária. Nesta situação, verifica-se que o módulo de elasticidade longitudinal para o material compósito definido pela referida célula representativa unitária corresponde¹⁰, de acordo com [Voigt 1889], a

$$E^V = E_r f_r + E_m (1 - f_r). \quad (9.27)$$

Por outro lado, no modelo de Reuss procede-se à maximização da energia potencial complementar do material compósito assumindo um campo uniforme de tensão para o reforço e a matriz (campo de isotensão). Atendendo ao facto de a energia potencial complementar do material compósito apresentar um máximo absoluto no caso de se verificar o equilíbrio global do material compósito, resulta que a energia potencial associada ao hipotético campo de isotensão tem obrigatoriamente de ser não-superior ao valor de equilíbrio, o que, em termos práticos, resulta na definição de um minorante para a rigidez estrutural do material compósito. Assim, considere-se o estado de isotensão associado ao carregamento mecânico da célula representativa unitária 9.30a na direcção horizontal, *i.e.* segundo a direcção perpendicular à interface das lâminas de matriz e reforço. Nesta situação, o módulo de elasticidade longitudinal para o material compósito definido pela referida célula representativa unitária corresponde, de acordo com [Reuss 1929], a

$$E^R = \frac{E_r E_m}{(1 - f_r) E_r + f_r E_m}. \quad (9.28)$$

As equações 9.27 e 9.28 definem o limite (superior) de Voigt e o limite (inferior) de Reuss, respectivamente, para o valor do módulo de elasticidade longitudinal de um material compósito com uma fracção volúmica de reforço f_r . Verifica-se que estas equações seguem as leis das misturas 9.4 e das misturas inversas 9.6, respectivamente. A maior ou menor proximidade dos limites de Voigt e de Reuss ao valor exacto de uma propriedade elástica depende do maior ou menor carácter uniforme dos campos internos de deformação e de tensão, respectivamente. Em geral, verifica-se que, no caso de os valores da rigidez dos materiais da matriz e do reforço diferirem de modo significativo, os limites de Voigt e Reuss definem intervalos excessivamente amplos. Neste contexto, Hashin e Shtrikman procederam ao desenvolvimento de um princípio variacional alternativo para materiais heterogéneos [Hashin e Shtrikman 1962, Hashin e Shtrikman 1963]. Com base na consideração de um material de referência, este método requer a utilização de um único princípio variacional, ao contrário do que se verifica para o método de Voigt-Reuss. A selecção de características adequadas para o material de referência resulta, por parte deste princípio variacional, nos limites superior e inferior de Hashin-Shtrikman (HS). De facto, no caso de o material de referência ter uma rigidez não-inferior (não-superior) à de quaisquer das fases constituintes do material compósito obtém-se um valor superior (inferior) para o limite de Hashin-Shtrikman. Em termos do módulo de elasticidade longitudinal, verifica-se que estes limites definem intervalos mais restritos que os de Voigt-Reuss¹¹.

De acordo com o método de Hashin e Shtrikman, os limites superiores (sup) e inferiores (inf) para os módulos de incompressibilidade, κ , e de corte, G , de um material compósito constituído por partículas de reforço esféricas embebidas numa matriz contínua (*cf.* figura 9.30b) correspondem,

¹⁰Atenda-se ao facto de a relação 9.27 pressupor a igualdade dos coeficientes de Poisson dos materiais da matriz e do reforço.

¹¹Na realidade, os limites de Voigt e Reuss correspondem aos limites de Hashin-Shtrikman para materiais de referência associados, respectivamente, a um valor infinito e a um valor nulo de rigidez.

no caso de o material do reforço ser mais rígido que o material da matriz¹², a

$$\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \kappa_r + \frac{1 - f_r}{\frac{1}{\kappa_m - \kappa_r} + \frac{3f_r}{3\kappa_r + 4G_r}}, \quad (9.29)$$

$$G_{\text{sup}}^{\text{HS}} = G_r + \frac{1 - f_r}{\frac{1}{G_m - G_r} + \frac{6f_r(\kappa_r + 2G_r)}{5G_r(3\kappa_r + 4G_r)}}, \quad (9.30)$$

$$\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \kappa_m + \frac{f_r}{\frac{1}{\kappa_r - \kappa_m} + \frac{3(1 - f_r)}{3\kappa_m + 4G_m}} \quad \text{e} \quad (9.31)$$

$$G_{\text{inf}}^{\text{HS}} = G_m + \frac{f_r}{\frac{1}{G_r - G_m} + \frac{6(1 - f_r)(\kappa_m + 2G_m)}{5G_m(3\kappa_m + 4G_m)}}. \quad (9.32)$$

O limite superior e o limite inferior de Hashin-Shtrikman para o módulo de elasticidade longitudinal correspondem, em conformidade com as relações 9.24 a 9.26, a

$$E_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \frac{9\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} G_{\text{sup}}^{\text{HS}}}{3\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} + G_{\text{sup}}^{\text{HS}}} \quad \text{e} \quad (9.33)$$

$$E_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \frac{9\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} G_{\text{inf}}^{\text{HS}}}{3\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} + G_{\text{inf}}^{\text{HS}}}, \quad (9.34)$$

respectivamente.

No modelo de Ravichandran considera-se que o material compósito é constituído por partículas de reforço cúbicas embebidas numa matriz contínua [Ravichandran 1994], ao que corresponde a célula representativa unitária da figura 9.30c. Assumindo um carregamento unidimensional aplicado perpendicularmente a duas faces opostas desta célula representativa unitária, o limite superior (inferior) de Ravichandran (Ra) para o módulo de elasticidade longitudinal é determinado em duas fases. Em primeiro lugar, a célula representativa unitária é seccionada normalmente (paralelamente) à direcção de carregamento, resultando na separação dos subvolumes que contêm partículas de reforço dos que são unicamente constituídos por matriz. O módulo de elasticidade associado aos subvolumes que contêm partículas de reforço é então determinado com base no limite de Voigt (Reuss), *i.e.* na equação 9.27 (9.28). Numa segunda fase, procede-se ao reagrupamento dos subvolumes e o limite superior (inferior) de Ravichandran para o módulo de elasticidade longitudinal é obtido com base no limite de Reuss (Voigt), *i.e.* na equação 9.28 (9.27). Neste contexto, o limite superior e o limite inferior de Ravichandran para o módulo de elasticidade longitudinal correspondem a

$$E_{\text{sup}}^{\text{Ra}} = \frac{\left[E_r E_m + E_m^2 (1 + \psi_r)^2 - E_m^2 \right] (1 + \psi_r)}{(E_r - E_m) \psi_r + E_m (1 + \psi_r)^3} \quad \text{e} \quad (9.35)$$

$$E_{\text{inf}}^{\text{Ra}} = \frac{(\psi_r E_r E_m + E_m^2) (1 + \psi_r)^2 - E_m^2 + E_r E_m}{(\psi_r E_r + E_m) (1 + \psi_r)^2}, \quad (9.36)$$

respectivamente, em que

$$\psi_r = \frac{1}{\sqrt[3]{f_r}} - 1. \quad (9.37)$$

Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica (equações de Halpin-Tsai) para o módulo de elasticidade longitudinal são apresentados, em conjunto não só com os limites superiores e inferiores de Voigt-Reuss, de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran mas também com os resultados experimentais [Ravichandran 1994], na figura 9.31. Devido ao carácter ortotrópico do

¹²Nesta situação, o limite superior e o limite inferior de Hashin-Shtrikman dos módulos de incompressibilidade, κ , e de corte, G , são obtidos considerando como material de referência o reforço e a matriz, respectivamente.

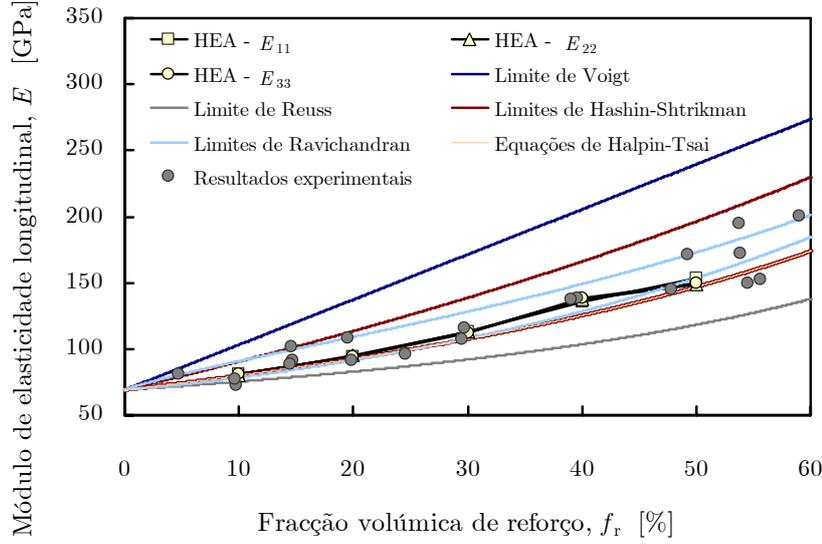


Figura 9.31: Variação do módulo de elasticidade longitudinal com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de alumínio.

material compósito para as fracções volúmicas de reforço mais elevadas, apresentam-se valores numéricos correspondentes aos três módulos de elasticidade longitudinal associados a este tipo de comportamento. Os seus valores são obtidos através da inversão das matrizes homogeneizadas (não-singulares) de elasticidade, que resultam em matrizes homogeneizadas de flexibilidade correspondentes a¹³

$$\mathbf{S}^h = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{11}} & \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{-\nu_{13}}{E_{11}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{1}{E_{22}} & \frac{-\nu_{23}}{E_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{13}}{E_{11}} & \frac{-\nu_{23}}{E_{22}} & \frac{1}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} \end{bmatrix}. \quad (9.38)$$

Verifica-se um afastamento considerável entre os limites de Voigt e de Reuss, o que advém, de acordo com as equações 9.27 e 9.28, do facto de os materiais da matriz e do reforço apresentarem módulos de elasticidade significativamente distintos. Na realidade, o modelo micromecânico de Voigt-Reuss considera o material compósito como sendo um laminado de matriz e de reforço (*cf.* figura 9.30a), o que se traduz numa aproximação não-razoável da microestrutura de materiais compósitos reforçados com partículas esféricas. Por outro lado, nos modelos micromecânicos de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran considera-se a existência de uma matriz contínua a envolver partículas de reforço isoladas¹⁴ (*cf.* figuras 9.30b e 9.30c), o que se traduz na definição, por parte dos correspondentes limites, de intervalos mais estreitos que os de Voigt-Reuss. Contudo, os limites que definem um intervalo mais estreito para o módulo de elasticidade transversal são

¹³Atenda-se a que os restantes coeficientes de Poisson, ν_{21} , ν_{31} e ν_{23} podem ser obtidos com base nas relações $\nu_{ji} = \frac{E_{jj}}{E_{ii}}\nu_{ij}$, $i, j = 1, \dots, 3$, em que, neste caso, não se considera válida a convenção de Einstein para a notação indicial. Por outro lado, devido ao facto de as propriedades elásticas corresponderem, em termos macroscópicos, a valores homogeneizados, omitiram-se, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, os seus índices superiores h.

¹⁴Nos modelos micromecânicos de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran considera-se a não-existência de quaisquer interações entre as várias partículas de reforço. Neste contexto, estes modelos são adequados para materiais compósitos que apresentem reduzidas concentrações de reforço [Hsieh e Tuan 2005].

os de Ravichandran. Neste contexto, verifica-se que, à exceção do que ocorre para o valor mais elevado de fracção volúmica de reforço ($f_r = 50\%$), os resultados numéricos se encontram entre os limites de Ravichandran. Por outro lado, constata-se que os resultados de previsão analítica relativos às equações de Halpin-Tsai coincidem com o limite inferior de Hashin-Shtrikman. Os resultados numéricos revelam-se não-inferiores aos analíticos de Halpin-Tsai, sendo observada uma discrepância máxima entre estes resultados para uma fracção volúmica de reforço de 40%, à qual correspondem previsões numéricas cerca de 9% superiores às previsões analíticas.

Os resultados experimentais encontram-se limitados superiormente pelo limite de Voigt, havendo um único destes resultados que se revela inferior ao limite de Reuss ($f_r = 9,8\%$). No entanto, os resultados experimentais apresentam uma tendência média que se revela em conformidade com os limites de Ravichandran. Contudo, constata-se que grande parte dos resultados experimentais se encontra no exterior destes limites. Todavia, esta característica parece verificar-se para a maioria dos materiais compósitos de matriz metálica reforçados com partículas de material cerâmico [Hsieh e Tuan 2005]. Por outro lado, constata-se que os resultados experimentais se aproximam mais do limite inferior de Hashin-Shtrikman que do respectivo limite superior, o que se encontra em conformidade com estudos previamente efectuados [Moon *et al.* 2005].

Na figura 9.32 apresentam-se os resultados experimentais e os resultados de previsão analítica (equações de Halpin-Tsai) para o módulo de elasticidade longitudinal, em conjunto com os limites superiores e inferiores de Voigt-Reuss, de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran. Constata-se que as tendências gerais referidas anteriormente se mantêm para os valores de f_r superiores a 60%, verificando-se, contudo, uma diminuição da dispersão dos correspondentes resultados experimentais.

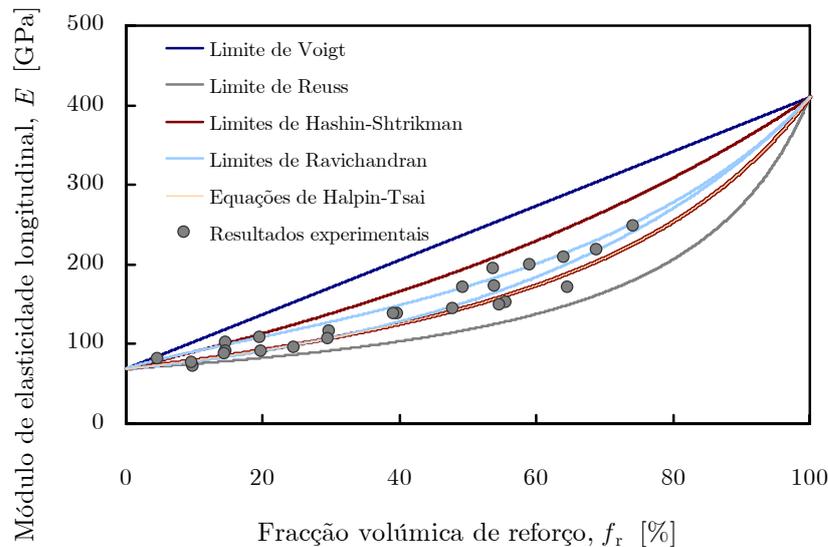


Figura 9.32: Resultados experimentais e de previsão analítica do módulo de elasticidade longitudinal, em conjunto com os limites superiores e inferiores de Voigt-Reuss, de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran, para um material compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.

No que concerne ao coeficiente de Poisson do material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício, o seu valor pode ser obtido analiticamente com base nas equações de Halpin-Tsai previamente utilizadas para a determinação do módulo de elasticidade longitudinal. Assim, o valor do coeficiente de Poisson é estimado, de acordo com as expressões

9.18 a 9.25, por

$$\nu = \frac{3\kappa - 2G}{6\kappa + 2G}. \quad (9.39)$$

Por outro lado, os limites (analíticos) superiores e inferiores para o valor do coeficiente de Poisson são obtidos com base nos modelos micromecânicos de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran. De acordo com as modificações propostas por Zimmerman [Zimmerman 1992], o limite superior e o limite inferior de Hashin-Shtrikman para o valor do coeficiente de Poisson correspondem, atendendo às expressões 9.29 a 9.32, a

$$\nu_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \frac{3\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} - 2G_{\text{inf}}^{\text{HS}}}{6\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} + 2G_{\text{inf}}^{\text{HS}}} \quad \text{e} \quad (9.40)$$

$$\nu_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \frac{3\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} - 2G_{\text{sup}}^{\text{HS}}}{6\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} + 2G_{\text{sup}}^{\text{HS}}}, \quad (9.41)$$

respectivamente. Os limites (analíticos) superior e inferior de Ravichandran [Ravichandran 1994] para o valor do coeficiente de Poisson correspondem a [Hsieh e Tuan 2005]

$$\nu_{\text{sup}}^{\text{Ra}} = \frac{\nu_r E_m + \psi_r \nu_m E_r + E_m \nu_m (2\psi_r + 3\psi_r^2 + \psi_r^3)}{\psi_r E_r + E_m (1 + 2\psi_r + 3\psi_r^2 + \psi_r^3)} \quad \text{e} \quad (9.42)$$

$$\nu_{\text{inf}}^{\text{Ra}} = \frac{1}{(1 + \psi_r)^2} \left[\frac{\nu_r E_m + \psi_r \nu_m E_r}{\psi_r E_r + E_m} + \nu_m (1 + \psi_r)^2 - \nu_m \right]. \quad (9.43)$$

Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica para o coeficiente de Poisson são apresentados, em conjunto não só com os limites superiores e inferiores de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran mas também com os resultados experimentais [Jung *et al.* 1999], na figura 9.33. Apresentam-se os valores numéricos dos três coeficientes de Poisson associados a um comportamento do tipo ortotrópico (*cf.* equação 9.38).

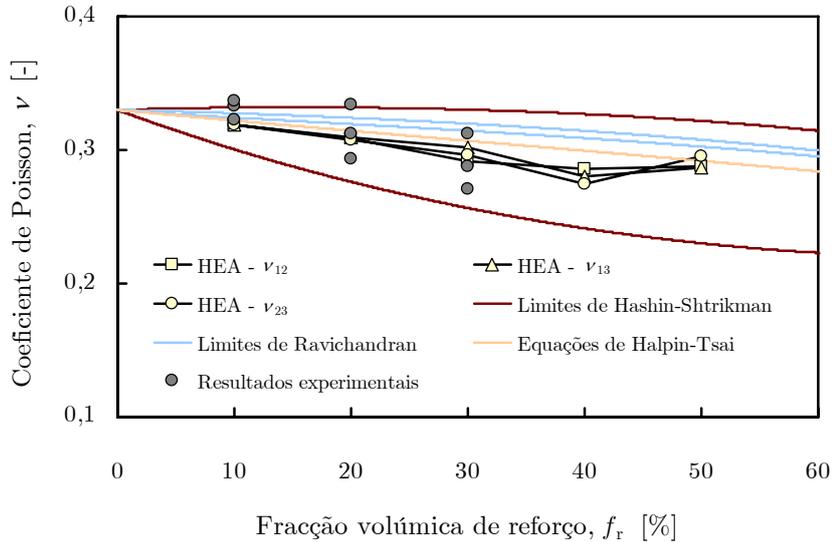


Figura 9.33: Variação do coeficiente de Poisson com a fracção volumétrica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de matriz de alumínio.

Verifica-se que os resultados experimentais apresentam variações significativas, sendo minorados pelo limite inferior de Hashin-Shtrikman. No entanto, exceptuando a fracção volúmica de reforço mais elevada (30%), há resultados experimentais que excedem o limite superior de Hashin-Shtrikman. Por outro lado, embora os limites de Ravichandran definam um intervalo bastante estreito para o módulo de Young, constata-se que quaisquer dos valores experimentais ou de previsão numérica saem fora desse intervalo. Os resultados de previsão numérica seguem aproximadamente a tendência média dos resultados experimentais. De facto, os resultados numéricos são os que melhor representam a tendência média dos resultados experimentais, na gama correspondente de fracções volúmicas. Além disso, verifica-se que os resultados de previsão numérica apresentam menor dispersão que os resultados experimentais, sendo ainda inferiores aos limites de Ravichandran. Por outro lado, à excepção do valor numérico de ν_{23} para a fracção volúmica de reforço de 50%, verifica-se que os resultados de previsão numérica se aproximam inferiormente dos resultados analíticos de Halpin-Tsai.

Com o intuito de analisar o efeito do tamanho das partículas de reforço nos valores do módulo de elasticidade longitudinal e do coeficiente de Poisson, procede-se à determinação numérica das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas a células representativas unitárias correspondentes a uma fracção volúmica de reforço de 30%. Geraram-se células representativas unitárias com 1 a 8 partículas de reforço (PE), cujas geometrias se encontram ilustradas na figura 9.34. Cada uma das células representativas unitárias é constituída por partículas esféricas de igual dimensão.

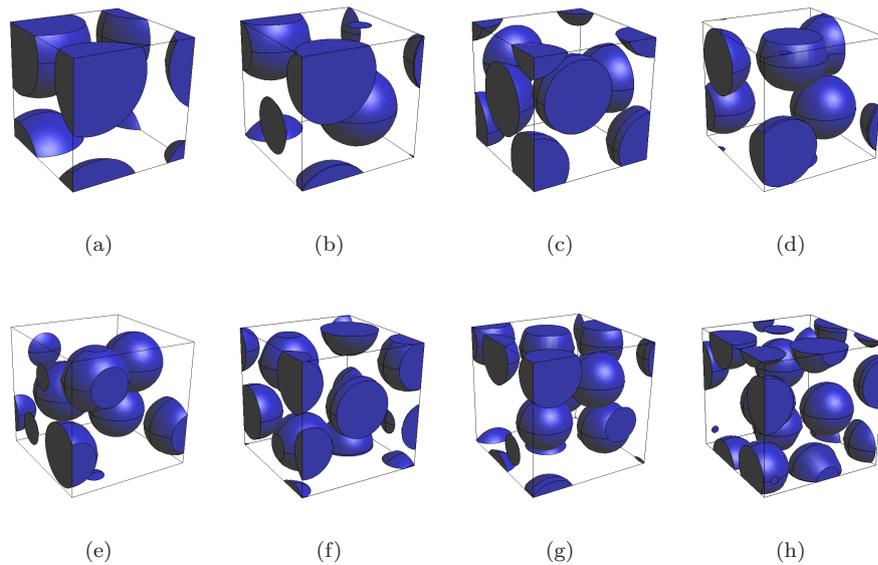


Figura 9.34: Geometrias de células representativas unitárias geradas com distribuições aleatórias de partículas, para uma fracção volúmica de reforço de 30%, com (i) uma, (ii) duas, (iii) três, (iv) quatro, (v) cinco, (vi) seis, (vii) sete e (viii) oito partículas esféricas (PE).

As componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h , para um material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.), são apresentadas nas figuras 9.35 e 9.36. Verifica-se que as diferentes células representativas unitárias definem materiais ortotrópicos, correspondendo a célula representativa unitária com uma única partícula esférica a um material cúbico. Com base nestas matrizes constitutivas, obtiveram-se os valores homogeneizados para o módulo de elasticidade e para o coeficiente de Poisson, que se encontram ilustrados, em conjunto com os resultados analíticos, nas figuras 9.37

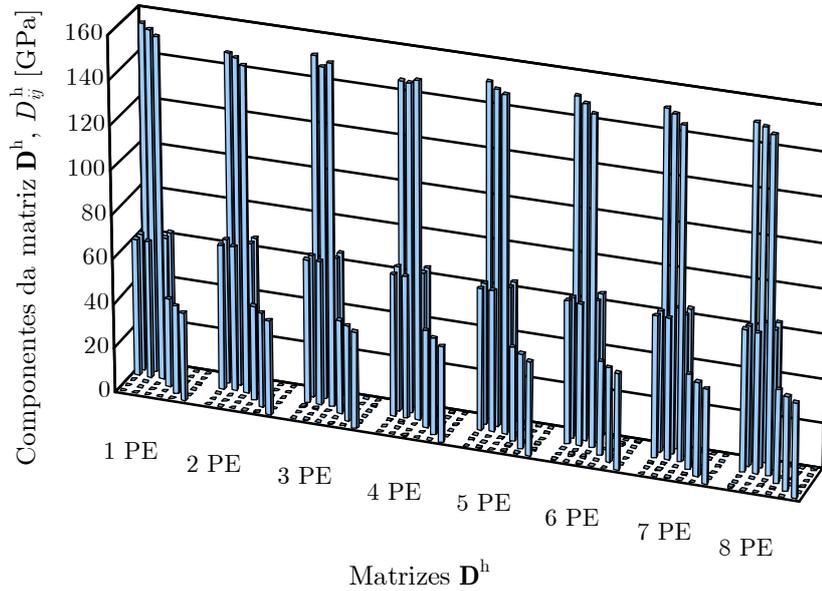


Figura 9.35: Componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h , para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).

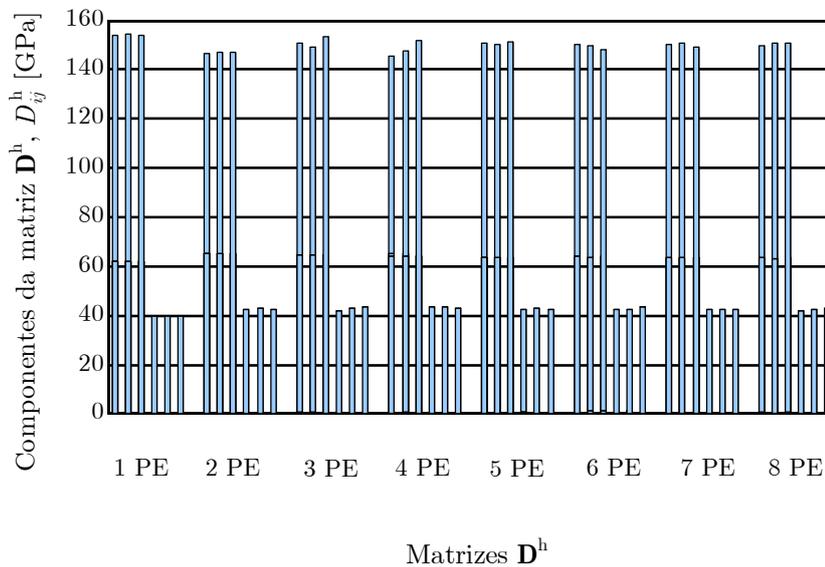


Figura 9.36: Perspectiva frontal das componentes das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h , para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).

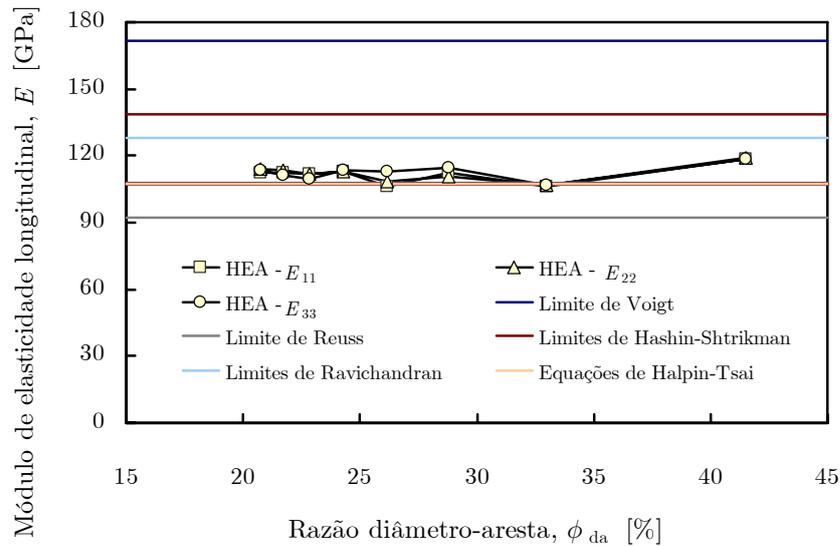


Figura 9.37: Resultados numéricos e de previsão analítica do módulo de elasticidade longitudinal em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).

e 9.38, respectivamente. Os resultados são apresentados em função da relação entre o diâmetro de uma esfera e o comprimento da aresta da célula, ϕ_{da} — razão diâmetro-aresta, associada a cada célula (cúbica) unitária. Devido ao carácter ortotrópico do material compósito associado à maioria das células representativas unitárias, apresentam-se os valores numéricos correspondentes aos três valores do módulo de elasticidade longitudinal e do coeficiente de Poisson. De acordo com a figura 9.37, verifica-se que os valores do módulo de elasticidade para as células representativas unitárias constituídas por mais de uma partícula esférica apresentam, a menos de diferenças associadas à ortotropia do material, a mesma tendência geral, mantendo-se próximos do valor associado ao resultado analítico de Halpin-Tsai. No entanto, os valores do módulo de elasticidade associados à célula representativa unitária constituída por uma única partícula esférica são cerca de 3% a 10% superiores aos das restantes células. Deste modo, verifica-se que, à excepção deste último caso, o módulo de elasticidade não apresenta uma tendência bem definida de crescimento ou decréscimo com a diminuição da dimensão das partículas esféricas. Esta característica encontra-se em oposição com o que é verificado experimentalmente. Na realidade, vários estudos experimentais revelam que, para uma determinada fracção volúmica de reforço, o módulo de elasticidade aumenta com a diminuição da dimensão das partículas de reforço, sendo este facto usualmente atribuído ao aumento da eficiência de transferência de carga entre reforço e matriz com o aumento da área de interface destes materiais [Jung *et al.* 1999]. No que concerne aos valores do coeficiente de Poisson, verifica-se um comportamento semelhante ao associado aos valores do módulo de elasticidade, à excepção dos valores associados à célula representativa unitária constituída por uma única partícula esférica, que são cerca de 6% inferiores aos referentes à célula representativa unitária com duas partículas esféricas. Este facto não entra em conflito com o que é verificado experimentalmente, que consiste num ligeiro decréscimo com o aumento da dimensão das partículas de reforço [Jung *et al.* 1999].

Por fim, nas figuras 9.39 e 9.40 apresentam-se, respectivamente, os deslocamentos característicos e os vectores das sollicitações mecânicas característicos da célula representativa unitária de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (*vd.* figura 9.34c). A periodicidade na microescala (Y-periodicidade) do modo normal χ_{33} dos deslocamentos característicos é ilustrada na figura 9.41, utilizando 8 células representativas unitárias.

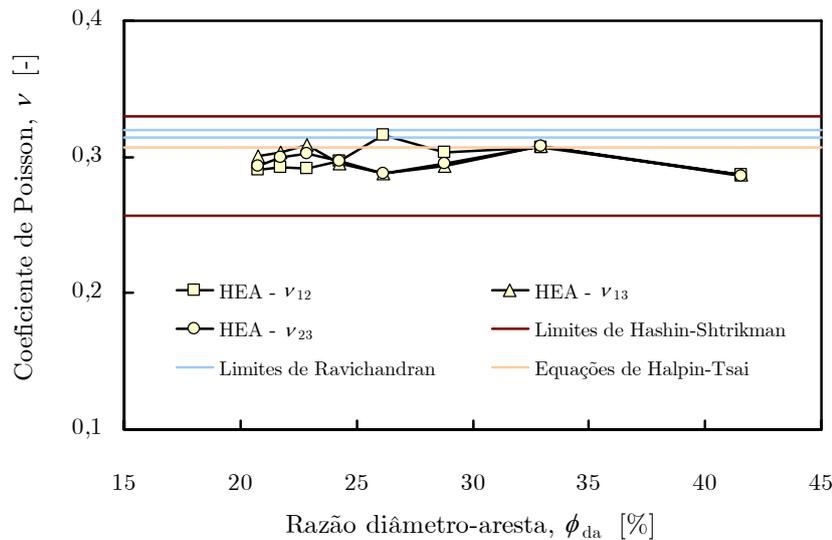


Figura 9.38: Resultados numéricos e de previsão analítica do coeficiente de Poisson em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de carboneto de silício (30% vol.).

9.2 Determinação de Propriedades Termoelásticas de Materiais Compósitos

Na presente secção aplica-se a técnica de homogeneização por expansão assintótica para se determinarem numericamente as propriedades termoelásticas de materiais compósitos. Procedese ao estudo da influência da fracção volúmica de reforço nos valores efectivos dos coeficientes de expansibilidade térmica de um material compósito de partículas esféricas. Os resultados numéricos são comparados quer com resultados de previsão analítica quer com resultados experimentais. Analisa-se, ainda, o efeito da dimensão das partículas esféricas de reforço nas componentes do vector dos módulos térmicos para uma fracção volúmica de reforço constante. Os resultados numéricos do coeficiente de expansibilidade térmica são comparados com resultados analíticos.

Consideram-se o cobre (Cu) e o diamante (C) para materiais da matriz e do reforço do material compósito, respectivamente. As propriedades termoelásticas destes materiais encontram-se indicadas na tabela 9.7 [Yoshida e Morigami 2004].

Tabela 9.7: Propriedades termomecânicas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de cobre reforçado com partículas esféricas de diamante.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade do material da matriz, E_m [GPa]	131,6
Coeficiente de Poisson do material da matriz, ν_m [-]	0,34
Coeficiente de condutividade térmica do material da matriz, k_m [Wm ⁻¹ K ⁻¹]	400
Coeficiente de expansibilidade térmica do material da matriz, α_m [K ⁻¹]	$16,42 \times 10^{-6}$
Módulo de elasticidade do material do reforço, E_r [GPa]	894,9
Coeficiente de Poisson do material do reforço, ν_r [-]	0,24
Coeficiente de condutividade térmica do material do reforço, k_r [Wm ⁻¹ K ⁻¹]	2 000
Coeficiente de expansibilidade térmica do material do reforço, α_r [K ⁻¹]	$2,3 \times 10^{-6}$

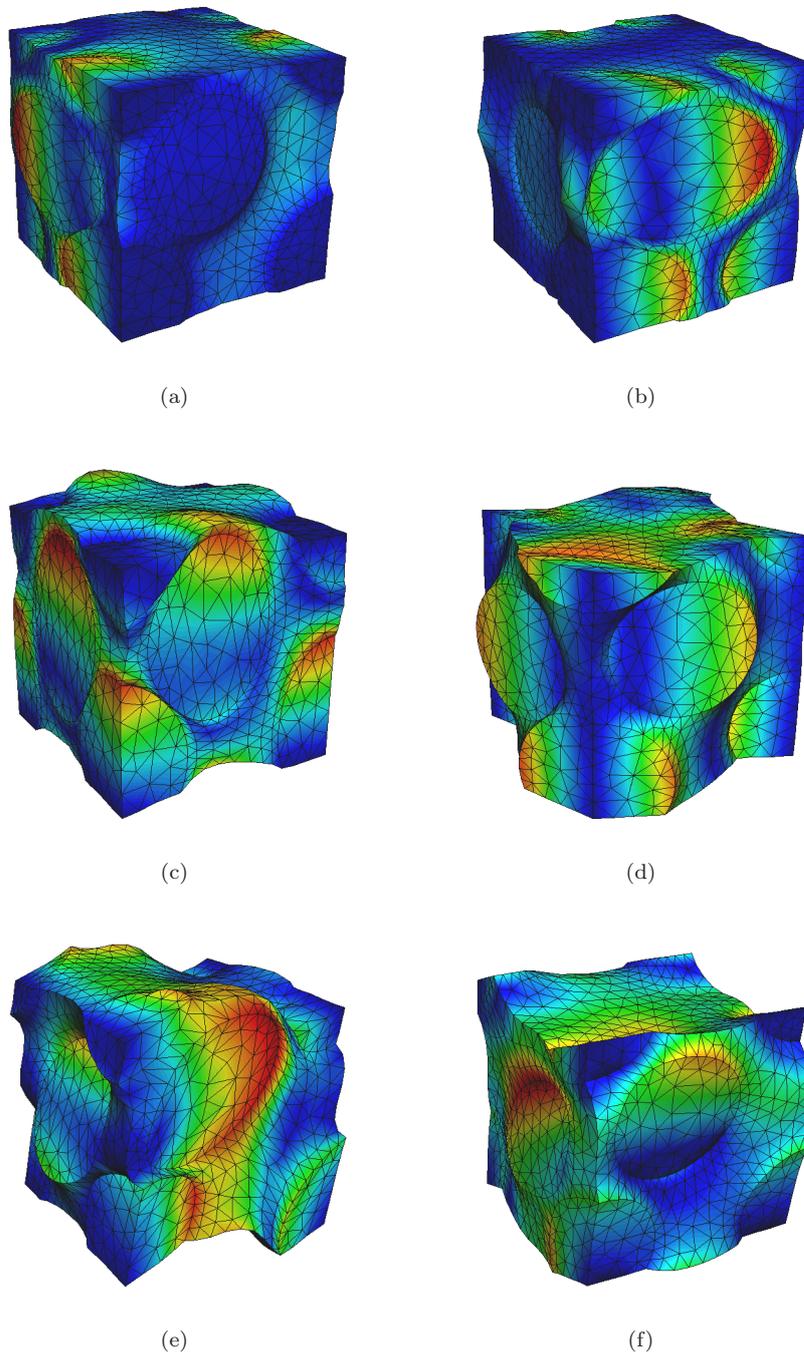


Figura 9.39: Deslocamentos característicos da célula representativa unitária de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (fracção volúmica de 30%) — modos normais (a) χ_{11} , (b) χ_{22} e (c) χ_{33} , e modos de corte (d) χ_{12} , (e) χ_{23} e (f) χ_{13} .

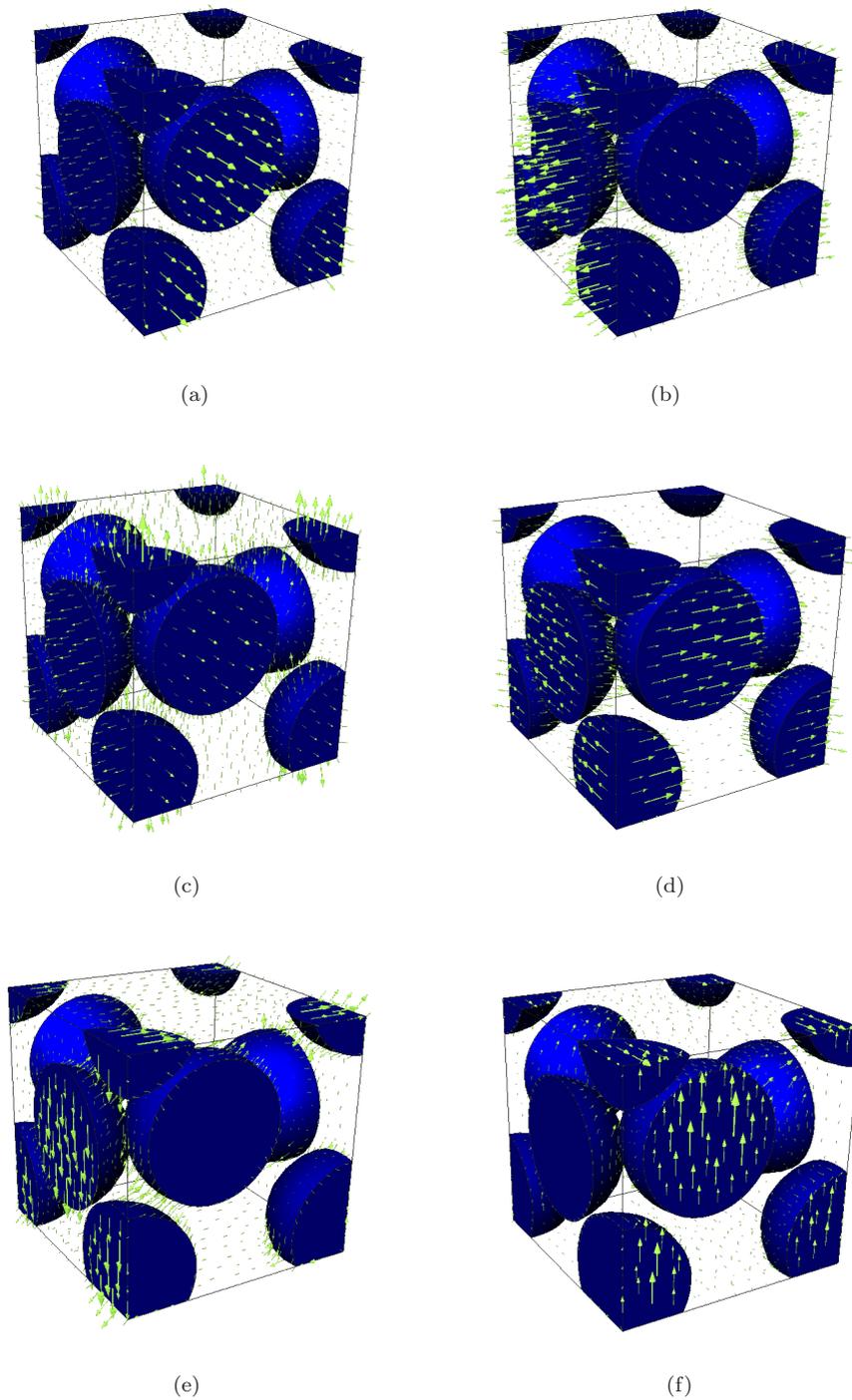


Figura 9.40: Vetores das solicitações mecânicas características da célula representativa unitária de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (fracção volúmica de 30%) — modos normais (a) F_{11}^D , (b) F_{22}^D e (c) F_{33}^D , e modos de corte (d) F_{12}^D , (e) F_{23}^D e (f) F_{13}^D .

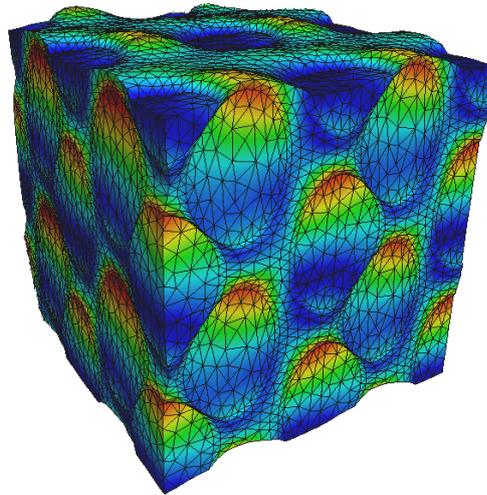


Figura 9.41: Y-periodicidade dos deslocamentos característicos — ilustração do modo normal χ_{33} , utilizando 8 células representativas unitárias de material compósito de alumínio com 3 partículas esféricas de carboneto de silício (fracção volúmica de 30%).

A determinação dos coeficientes de expansibilidade térmica do material compósito é efectuada para fracções volúmicas de reforço, f_r , entre 10% e 50%, inclusive. Consideram-se as primeiras células representativas unitárias apresentadas nas figuras 9.21a a 9.21e. Neste contexto, procedendo a um estudo de convergência do vector homogeneizado dos módulos térmicos β^h , verifica-se que as malhas de elementos finitos tetraédricos previamente obtidas para a determinação das propriedades elásticas homogeneizadas de materiais compósitos reforçados com partículas esféricas (*vd.* Secção 9.1.3) dão origem a soluções admissíveis [Rizzo 1991]. Assim, da utilização numérica das referidas malhas de elementos finitos, obtêm-se os vectores homogeneizados dos módulos térmicos β^h que se encontram ilustrados nas figuras 9.42 e 9.43. Constata-se que os valores das componentes dos vectores homogeneizados dos módulos térmicos β^h são praticamente idênticos para cada uma das fracções volúmicas de reforço consideradas. Por outro lado, verifica-se que estes valores decrescem com o aumento da fracção volúmica de reforço. Em termos gerais, esta tendência pode ser explicada, de acordo quer com as expressões 5.18 e 8.13 quer com os valores apresentados na tabela 9.7, pelo facto de o material de reforço apresentar um módulo térmico inferior e um módulo de elasticidade superior aos correspondentes módulos do material da matriz. Deste modo, é de esperar que ocorra uma diminuição dos valores das componentes dos vectores homogeneizados dos módulos térmicos, β^h , com o aumento da fracção volúmica de reforço.

A utilização simultânea da matriz constitutiva \mathbf{D}^h e do vector β^h permite obter os valores efectivos dos coeficientes de expansibilidade térmica para cada uma das fracções volúmicas de reforço consideradas, obtendo-se o vector homogeneizado de coeficientes de expansibilidade térmica pela multiplicação da inversa da matriz homogeneizada (não-singular) de elasticidade pelo vector homogeneizado dos módulos térmicos (*cf.* expressão 8.14). Estes resultados de previsão numérica são comparados com resultados de previsão analítica e resultados experimentais.

No presente trabalho, a previsão analítica do coeficiente de expansibilidade térmica é efectuada recorrendo aos modelos de Kerner [Kerner 1956], de Schapery [Schapery 1968] e de Fahmy e Ragai [Fahmy e Ragai 1970].

No modelo de Kerner, um dos primeiros modelos de termoelasticidade para materiais compósitos reforçados com partículas esféricas, assume-se que cada partícula de reforço se encontra embebida numa camada uniforme de material da matriz. Considera-se que o coeficiente de expansibilidade térmica do material compósito, α^K , corresponde ao de uma lâmina de material de matriz que envolve uma única partícula de reforço, apresentando, ambas as fases, as mesmas fracções

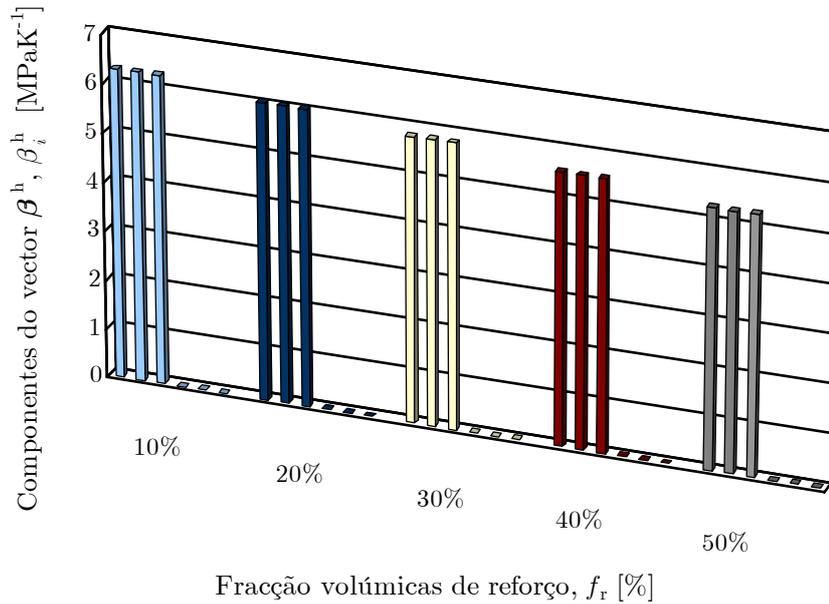


Figura 9.42: Componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para células representativas unitárias de material compósito de cobre com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de diamante.

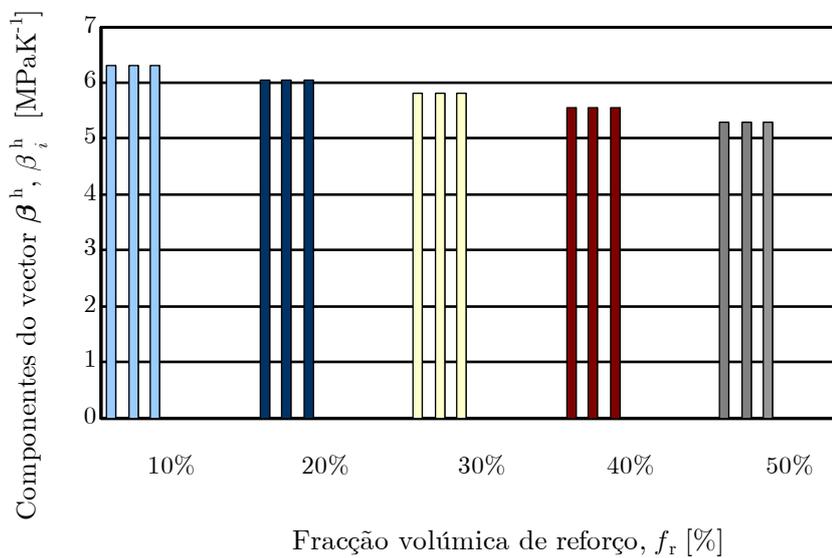


Figura 9.43: Perspectiva frontal das componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para células representativas unitárias de material compósito de cobre com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de diamante.

volúmicas que no material compósito. Deste modo, resulta que [Kerner 1956]

$$\alpha^K = \alpha_m (1 - f_r) + \alpha_r f_r + \frac{f_r (1 - f_r) (\alpha_r - \alpha_m) (\kappa_r - \kappa_m)}{(1 - f_r) \kappa_m + f_r \kappa_r + \frac{3\kappa_m \kappa_r}{4G_m}}, \quad (9.44)$$

em que κ_r e κ_m são os módulos de incompressibilidade dos materiais de reforço e da matriz, respectivamente. G_m é o módulo de corte do material da matriz.

Com o intuito de se tomar em consideração o efeito de interacção entre estes materiais, Schapery desenvolveu, com base nos princípios variacionais da termoelasticidade, um modelo para o coeficiente de expansibilidade térmica do material compósito, α^S , de acordo com o qual [Shapery 1968]

$$\alpha^S = \alpha_r + (\alpha_m - \alpha_r) \frac{\kappa^{-1} - \kappa_r^{-1}}{\kappa_m^{-1} - \kappa_r^{-1}}, \quad (9.45)$$

em que κ é o módulo de incompressibilidade do material compósito. Deste modo, verifica-se que o coeficiente de expansibilidade térmica depende da fracção volúmica de reforço e da geometria das fases constituintes unicamente através do módulo de incompressibilidade do material compósito, cujo valor não é previamente conhecido. No entanto, a consideração dos limites de Hashin-Shtrikman para o módulo de incompressibilidade do material compósito (equações 9.29 e 9.31) na equação 9.45 resulta nos limites superior e inferior de Schapery para o coeficiente de expansibilidade térmica, que correspondem a

$$\alpha_{\text{sup}}^S = \alpha_r + (\alpha_m - \alpha_r) \frac{(\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}})^{-1} - \kappa_r^{-1}}{\kappa_m^{-1} - \kappa_r^{-1}} \quad \text{e} \quad (9.46)$$

$$\alpha_{\text{inf}}^S = \alpha_r + (\alpha_m - \alpha_r) \frac{(\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}})^{-1} - \kappa_r^{-1}}{\kappa_m^{-1} - \kappa_r^{-1}}, \quad (9.47)$$

respectivamente.

Por fim, no modelo de Fahmy e Ragai considera-se a influência quer dos módulos de elasticidade longitudinal quer dos coeficientes de Poisson de ambas as fases no fenómeno termoelástico, resultando o coeficiente de expansibilidade térmica do material compósito, α^{FR} , em [Fahmy e Ragai 1970]

$$\alpha^{\text{FR}} = \alpha_m - \frac{3f_r (1 - \nu_m) (\alpha_m - \alpha_r)}{\frac{2E_m}{E_r} (1 - 2\nu_r) (1 - f_r) + 2f_r (1 - 2\nu_m) + 1 + \nu_m}. \quad (9.48)$$

Os resultados de previsão numérica¹⁵ e de previsão analítica¹⁶ para o coeficiente de expansibilidade térmica são apresentados, em conjunto com resultados experimentais [Sun e Inal 1996], na figura 9.44. Apresentam-se valores numéricos correspondentes aos três coeficientes de expansibilidade térmica normal. Refira-se, ainda, que as restantes três componentes do vector homogeneizado dos coeficientes de expansibilidade térmica resultam numericamente insignificantes, sendo os seus valores, para as várias fracções volúmicas de reforço, cerca de 3 a 5 ordens de grandeza inferiores aos dos coeficientes de expansibilidade térmica normal.

Verifica-se que os resultados numéricos apresentados são idênticos para as várias fracções volúmicas de reforço consideradas. Deste modo, os resultados numéricos revelam que o material compósito se comporta isotropicamente em termos de expansibilidade térmica para as várias fracções volúmicas de reforço consideradas. Constata-se, ainda, que os resultados de previsão analítica relativos ao limite superior de Shapery e ao modelo de Fahmy e Ragai coincidem com os do modelo de Kerner. Em relação ao primeiro, este facto foi originalmente constatado pelo próprio Shapery

¹⁵Devido ao facto de as propriedades termoelásticas corresponderem macroscopicamente a valores homogeneizados, omitiram-se, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, os seus índices superiores h.

¹⁶Os valores dos módulos de incompressibilidade κ_m e κ_r , e do módulo de corte G_m obtêm-se a partir das equações 9.24 e 9.25, respectivamente.

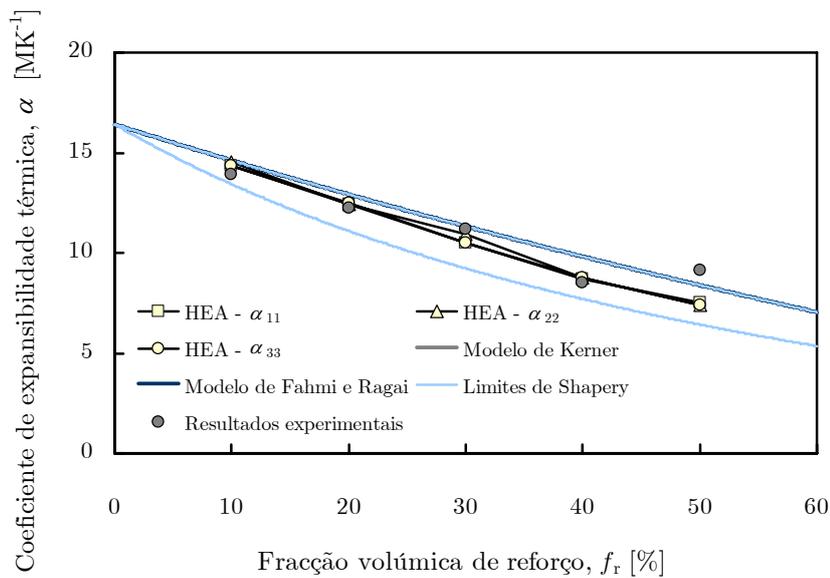


Figura 9.44: Variação do coeficiente de dilatação térmica com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de diamante, para um material compósito de matriz de cobre.

[Shapery 1968]. No que concerne ao modelo de Fahmy e Ragai, a coincidência de valores deve-se, fundamentalmente, ao facto de o módulo de elasticidade longitudinal do material da matriz ser cerca de 15% do módulo de elasticidade longitudinal do material do reforço (*cf.* equação 9.48).

Por outro lado, todos os resultados numéricos se encontram entre os limites de Shapery e aproximam, em termos de tendência, os resultados experimentais, exceptuando a situação correspondente a uma fracção volúmica de 50%. Neste caso, verifica-se que o resultado experimental é superior a quaisquer dos restantes tipos de resultado, encontrando-se, deste modo, acima da curva associada ao modelo de Kerner. Assim, constata-se que a técnica de homogeneização por expansão assintótica se revela adequada para se determinarem numericamente os valores efectivos dos coeficientes de expansibilidade térmica de um material compósito de partículas esféricas.

Por fim, refira-se que a dependência do coeficiente de expansibilidade térmica relativamente à fracção volúmica de reforço apresentada na figura 9.44 pode ser explicada pelo facto de o coeficiente de expansibilidade térmica do material do reforço diferir significativamente do coeficiente de expansibilidade térmica do material da matriz (cerca de 86%) [Arpón *et al.* 2003].

Com o intuito de analisar o efeito do tamanho das partículas de reforço no valor do coeficiente de expansibilidade térmica, procede-se à determinação numérica dos vectores homogeneizados dos módulos térmicos β^h associados a células representativas unitárias correspondentes a uma fracção volúmica de reforço de 30%. Utilizaram-se células representativas unitárias com 1 a 8 partículas de reforço, cujas geometrias se encontram ilustradas na figura 9.34. As componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.), são apresentadas nas figuras 9.45 e 9.46. Verifica-se que às diferentes células representativas unitárias correspondem idênticos vectores dos módulos térmicos β^h . Com base não só nos vectores β^h mas também nas matrizes constitutivas \mathbf{D}^h , obtiveram-se os valores homogeneizados para o coeficiente de expansibilidade térmica (*cf.* equação 8.14). Embora os vectores dos módulos térmicos correspondam a um comportamento termicamente isotrópico do material compósito, verifica-se que o mesmo não ocorre com as matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas a cada uma das células representativas unitárias (*cf.* Secção 9.1.3). Isto significa que, em termos dos vectores dos coeficientes de expansibilidade térmica, o material compósito não apresenta, em geral, um comportamento isotrópico. No entanto, verifica-se

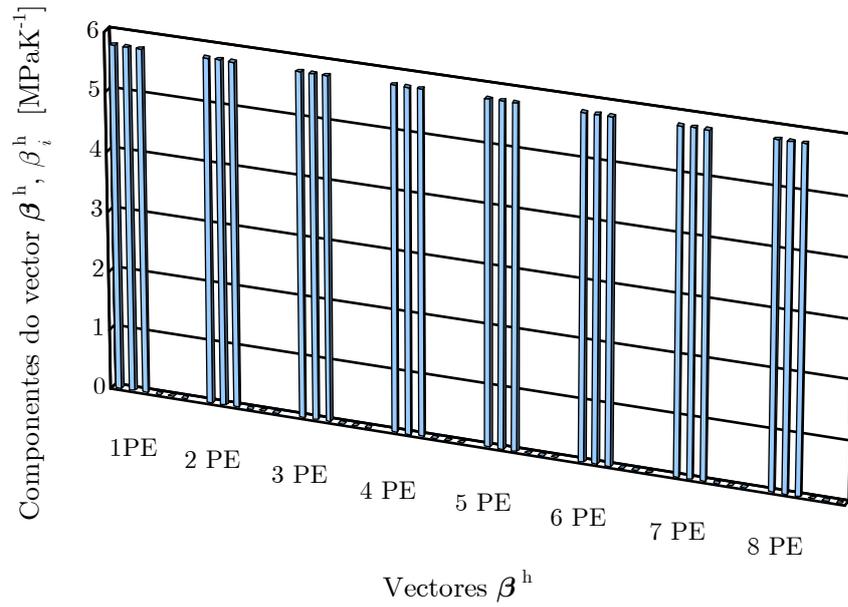


Figura 9.45: Componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.).

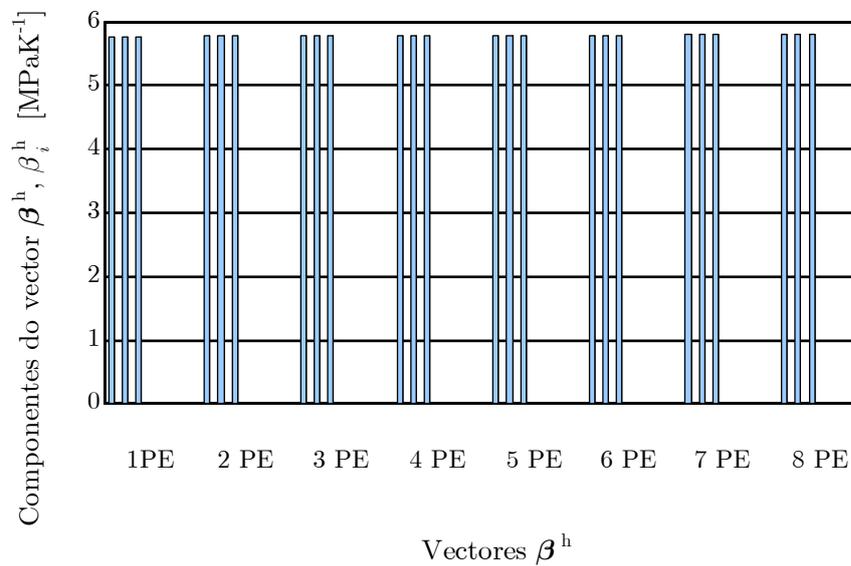


Figura 9.46: Perspectiva frontal das componentes dos vectores dos módulos térmicos β^h , para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.).

que os valores dos coeficientes de expansibilidade térmica não-normal são numericamente insignificantes. Neste contexto, apresentam-se os resultados numéricos correspondentes aos três valores de coeficiente de expansibilidade térmica normal, em conjunto com os resultados analíticos, na figura 9.47. Estes resultados são apresentados em função da relação entre o diâmetro de uma esfera e o comprimento da aresta da célula, ϕ_{da} — razão diâmetro-aresta, associada a cada célula (cúbica) unitária.

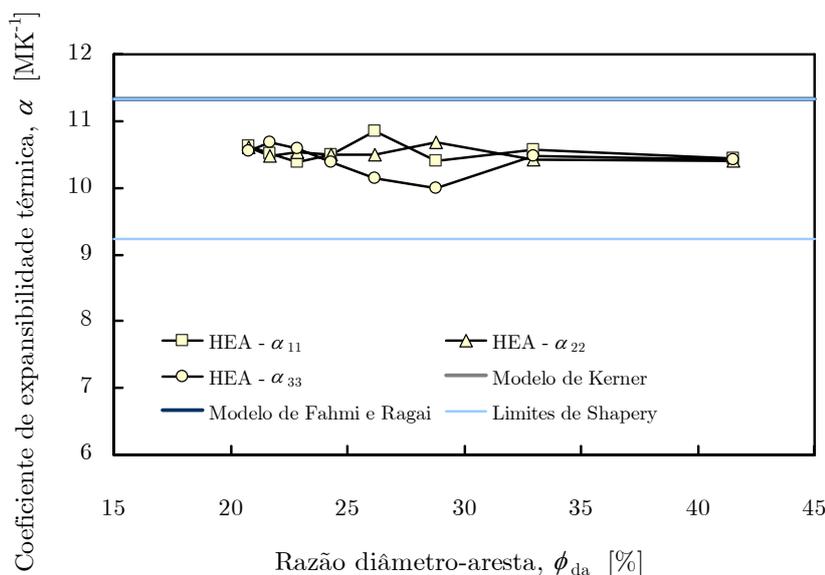


Figura 9.47: Resultados numéricos e de previsão analítica do coeficiente de expansibilidade térmica em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de cobre reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de diamante (30% vol.).

De acordo com a figura 9.47, verifica-se que a tendência média dos valores do coeficiente de expansibilidade térmica é aproximadamente constante. No entanto, os valores associados às células representativas unitárias constituídas por três e por quatro partículas esféricas apresentam, em relação aos valores associados às restantes células representativas unitárias, uma dispersão de resultados significativa. De acordo com o que foi anteriormente referido, este facto deve-se necessariamente ao carácter ortotrópico das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas às referidas células. Este carácter pode ser observado, para um material compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício, nas figuras 9.35 e 9.36, em que se constata que as células representativas unitárias constituídas por três e quatro partículas esféricas de reforço são aquelas a que correspondem os comportamentos mecânicos com maiores níveis de ortotropia. No entanto, a tendência média dos resultados encontra-se em conformidade com a constatação experimental de que o coeficiente de expansibilidade térmica de um material compósito de cobre reforçado com partículas de diamante não depende das dimensões das partículas de reforço [Yoshida e Morigami 2004]. Esta característica é também partilhada por um material compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício [Shen *et al.* 1994].

Por fim, na figura 9.48 apresentam-se o campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva Ψ e os vectores das solicitações termoelastocaracterísticas \mathbf{F}^β , para a célula representativa unitária constituída por três partículas esféricas (*vd.* figura 9.34c). A periodicidade na microescala (Y-periodicidade) do campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva Ψ é ilustrada na figura 9.49, utilizando 8 células representativas unitárias.

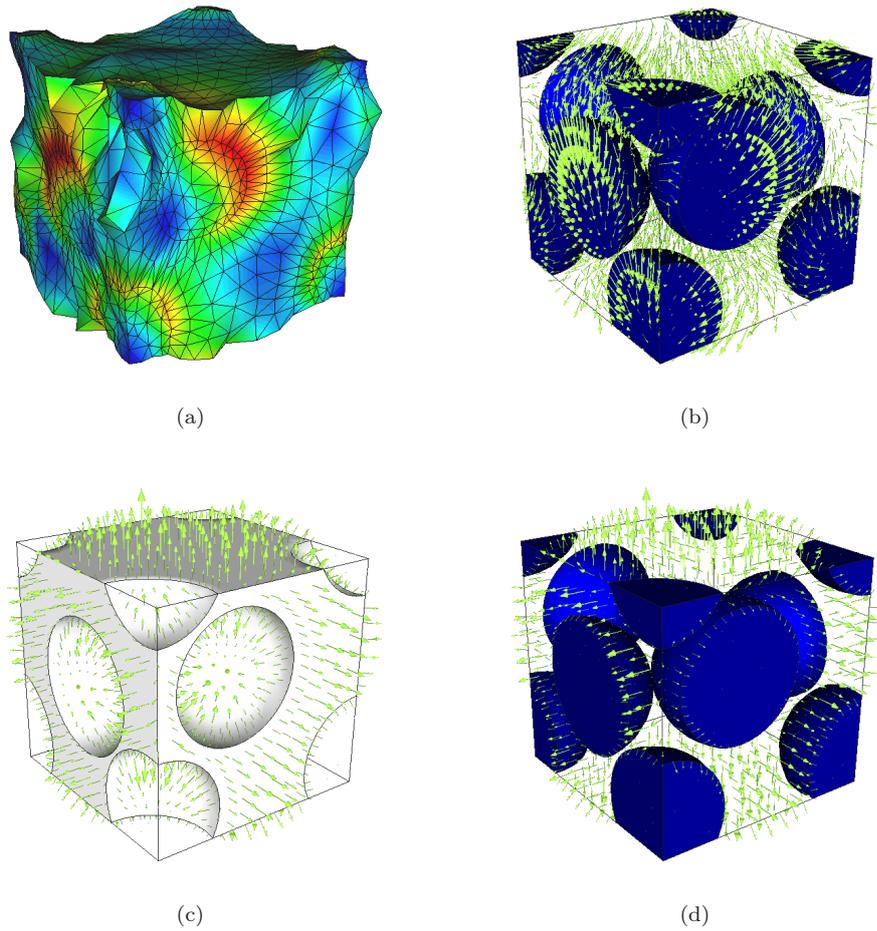


Figura 9.48: Campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva Ψ de uma célula representativa unitária de material compósito de cobre com 3 partículas esféricas de diamante (fracção volúmica de 30%) — representação (a) da configuração deformada da célula representativa unitária e (b) do campo vectorial —, e vectores das solicitações termoelastocaracterísticas \mathbf{F}^β para (c) o material da matriz e (b) o material do reforço.

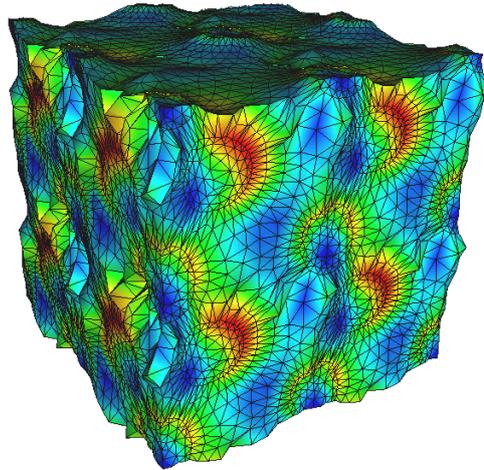


Figura 9.49: Ilustração da Y-periodicidade do campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva Ψ , utilizando 8 células representativas unitárias de material compósito de cobre com 3 partículas esféricas de diamante (fracção volúmica de 30%).

9.3 Determinação de Propriedades Térmicas de Materiais Compósitos

Na presente secção procede-se à aplicação numérica da técnica de homogeneização por expansão assintótica à determinação numérica de propriedades térmicas de materiais compósitos. Desenvolve-se o estudo da influência da fracção volúmica de reforço nos valores efectivos dos coeficientes de condutividade térmica de um material compósito de partículas esféricas. Os resultados numéricos são comparados com resultados quer de previsão analítica quer experimentais. Analisa-se, ainda, o efeito da dimensão das partículas esféricas de reforço nas componentes da matriz homogeneizada de condutividade térmica para uma fracção volúmica de reforço constante. Compram-se os resultados numéricos do coeficiente de condutividade térmica do material compósito com resultados analíticos.

Os materiais da matriz e do reforço do material compósito são um vidro termorresistente de borossilicato (pirex) e a alumina (Al_2O_3), respectivamente. As propriedades termomecânicas destes materiais e a composição química do vidro de borossilicato encontram-se indicadas nas tabelas 9.8 e 9.9, respectivamente [Tessier-Doyen 2003].

Tabela 9.8: Propriedades termomecânicas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com partículas esféricas de alumina.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade do material da matriz, E_m [GPa]	78
Coefficiente de Poisson do material da matriz, ν_m [-]	0,21
Coefficiente de condutividade térmica do material da matriz, k_m [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]	1,4
Coefficiente de expansibilidade térmica do material da matriz, α_m [K^{-1}]	$6,5 \times 10^{-6}$
Módulo de elasticidade do material do reforço, E_r [GPa]	340
Coefficiente de Poisson do material do reforço, ν_r [-]	0,24
Coefficiente de condutividade térmica do material do reforço, k_r [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]	34
Coefficiente de expansibilidade térmica do material do reforço, α_r [K^{-1}]	$7,6 \times 10^{-6}$

Tabela 9.9: Composição química do vidro de borossilicato (% em massa).

SiO ₂	B ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	Na ₂ O	K ₂ O	CaO	CuO	outros
42	18	7	4	2	6	20	1

Procede-se à determinação dos coeficientes de condutividade térmica do material compósito para fracções volúmicas de reforço, f_r , entre 10% e 50%, inclusive, considerando as primeiras células representativas unitárias apresentadas nas figuras 9.21a a 9.21e. Procedendo a um estudo de convergência da matriz homogeneizada de condutividade térmica \mathbf{k}^h , verifica-se que as malhas de elementos finitos tetraédricos previamente utilizadas para a determinação de propriedades elásticas homogeneizadas e de propriedades termoelásticas homogeneizadas de materiais compósitos reforçados com partículas esféricas (*vd.* Secções 9.1.3 e 9.2) dão origem a soluções admissíveis [Rizzo 1991]. Assim, da utilização numérica das referidas malhas de elementos finitos, obtêm-se as matrizes homogeneizadas de condutividade térmica \mathbf{k}^h apresentadas nas figuras 9.50 e 9.51.

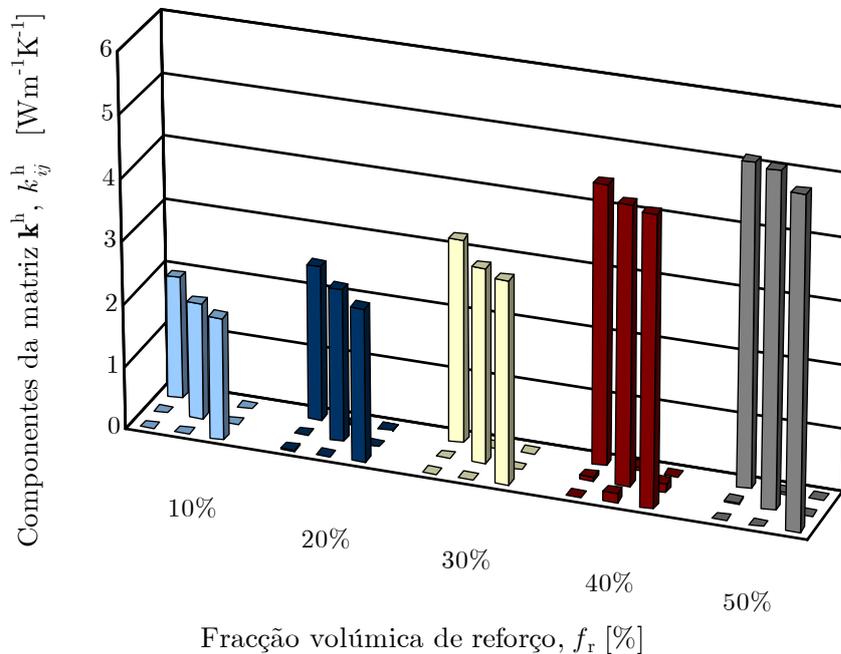


Figura 9.50: Componentes das matrizes de condutividade térmica \mathbf{k}^h , para células representativas unitárias de material compósito de vidro de borossilicato com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de alumina.

Verifica-se que as matrizes homogeneizadas de condutividade térmica \mathbf{k}^h definem materiais que, em termos de condutividade térmica, podem ser considerados ortotrópicos. Este facto indica que a distribuição espacial das partículas de reforço na célula representativa unitária é um factor que influencia o comportamento térmico de um material compósito. Para a célula representativa unitária associada a uma fracção volúmica de reforço de 40%, observa-se a existência de componentes de condutividade térmica não-normal, o que se traduz na existência de um certo grau de anisotropia (da condutividade térmica) por parte do material compósito correspondente. No entanto, estas componentes apenas representam cerca de 3% do valor das componentes de condutividade térmica normal, *i.e.* das componentes diagonais de \mathbf{k}^h , pelo que, em termos práticos, o material compósito em questão pode ser considerado como ortotrópico.

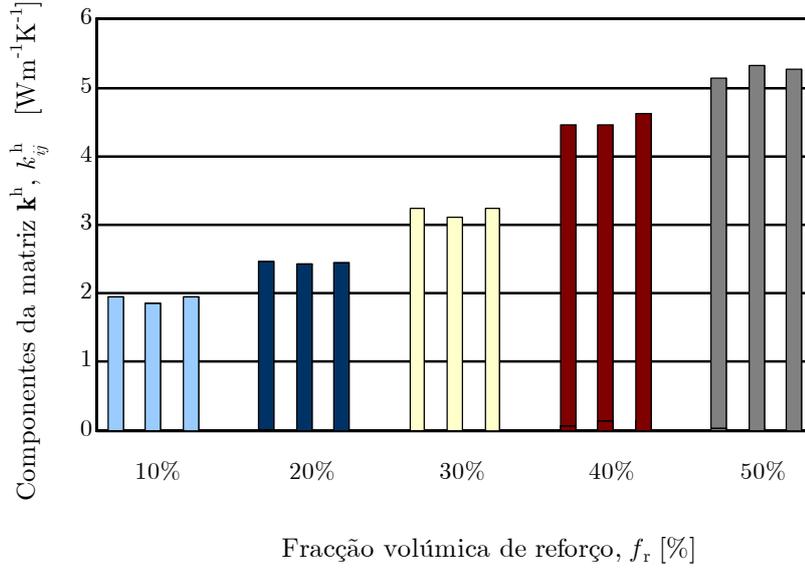


Figura 9.51: Perspectiva frontal das componentes das matrizes de condutividade térmica \mathbf{k}^h , para células representativas unitárias de material compósito de vidro de borossilicato com 10% a 50% de fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de alumina.

Por outro lado, constata-se que os valores dos coeficientes de condutividade térmica normal crescem com o aumento da fracção volúmica de reforço, o que se deve ao facto de a condutividade térmica da alumina ser superior à do vidro de borossilicato.

Os resultados obtidos numericamente são comparados quer com resultados de previsão analítica quer com resultados experimentais. Neste contexto, a previsão analítica do coeficiente de condutividade térmica é efectuada recorrendo aos modelos de Maxwell [Maxwell 1873], de Rayleigh [Rayleigh 1892] e de Landauer [Landauer 1952]. Consideram-se, ainda, os limites superior e inferior de Hashin e Shtrikman para a condutividade térmica [Hashin e Shtrikman 1962].

No modelo de Maxwell assume-se que cada partícula de reforço se encontra embebida numa camada uniforme de material da matriz. Deste modo, não se consideram quaisquer interações entre os campos térmicos associados a diferentes partículas de reforço, resultando o coeficiente de condutividade térmica do material compósito, k^M , em [Maxwell 1873]

$$k^M = k_m \frac{k_r + 2k_m + 2f_r(k_r - k_m)}{k_r + 2k_m - f_r(k_r - k_m)}. \quad (9.49)$$

O modelo de Rayleigh baseia-se nas mesmas hipóteses que o modelo de Maxwell. No entanto, neste caso considera-se que o material compósito é constituído por um arranjo periódico de partículas esféricas de igual dimensão, que definem uma estrutura cúbica. Neste contexto, o coeficiente de condutividade térmica, k^R , corresponde a [Rayleigh 1892]

$$k^R = k_m \frac{k_r + k_m + f_r(k_r - k_m)}{k_r + k_m + f_r(k_m - k_r)}. \quad (9.50)$$

Por fim, no modelo de Landauer consideram-se quer a distribuição das fases constituintes do material compósito quer os contactos que se podem estabelecer entre as partículas de reforço, resultando a condutividade térmica do material compósito reforçado com partículas esféricas, k^L , em [Landauer 1952]

$$k^L = \frac{1}{4} \left[k_r(3f_r - 1) + k_m(2 - 3f_r) + \sqrt{[k_r(3f_r - 1) + k_m(2 - 3f_r)]^2 + 8k_r k_m} \right]. \quad (9.51)$$

Por outro lado, em analogia com o que foi referido para os modelos micromecânicos (*vd.* Secção 9.1.3), é possível obter limites para os valores da condutividade térmica de materiais compósitos com base em princípios variacionais para materiais heterogêneos. Neste contexto, os limites superior (sup) e inferior (inf) de Hashin-Shtrikman (HS) para o coeficiente de condutividade térmica de um material compósito correspondem, no caso de a condutividade térmica do material do reforço ser superior à do material da matriz, a [Hashin e Shtrikman 1962]

$$k_{\text{sup}}^{\text{HS}} = k_r + \frac{1 - f_r}{\frac{1}{k_m - k_r} + \frac{f_r}{3\kappa_r}} \quad \text{e} \quad (9.52)$$

$$k_{\text{inf}}^{\text{HS}} = k_m + \frac{f_r}{\frac{1}{k_r - k_m} + \frac{(1 - f_r)}{3k_m}}, \quad (9.53)$$

respectivamente.

Os resultados de previsão numérica¹⁷ e de previsão analítica para o coeficiente de condutividade térmica são apresentados, em conjunto com os limites analíticos de Hashin-Shtrikman e resultados experimentais [Tessier-Doyen 2003], na figura 9.52. De acordo com o que foi anteriormente referido, apresentam-se apenas os valores numéricos correspondentes aos três coeficientes de condutividade térmica normal.

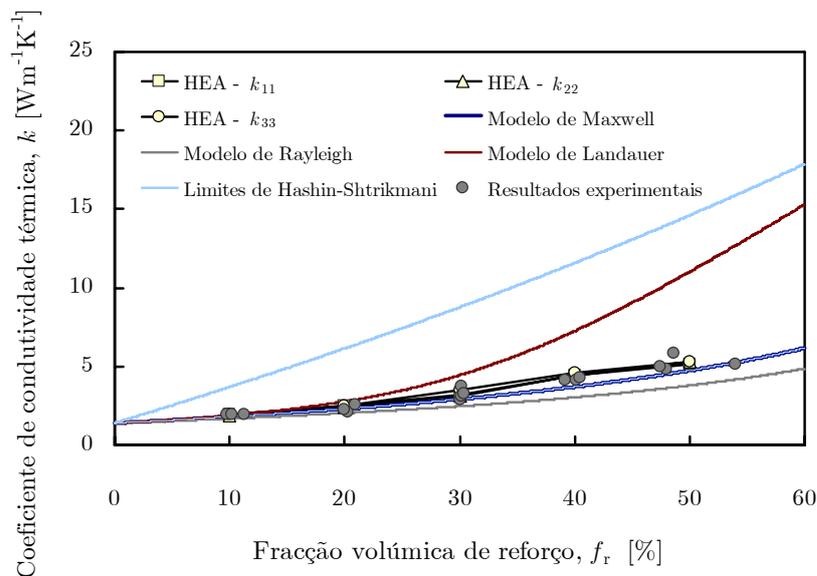


Figura 9.52: Variação do coeficiente de condutividade térmica com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de alumina, para um material compósito de matriz de vidro de borossilicato.

Verifica-se que os resultados numéricos se encontram entre os resultados do modelo de Landauer e os resultados do modelo de Maxwell e do limite inferior de Hashin-Shtrikman (que são coincidentes), sendo os que melhor aproximam, em termos de tendência, os resultados experimentais.

Por outro lado, constata-se que, para as fracções volúmicas de reforço mais elevadas, quer os resultados numéricos quer os resultados experimentais se afastam das curvas do modelo de Maxwell e do limite inferior de Hashin-Shtrikman. Este facto deve-se à existência de fenómenos de interacção entre as fases que constituem o material compósito. No entanto, o afastamento destes valores não é suficientemente relevante para que estes sigam o modelo de Landauer. Deste modo, o número

¹⁷Devido ao facto de as propriedades térmicas corresponderem macroscopicamente a valores homogeneizados, omitiram-se, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, os seus índices superiores h.

de contactos entre partículas de reforço, que apresenta uma condutividade térmica superior à da matriz, não deverá ser significativo, mesmo para as fracções volúmicas mais elevadas.

Assim, constata-se que a técnica de homogeneização por expansão assintótica se revela adequada para se determinarem numericamente os valores efectivos dos coeficientes de condutividade térmica de um material compósito de partículas esféricas.

Em conformidade com o que se efectuou nas Secções 9.1.3 e 9.2, procede-se à determinação numérica das matrizes homogeneizadas de condutividade térmica, \mathbf{k}^h , associadas a células unitárias correspondentes a uma fracção volúmica de reforço de 30%, utilizando-se células representativas unitárias com 1 a 8 partículas de reforço (*vd.* figura 9.34). As componentes das matrizes de condutividade térmica \mathbf{k}^h , para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.), são esquematicamente representadas nas figuras 9.53 e 9.54.

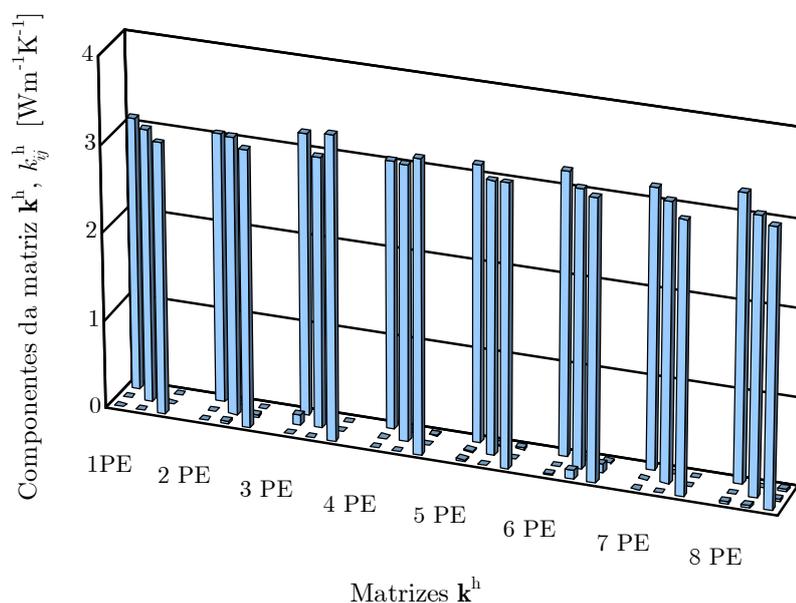


Figura 9.53: Componentes das matrizes de condutividade térmica \mathbf{k}^h , para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.).

Verifica-se que as várias células representativas unitárias dão origem a distintas matrizes homogeneizadas de condutividade térmica \mathbf{k}^h , o que indicia o facto anteriormente referido de que, para além do valor da fracção volúmica de reforço, o coeficiente de condutividade térmica depende da morfologia da distribuição espacial das partículas de reforço na célula representativa unitária. Os valores obtidos para os coeficientes de condutividade térmica normal encontram-se ilustrados, em conjunto com os resultados analíticos, na figura 9.55. Estes resultados são apresentados em função da relação entre o diâmetro de uma esfera e o comprimento da aresta da célula, ϕ_{da} — razão diâmetro-aresta, associada a cada célula (cúbica) unitária. De acordo com a figura 9.55, constata-se que a tendência média dos valores dos coeficientes de condutividade térmica é aproximadamente constante. No entanto, verifica-se a existência de uma dispersão dos valores do coeficiente de condutividade, nomeadamente para as células constituídas por três e por quatro partículas esféricas de reforço, a que correspondem variações relativas de 12,7% e 9,5% do valor do coeficiente de condutividade térmica, respectivamente. Esta dispersão foi também verificada aquando da análise relativa quer ao módulo de elasticidade de um material compósito de matriz de alumínio reforçado

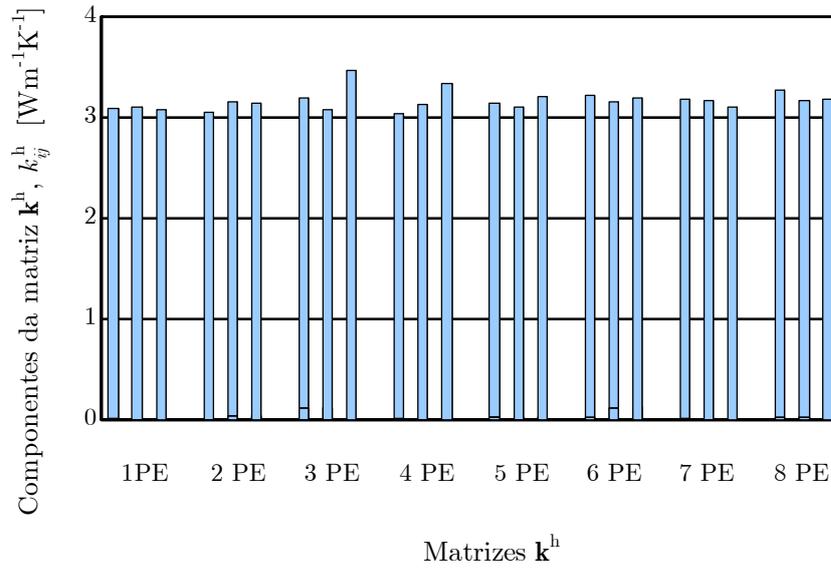


Figura 9.54: Perspectiva frontal das componentes das matrizes de condutividade térmica k^h , para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.).

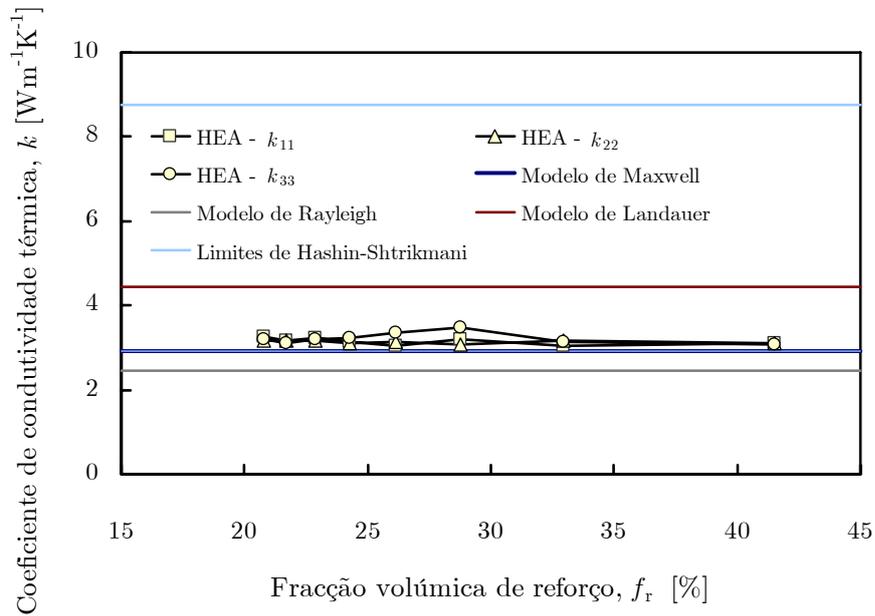


Figura 9.55: Resultados numéricos e de previsão analítica do coeficiente de condutividade térmica em função da razão diâmetro-aresta, para o material compósito de matriz de vidro de borossilicato reforçado com diferentes quantidades de partículas esféricas (PE) de alumina (30% vol.).

com partículas esféricas de carboneto de silício quer ao coeficiente de expansibilidade térmica de um material compósito de matriz de cobre reforçado com partículas esféricas de diamante (*cf.* figuras 9.37 e 9.47). Deste modo, verifica-se que as células representativas unitárias constituídas por três e quatro partículas esféricas de reforço definem materiais compósitos que podem ser associados a comportamentos termomecanicamente ortotrópicos.

Por fim, os campos (vectoriais) de deslocamentos termocaracterísticos Υ e de solicitações termocaracterísticas \mathbf{F}^k são ilustrados na figura 9.56. A periodicidade na microescala (Y-periodicidade) do campo (global) de deslocamentos termocaracterísticos Υ é apresentada na figura 9.57, para 8 células representativas unitárias.

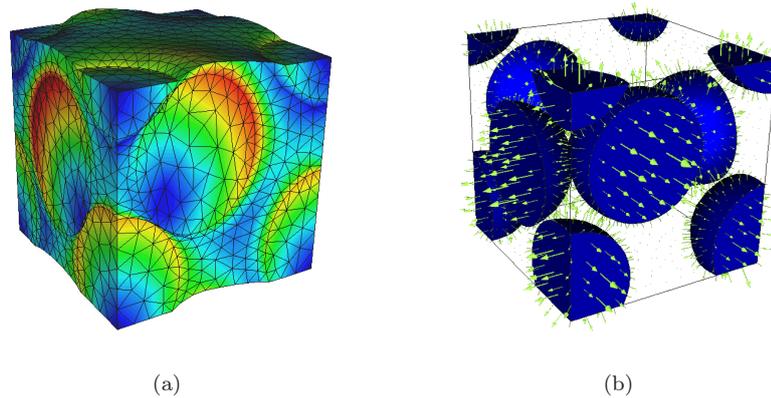


Figura 9.56: Ilustração (a) do campo de deslocamentos termocaracterísticos Υ e (b) do campo de solicitações termocaracterísticas \mathbf{F}^k da célula representativa unitária associada ao material compósito de vidro de borossilicato com 3 partículas esféricas de alumina (fracção volúmica de 30%).

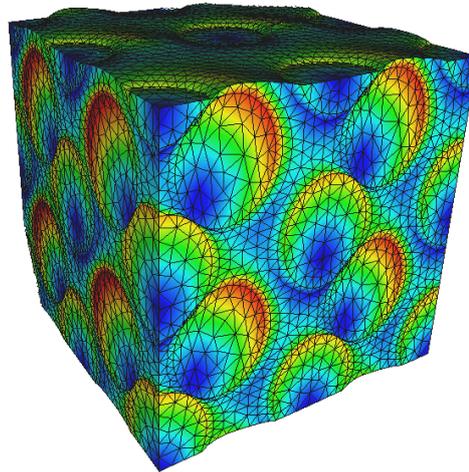


Figura 9.57: Ilustração da Y-periodicidade do campo de deslocamentos termocaracterísticos Υ , utilizando 8 células representativas unitárias de material compósito de vidro de borossilicato com 3 partículas esféricas de alumina (fracção volúmica de 30%).

Capítulo 10

Modelação do Comportamento Termoeelástico de Materiais Compósitos

Com base no método de homogeneização por expansão assintótica, modela-se numericamente o comportamento termoeelástico de um cilindro oco de comprimento infinito, considerando a prescrição de temperaturas nas suas superfícies interna e externa. Analisa-se o efeito da fracção volúmica de reforço, quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas, nos valores máximos dos campos de deslocamento radial, de fluxo superficial de calor por condução na direcção radial e de tensão equivalente de von Mises. Com base no procedimento de localização, procede-se à determinação dos campos microestruturais de fluxo superficial de calor por condução e de tensão equivalente.

A existência de temperaturas prescritas nas paredes interna e externa de um cilindro oco de comprimento infinito leva ao aparecimento de um campo não-linear de temperatura ao longo da sua espessura. Este facto leva à expansão do cilindro e, conseqüentemente, ao desenvolvimento de tensões no interior do seu material. Neste contexto, procede-se à simulação do comportamento termoeelástico de um cilindro de secção circular constituído por um material compósito de alumínio (liga Al6061) reforçado com carboneto de silício (SiC). As propriedades termomecânicas destes materiais encontram-se indicadas na tabela 10.1 [Silzars *et al.* 1992, Teixeira-Dias 1999, Teixeira-Dias e Menezes 2001a, Chollacoop *et al.* 2003].

No presente problema considera-se, a título de exemplo, um cilindro com um raio interno, r_{int} , de 1 cm e um raio externo, r_{ext} , de 2 cm, cujas faces interna e externa se encontram a temperaturas prescritas $T_{\text{int}} = 400$ K e $T_{\text{ext}} = 300$ K, respectivamente. Para a lei constitutiva da termoeelasticidade considera-se uma temperatura de referência $T_0 = 300$ K.

Atendendo à axissimetria do problema proposto, a modelação numérica por elementos finitos é efectuada considerando apenas um quarto da secção transversal de um cilindro com uma altura de 1 mm, procedendo-se à sua discretização espacial com elementos finitos hexaédricos de 20 nós. Impõem-se condições de fronteira de simetria nas faces longitudinais de seccionamento, sendo o estado de deformação plana associado à secção transversal do cilindro simulado com base na prescrição

Tabela 10.1: Propriedades termomecânicas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de alumínio.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade do material da matriz, E_m [GPa]	70,2
Coefficiente de Poisson do material da matriz, ν_m [-]	0,33
Coefficiente de condutividade térmica do material da matriz, k_m [Wm ⁻¹ K ⁻¹]	171
Coefficiente de expansibilidade térmica do material da matriz, α_m [K ⁻¹]	23×10^{-6}
Módulo de elasticidade do material do reforço, E_r [GPa]	410,0
Coefficiente de Poisson do material do reforço, ν_r [-]	0,24
Coefficiente de condutividade térmica do material do reforço, k_r [Wm ⁻¹ K ⁻¹]	200
Coefficiente de expansibilidade térmica do material do reforço, α_r [K ⁻¹]	$4,3 \times 10^{-6}$

de deslocamentos longitudinais nulos nas duas faces de base e de topo. A selecção de elementos hexaédricos quadráticos, em detrimento dos restantes, deve-se ao facto de estes elementos permitirem a construção de malhas estruturadas em que se aproximam de modo exacto as superfícies curvas de fronteira.

Atendendo a que a solução analítica para o campo (radial) de tensão circunferencial associado a um material homogéneo corresponde a [Boley e Weiner 1997, Doghri 2000]

$$\sigma_{\theta\theta}(r) = \frac{E\alpha(T_{\text{ext}} - T_{\text{int}})}{2(1 - \nu)\ln\left(\frac{r_{\text{ext}}}{r_{\text{int}}}\right)} \left[1 - \ln\left(\frac{r_{\text{ext}}}{r}\right) - \frac{r_{\text{int}}^2}{r_{\text{ext}}^2 - r_{\text{int}}^2} \left(1 + \frac{r_{\text{ext}}^2}{r^2} \right) \ln\left(\frac{r_{\text{ext}}}{r_{\text{int}}}\right) \right], \quad (10.1)$$

procede-se a um estudo de convergência [Rizzo 1991] baseado no perfil radial de $\sigma_{\theta\theta}$. Com base no estudo de convergência obtém-se a malha de elementos finitos ilustrada na figura 10.1.

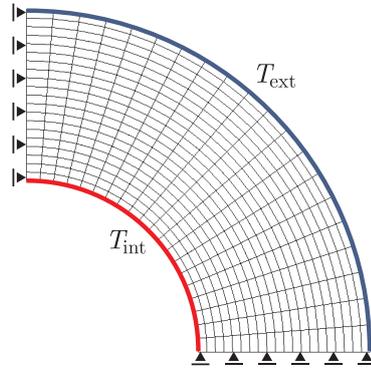


Figura 10.1: Malha estruturada de elementos finitos hexaédricos quadráticos obtida através de um estudo de convergência, para o problema de termoelasticidade.

Com base na malha de elementos finitos procedeu-se à modelação numérica do comportamento do cilindro utilizando dois tipos distintos de célula representativa unitária, nomeadamente com partículas esféricas e com fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas. A utilização do método numérico de homogeneização por expansão assintótica permite a obtenção não só das propriedades efectivas do material compósito utilizado mas também da resposta macroestrutural do componente cilíndrico. Neste contexto, apresentam-se, a título de exemplo, os valores máximos de deslocamento radial d_{rr} , de fluxo superficial de calor por condução na direcção radial q_{rr} e de tensão equivalente de von Mises $\bar{\sigma}$ obtidos para fracções volúmicas de reforço f_r de 10%, 20%, 30%, 40% e 50%. Estes

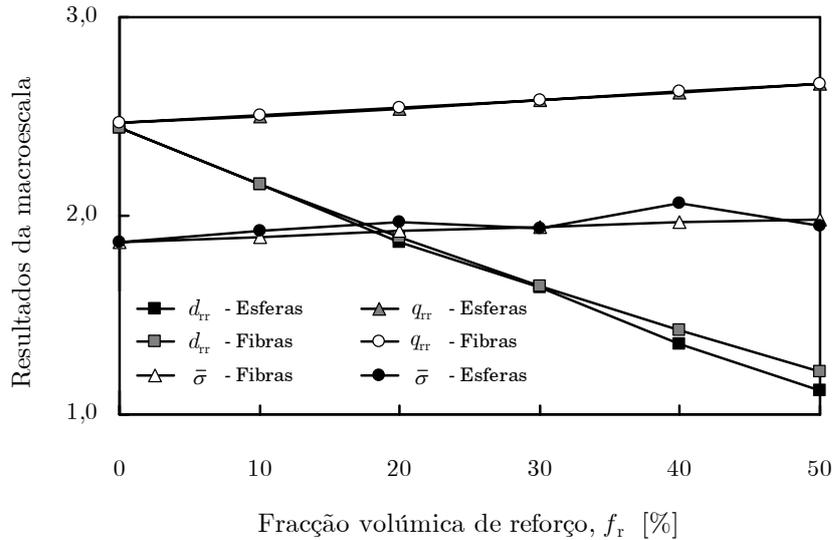


Figura 10.2: Valores máximos de deslocamento radial d_{rr} , de fluxo superficial de calor por condução na direcção radial q_{rr} e de tensão equivalente de von Mises $\bar{\sigma}$ em função da fracção volúmica de reforço.

resultados são apresentados na figura 10.2. Verifica-se que, para as fracções de reforço consideradas, os valores máximos de fluxo superficial de calor por condução são semelhantes para os dois tipos de material compósito. Por outro lado, os valores máximos de deslocamento radial diminuem, em ambos os casos, com a fracção volúmica de reforço. No entanto, verifica-se que o valor associado ao compósito de fibras é superior ao do compósito de partículas esféricas. Esta característica pode ser explicada pelo facto de a geometria cúbica associada à disposição das fibras induzir um maior deslocamento na microestrutura. Além disso, os fenómenos de dilatação lateral das fibras levam a que se formem planos em que a dilatação térmica se verifica de modo mais intenso que para o compósito de partículas esféricas, em que a matriz acomoda as deformações das partículas dispersas de um modo mais eficaz. Em relação ao valor da tensão equivalente, verifica-se que, para o compósito de fibras, este sofre um ligeiro aumento com a fracção volúmica de reforço. No entanto, para o compósito de partículas esféricas, verifica-se a existência de oscilações numéricas. Em termos macroscópicos verifica-se que os dois tipos de célula representativa unitária dão origem a comportamentos semelhantes. Assim, constata-se que a fracção volúmica de reforço parece ser o factor que controla a resposta macroscópica do sistema termomecânico.

No entanto, o método de homogeneização por expansão assintótica caracteriza-se por permitir a obtenção de equações explícitas que possibilitam a determinação dos níveis microestruturais de fluxo superficial de calor por condução, de tensão e de deformação. Neste contexto, nas figuras 10.3 e 10.4 procede-se à representação esquemática do processo de localização de fluxos superficiais de calor por condução em dois elementos finitos da macroescala representados, para um compósito de alumínio reforçado com fibras e com partículas de carboneto de silício, respectivamente. Refira-se que, em termos numéricos, a localização num elemento finito é efectuada num dos seus pontos de Gauss. Em ambos os casos verifica-se que é ao material de reforço que correspondem os valores superiores de fluxo superficial de calor por condução. No entanto, o seu valor médio no volume de cada célula deve corresponder ao valor associado ao valor da macroescala. Nas figuras 10.5 e 10.6 representa-se o processo de localização dos campos vectoriais de fluxo superficial de calor por condução associados à macro- e à microescala, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras e com partículas esféricas de carboneto

de silício, respectivamente. Pode verificar-se que os campos originários do processo de localização apresentam as direcções e os sentidos correspondentes à posição dos respectivos pontos de Gauss na macroescala. O processo de localização permite também a obtenção dos campos de tensão equivalente. Nas figuras 10.7 e 10.8 representa-se o processo de localização dos campos escalares de tensão equivalente associados à macro- e à microescala, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras e com partículas esféricas de carboneto de silício, respectivamente. Em ambos os casos, verifica-se que a tensão equivalente é máxima no reforço. No entanto, a continuidade do reforço no caso do compósito de fibras faz com que as tensões no reforço sejam superiores. Este processo permite proceder ao estudo do início de formação de dano e plastificação em situações mais gerais.

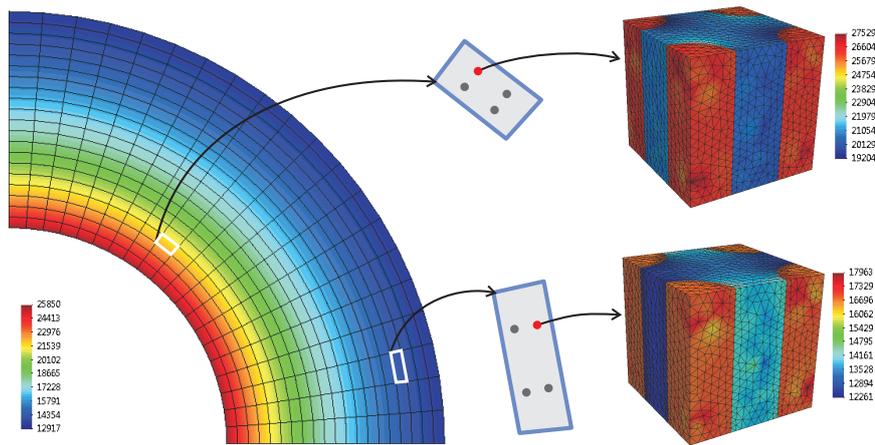


Figura 10.3: Representação esquemática do processo de localização de fluxos superficiais de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras de carboneto de silício.

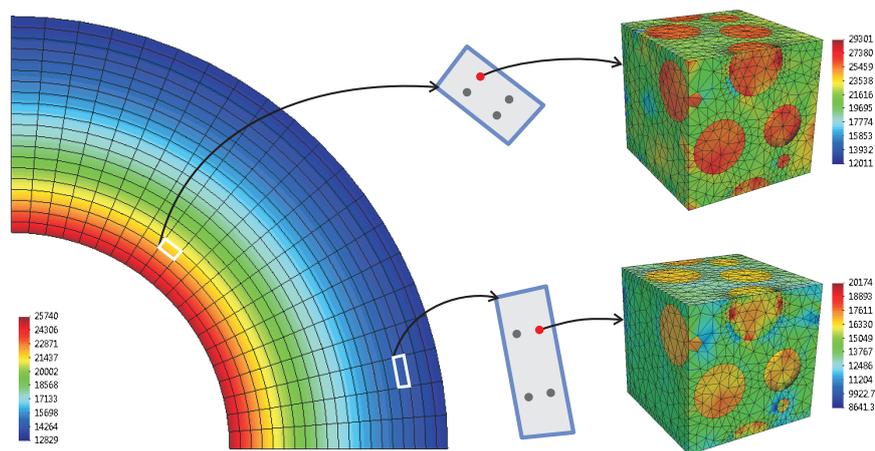


Figura 10.4: Representação esquemática do processo de localização de fluxos superficiais de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.

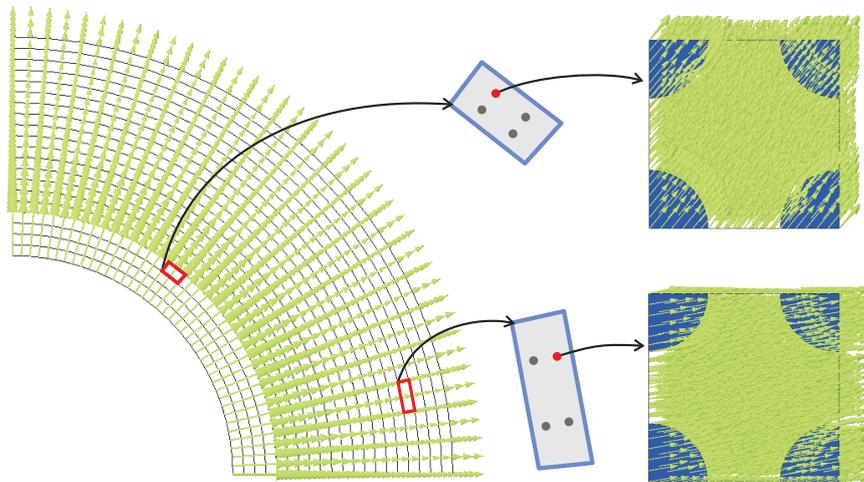


Figura 10.5: Representação esquemática dos campos vectoriais de fluxo superficial de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com fibras de carboneto de silício.

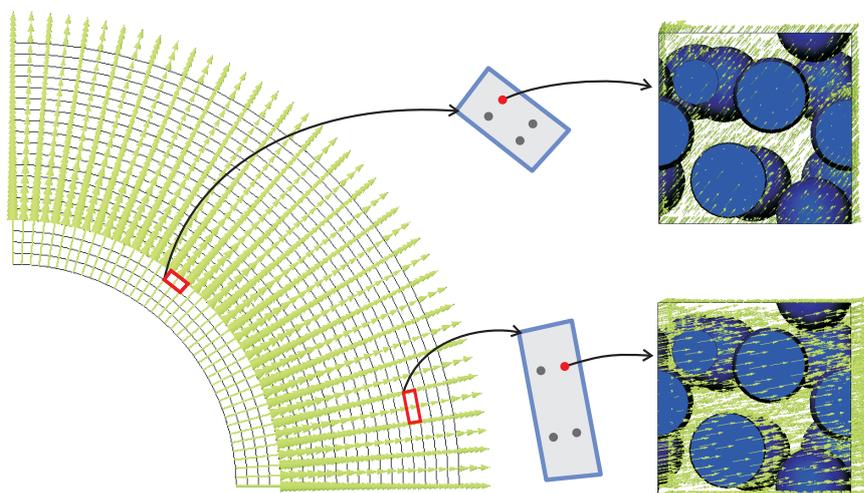


Figura 10.6: Representação esquemática dos campos vectoriais de fluxo superficial de calor por condução, em dois elementos finitos da macroescala de um compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.

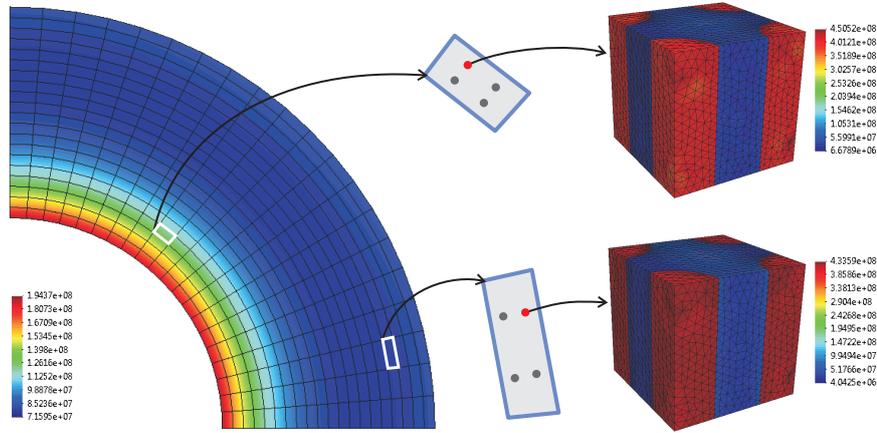


Figura 10.7: Representação esquemática do processo de localização da tensão equivalente, em dois elementos finitos da macroscala de um compósito de alumínio reforçado com fibras de carbono de silício.

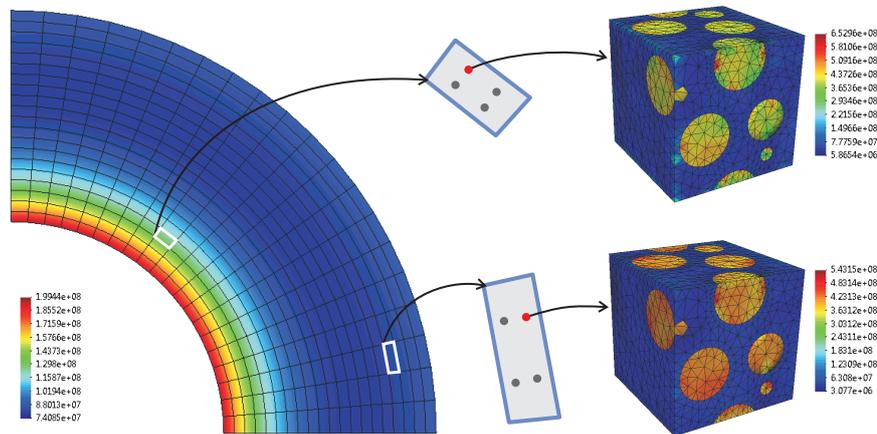


Figura 10.8: Representação esquemática do processo de localização da tensão equivalente, em dois elementos finitos da macroscala de um compósito de alumínio reforçado com partículas esféricas de carbono de silício.

Capítulo 11

Modelação de Comportamento Elastoplástico em Provetes Entalhados

Com base em análises elásticas por elementos finitos, determina-se o factor de concentração de tensões de um provete com entalhe circular, utilizando hexaedros lineares e recorrendo quer à integração completa quer à integração reduzida selectiva $\bar{\mathbf{B}}$. Os resultados numéricos são comparados com um valor de previsão analítica. Obtêm-se valores de deformação elastoplástica para vários carregamentos nominais de tracção, através não só da modelação numérica não-linear por elementos finitos mas também de resultados analíticos obtidos recorrendo à regra de Neuber e ao método da densidade de energia da deformação equivalente. Por fim, o desempenho computacional de simulações numéricas é avaliado utilizando um cluster Beowulf. Analisam-se, para os diferentes tipos de condicionamento utilizados no método do gradiente conjugado, não só as evoluções do speed-up e da eficiência associados ao processo de cálculo paralelo mas também alguns aspectos relacionados com a evolução dos resíduos numéricos.

11.1 Introdução

O método dos elementos finitos é uma das técnicas numéricas mais robustas e versáteis que são utilizadas hoje em dia na engenharia. A capacidade actual dos computadores permite considerar aspectos fundamentais na modelação numérica, tais como, por exemplo, a complexidade geométrica, a não-linearidade das propriedades dos materiais, *etc.* Assim, em aplicações estruturais, este método numérico permite determinar a resposta de uma estrutura de forma arbitrária para diversos tipos de carregamento e de condições de fronteira. No caso particular de estruturas entalhadas, existe uma descontinuidade geométrica que provoca uma intensificação dos níveis locais de tensão e de deformação e que deve ser tomada em consideração. Por outro lado, as não-linearidades associadas ao entalhe, quer em termos geométricos quer em termos de comportamento do material,

condicionam a distribuição das tensões e das deformações locais, em especial na proximidade das descontinuidades associadas ao referido entalhe. Com o intuito de analisar a influência destes factores nos valores locais de deformação procede-se à modelação numérica do comportamento de um provete entalhado utilizando o método dos elementos finitos. Determina-se o factor de concentração de tensões numa análise no domínio elástico e, em seguida, obtêm-se, com base numa análise no domínio elastoplástico, os valores locais de deformação ϵ , que são comparados com resultados de previsão analítica e resultados experimentais. Por fim, avalia-se o desempenho computacional da modelação numérica do comportamento mecânico do provete entalhado utilizando um *cluster* Beowulf. Analisam-se, para os preconditionadores utilizados no método do gradiente conjugado, não só as evoluções do *speed-up* e da eficiência associados ao processo de cálculo paralelo mas também alguns aspectos relacionados com a evolução dos resíduos numéricos.

11.2 Determinação do Factor de Concentração de Tensões — Análise Elástica

Estudos baseados na teoria da elasticidade mostram que em zonas de corpos elásticos em que existam descontinuidades geométricas ocorre um incremento de tensão. Assim, em regiões entalhadas de componentes estruturais verifica-se um fenómeno de intensificação localizada do valor das tensões, usualmente designado por concentração de tensões. Neste contexto, a análise da distribuição de tensões e de deformações em componentes entalhados é tradicionalmente efectuada com base na utilização do factor teórico de concentração de tensões K_t , também designado factor elástico de concentração de tensões. Em situações de carregamento uniaxial de um componente entalhado, este factor é definido pela expressão

$$K_t = \frac{\sigma_{\text{máx}}}{S}, \quad (11.1)$$

em que $\sigma_{\text{máx}}$ é a tensão máxima existente na zona do entalhe e S é a tensão nominal na secção transversal. A determinação do factor K_t implica a determinação da distribuição de tensões na zona do entalhe, a qual se pode efectuar através da utilização de métodos analíticos, numéricos (*e.g.* elementos finitos) e experimentais (*e.g.* fotoelasticidade, extensometria eléctrica). Durante vários anos, muitos investigadores utilizaram a teoria da elasticidade e os métodos experimentais para determinarem os factores teóricos de concentração de tensões de variadas geometrias, tendo Peterson compilado uma grande parte destes resultados (*vd.* [Pilkey 1997]). No entanto, o método dos elementos finitos revela-se uma técnica expedita e robusta para a determinação do factor de concentração de tensões K_t .

Neste contexto, procede-se à determinação do factor de concentração de tensões de um provete de alumínio (liga AlMgSi1) com entalhe circular. As análises numéricas são efectuadas com hexaedros lineares, utilizando os esquemas quer de integração completa (HL-IC) quer de integração reduzida selectiva (HL-IRS) e considerando um material isotrópico e homogéneo, com uma lei de comportamento linear elástica. A modelação numérica do provete é efectuada com malhas compatíveis tridimensionais de elementos finitos, obtidas através de um estudo de convergência da solução, *i.e.* de refinamento de malha, com base na variação relativa da tensão máxima local em função do número de graus de liberdade do modelo, para um deslocamento prescrito axial e monotonamente aplicado. Devido ao facto de a geometria e o carregamento aplicado ao provete com entalhe circular apresentarem simetria quer longitudinal quer transversal, considera-se apenas um oitavo da geometria do provete na modelação numérica por elementos finitos (*cf.* figura 11.1). O provete, que apresenta um entalhe circular com um diâmetro de 10 mm, tem um comprimento de 80 mm, uma largura de 40 mm e uma espessura de 8 mm [Trautwein 2005].

Visto na raiz do entalhe existirem fortes gradientes de tensão, as malhas de elementos finitos são refinadas nessa zona, tentando manter-se a forma cúbica dos elementos e evitando a existência de distorções geométricas, com o fim de minimizar os erros de interpolação e maximizar a taxa de convergência da solução numérica [Bathe 1996]. Para cada uma das malhas consideradas, obtêm-se,

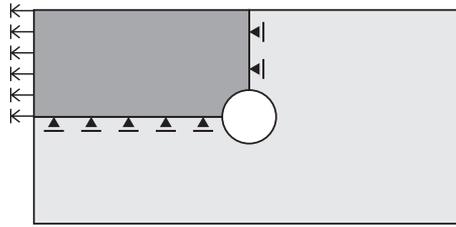


Figura 11.1: Representação esquemática bidimensional da geometria e das condições de fronteira na modelação numérica do provete entalhado.

nos elementos finitos da zona da raiz do entalhe, o valor máximo (local) da tensão longitudinal σ , para um carregamento nominal de deslocamento prescrito. A magnitude do carregamento nominal é definida com base no valor mínimo da superfície da secção transversal da zona entalhada. Neste contexto, procede-se a um estudo de convergência baseado na variação do factor de concentração de tensões com o número de graus de liberdade do modelo [Rizzo 1991]. Os resultados do estudo de convergência são apresentados na figura 11.2, em que também é apresentado o valor analítico do factor de concentração de tensões para o provete entalhado em análise [Young 1989].

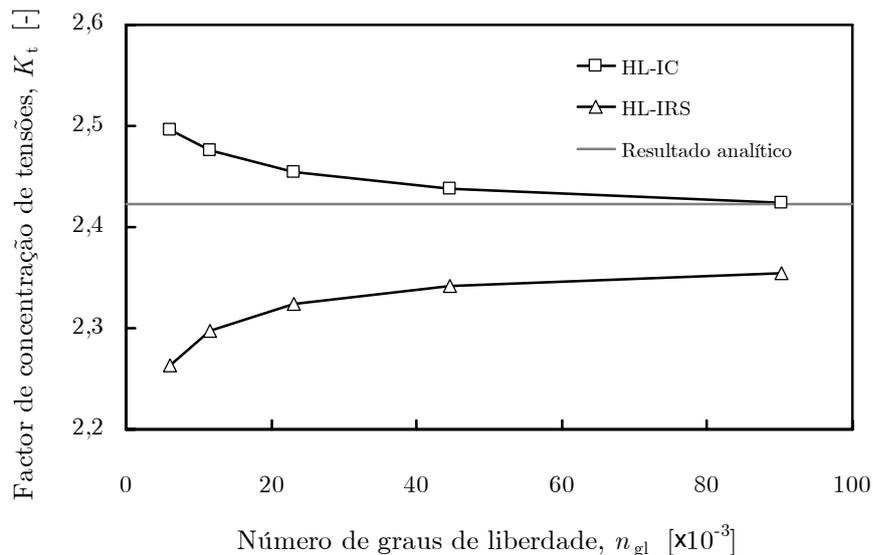


Figura 11.2: Evolução do factor de concentração de tensões com o número de graus de liberdade, para os esquemas de integração completa e de integração reduzida selectiva.

Verifica-se que os resultados associados a ambos os esquemas de integração têm uma variação monótona com o número de graus de liberdade. No entanto, os resultados do factor de concentração de tensões relativos ao esquema de integração completa sofrem uma diminuição, ao contrário dos resultados associados ao esquema de integração reduzida selectiva, que se comportam de modo contrário. Além disso, verifica-se que os primeiros atingem o valor analítico do factor de concentração de tensões para o máximo número de graus de liberdade. Pelo contrário, a utilização do esquema de integração reduzida selectiva dá origem a soluções que apresentam desvios superiores, em valor absoluto, a 2,8% do valor analítico. Esta observação pode ser explicada pelo facto de, numericamente, a integração reduzida selectiva levar a uma diminuição da rigidez do provete entalhado. Assim, a aplicação de um deslocamento prescrito axial leva a que as reacções associadas ao equilíbrio mecânico sejam inferiores às obtidas com a integração completa. Deste modo, a uti-

lização simultânea do esquema de integração reduzida selectiva e de um deslocamento prescrito leva a que os valores do factor de concentração de tensões sejam subestimados. Na figura 11.3 são apresentados os resultados da variação relativa do factor de concentração de tensões com o número de graus de liberdade, para os esquemas de integração completa e de integração reduzida selectiva.

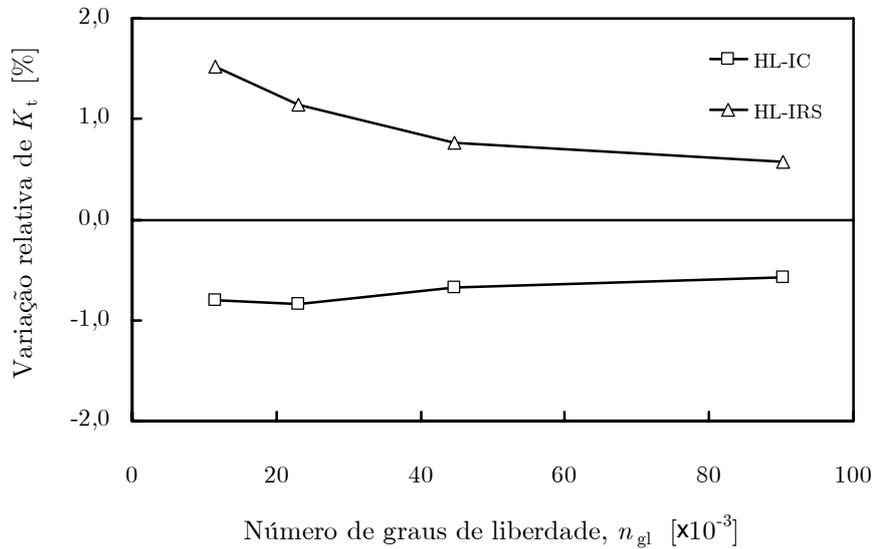


Figura 11.3: Evolução da variação relativa do factor de concentração de tensões com o número de graus de liberdade, para os esquemas de integração completa e de integração reduzida selectiva.

Embora os resultados de ambos os esquemas apresentem, em termos de valor absoluto, variações relativas cerca de 0,6%, a discrepância entre o valor analítico e os resultados numéricos de integração reduzida selectiva leva a que se considere o valor obtido com base no esquema de integração completa, $K_t = 2,42$, como a solução admissível. O valor obtido difere cerca de 0,1% do analítico. A malha de elementos finitos associada à solução admissível, constituída por 80 000 hexaedros lineares e 90 211 graus de liberdade, encontra-se representada na figura 11.4, em que se apresenta um detalhe da zona da raiz do entalhe. Devido ao facto de o valor máximo da tensão longitudinal se verificar a meio da espessura do provete, a malha de elementos finitos foi refinada no sentido da sua superfície posterior, conforme se detalha na figura 11.4.

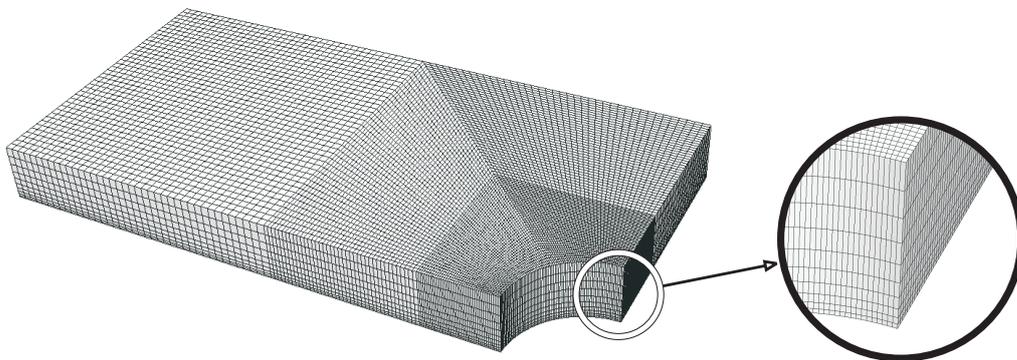


Figura 11.4: Malha de elementos finitos obtida através do estudo de convergência e detalhe da zona da raiz do entalhe.

11.3 Determinação das Deformações Locais — Análise Elastoplástica

Para além do método dos elementos finitos, em situações em que se verifica a ocorrência de fenómenos de plasticidade na raiz de entalhes com geometrias simples, vários métodos analíticos têm vindo a ser preferencialmente utilizados, tais como, por exemplo, a regra de Neuber [Neuber 1961] e o método da densidade de energia da deformação equivalente, também denominado método de Molski-Glinka [Molski e Glinka 1981]. Estes métodos analíticos visam relacionar, através de equações matemáticas simplificadas, as tensões e as deformações elastoplásticas locais (geralmente da raiz do entalhe) com as tensões e as deformações nominais. Uma síntese de alguns desses métodos pode ser consultada, por exemplo, em [Seeger *et al.* 1977].

Em geral, os valores das grandezas elastoplásticas locais (tensão σ e deformação ϵ) verificados na raiz de um entalhe sujeito a uma situação de carregamento uniaxial são relacionados com os valores das grandezas nominais (tensão S e deformação e) através dos factores de concentração de tensões K_σ e de deformações K_ϵ , definidos por

$$K_\sigma = \frac{\sigma}{S} \quad \text{e} \quad (11.2)$$

$$K_\epsilon = \frac{\epsilon}{e}. \quad (11.3)$$

Stowell [Stowell 1950], e Hardrath e Ohman [Hardrath e Ohman 1951] iniciaram estudos relativos à concentração de tensões no domínio elastoplástico. Posteriormente, Neuber [Neuber 1961], aquando da análise da solicitação monótona de provetes entalhados, observou que, após a ocorrência de plastificação localizada no entalhe, o factor K_ϵ aumentava enquanto, pelo contrário, o factor K_σ decrescia. Devido a este facto, Neuber sugeriu que durante a deformação plástica localizada a média geométrica de K_σ e K_ϵ deve permanecer igual a K_t , o que é expresso pela relação

$$K_t = \sqrt{K_\sigma K_\epsilon}, \quad (11.4)$$

que, do ponto de vista prático, é mais usualmente utilizada na forma

$$K_t^2 = K_\sigma K_\epsilon. \quad (11.5)$$

A regra de Neuber consiste no método aproximado mais frequentemente utilizado no cálculo de tensões e deformações elastoplásticas locais. No caso particular de carregamentos que originem tensões unicamente elásticas, sendo linear a relação entre a tensão e a deformação (lei de Hooke), a equação 11.5 corresponde, de acordo com as relações 11.2 e 11.3, a

$$K_t^2 \frac{S^2}{E} = \frac{\sigma^2}{E}, \quad (11.6)$$

em que E é o módulo de elasticidade longitudinal do material considerado. No entanto, no caso de ocorrer plastificação localizada na raiz do entalhe, a determinação das tensões e das deformações locais elastoplásticas requer a utilização de uma curva não-linear para a relação tensão-deformação, usualmente definida por uma equação de Ramberg-Osgood [Ramberg e Osgood 1943], isto é,

$$\epsilon = \frac{\sigma}{E} + \left(\frac{\sigma}{\tilde{k}} \right)^{\frac{1}{n}}, \quad (11.7)$$

em que \tilde{k} e n são o coeficiente e o expoente de encruamento (monótonos), respectivamente. Deste modo, no regime elastoplástico localizado, a equação 11.5 corresponde a

$$K_t^2 \frac{S^2}{E} = \frac{\sigma^2}{E} + \sigma \left(\frac{\sigma}{\tilde{k}} \right)^{\frac{1}{n}}. \quad (11.8)$$

Seeger e Heuler [Seeger e Heuler 1980] mostraram a aplicabilidade da generalização da equação 11.5 a carregamentos monótonos em que a tensão nominal é superior à tensão de cedência do material. Nesta situação, utiliza-se uma relação (não-linear) tensão-deformação para calcular quer a deformação local quer a deformação nominal, obtendo-se

$$K_t^2 \left[\frac{S^2}{E} + S \left(\frac{S}{\bar{k}} \right)^{\frac{1}{n}} \right] = \frac{\sigma^2}{E} + \sigma \left(\frac{\sigma}{\bar{k}} \right)^{\frac{1}{n}}. \quad (11.9)$$

Alternativamente à regra de Neuber, Molski e Glinka [Molski e Glinka 1981] propuseram, posteriormente, o denominado método da densidade de energia da deformação equivalente. Este método baseia-se no conceito de que a densidade de energia de deformação na raiz de um entalhe, W_σ , pode ser calculada, na presença de deformação plástica localizada contiguamente à extremidade do entalhe, com base na distribuição teórica das tensões elásticas. Deste modo, a densidade de energia de deformação local pode ser utilizada, em conjunto com a relação (não-linear) tensão-deformação, na obtenção das tensões e das deformações locais.

Molski e Glinka assumiram que a relação existente entre a densidade de energia de deformação local W_σ e a densidade de energia de deformação nominal W_S num regime elástico de tensão monótona uniaxial, isto é,

$$W_\sigma = K_t^2 W_S, \quad (11.10)$$

se mantém válida no caso de ocorrer deformação plástica, desde que esta ocorra localmente. Deste modo, o comportamento linear elástico do material contíguo à raiz do entalhe controla a energia que a zona plástica localizada absorve, podendo a densidade de energia W_σ ser calculada pela equação

$$W_\sigma = \int_0^\epsilon \sigma(\bar{\epsilon}) d\bar{\epsilon}. \quad (11.11)$$

Assim, no caso particular de um carregamento que provoque quer tensões nominais quer tensões locais elásticas, a equação 11.10 resulta na expressão 11.6. No entanto, existindo plastificação localizada na raiz do entalhe, utilizando a equação 11.7 para determinar as deformações elastoplásticas locais, a equação 11.10 toma a forma

$$K_t^2 \frac{S^2}{2E} = \frac{\sigma^2}{2E} + \frac{\sigma}{n+1} \left(\frac{\sigma}{\bar{k}} \right)^{\frac{1}{n}}. \quad (11.12)$$

A aplicabilidade da equação 11.10 pode ser estendida a carregamentos monótonos em que a tensão nominal é superior à tensão de cedência do material, obtendo-se [Polák 1983]

$$K_t^2 \left[\frac{S^2}{2E} + \frac{S}{n+1} \left(\frac{S}{\bar{k}} \right)^{\frac{1}{n}} \right] = \frac{\sigma^2}{2E} + \frac{\sigma}{n+1} \left(\frac{\sigma}{\bar{k}} \right)^{\frac{1}{n}}. \quad (11.13)$$

Assim, verifica-se que os métodos de Neuber e da densidade de energia da deformação equivalente (método de Molski-Glinka) coincidem no domínio puramente elástico. No entanto, ocorrendo deformação plástica localizada na raiz do entalhe, os dois métodos dão origem a resultados distintos¹ (*cf.* equações 11.8 e 11.12). Por outro lado, no caso da ocorrência de deformação plástica generalizada, não será de esperar a aplicabilidade das equações 11.9 e 11.13, pois o factor K_t não será válido nessa situação [Glinka 1985a].

Na figura 11.5 representa-se esquematicamente a interpretação gráfica da aplicação dos métodos de Neuber e da densidade de energia da deformação equivalente ao cálculo das tensões e das deformações locais no regime de deformação plástica localizada, para um carregamento monótono de tracção. De acordo com o método da densidade de energia da deformação equivalente, obter

¹Exceptua-se a situação particular em que $n = 1$, degenerando a relação tensão-deformação definida pela equação 11.7 numa relação linear.

as tensões e as deformações na raiz do entalhe corresponde a determinar o ponto $(\epsilon_{MG}, \sigma_{MG})$ na curva não-linear associada à relação tensão-deformação, de modo a que a área a cinza-claro seja numericamente igual à densidade de energia W_S , representada pela área a cinza-escuro, multiplicada pelo quadrado de K_t (*vd.* figura 11.5). Por outro lado, de acordo com o método de Neuber, o referido cálculo corresponde à determinação do ponto (ϵ_N, σ_N) situado na mesma curva do material, de modo a que a área do triângulo incolor seja numericamente igual ao produto da área a cinza-escuro pelo quadrado de K_t . Neste contexto, é de esperar que, em situações em que ocorra deformação plástica localizada, as tensões e as deformações locais estimadas com base no método de Neuber sejam mais elevadas que as relativas ao método da densidade de energia da deformação equivalente, para a mesma tensão nominal S . Na realidade, o método da densidade de energia da deformação equivalente é referido [Glinka 1985a, Glinka 1985b] como sendo apropriado para o cálculo das tensões e deformações inelásticas na extremidade de entalhes, dando melhores resultados que o método de Neuber, não só em condições de carregamento tanto monótono como cíclico mas também para diversos tipos de material e de geometria.

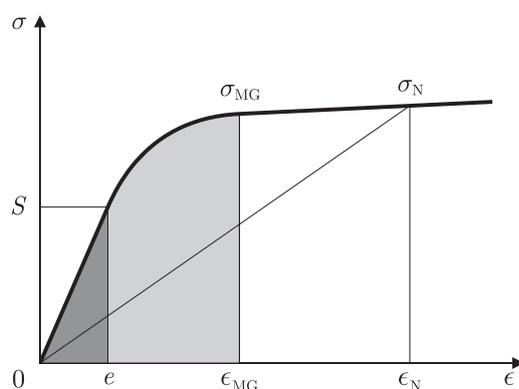


Figura 11.5: Representação esquemática da interpretação gráfica da aplicação dos métodos de Neuber e da densidade de energia da deformação equivalente ao cálculo das tensões e deformações locais no regime de deformação plástica localizada, para um carregamento monótono de tracção.

As relações anteriores são válidas apenas em situações em que se verifique a existência de um estado de tensão uniaxial na raiz do entalhe. No entanto, em situações em que a espessura w do componente entalhado seja bastante superior ao valor do raio de curvatura r_{cr} na raiz do entalhe, verifica-se, tal como se ilustra na figura 11.6, a existência de um estado de deformação plana na zona do entalhe [Dowling 2006]. Neste caso, torna-se necessária a obtenção de uma expressão equivalente para a curva tensão-deformação, visto esta ser originalmente obtida através de ensaios em que se verifica a existência de um estado uniaxial de tensão. Neste contexto, a relação tensão-deformação de Ramberg-Osgood para uma condição de deformação plana relaciona a tensão principal σ_1 com a deformação principal ϵ_1 através da relação

$$\epsilon_1 = \frac{\sigma_1}{E_1} + \left(\frac{\sigma_1}{\tilde{k}_1} \right)^{\frac{1}{n_1}}, \quad (11.14)$$

em que E_1 , \tilde{k}_1 e n_1 são o módulo de elasticidade longitudinal, e o coeficiente e o expoente de encruamento (monótonos), respectivamente, associados ao comportamento do material num estado de deformação plana.

De acordo com Dowling *et al.* [Dowling *et al.* 1977], a relação tensão-deformação de Ramberg-Osgood obtida para um estado uniaxial de tensão pode ser adaptada para um estado de deformação

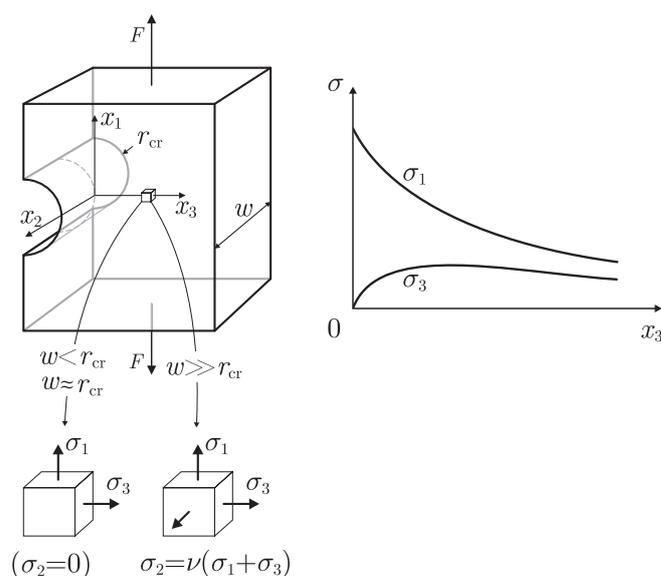


Figura 11.6: Representação esquemática do estado de tensão na zona da raiz de um entalhe, para o carregamento monótono de tracção de um provete entalhado.

plana com base na utilização das relações

$$E_1 = \frac{E}{1 - \nu^2}, \quad (11.15)$$

$$\sigma_1 = \frac{\sigma}{\sqrt{1 - \tilde{\nu} + \tilde{\nu}^2}} \quad \text{e} \quad (11.16)$$

$$\epsilon_1 = \frac{\epsilon(1 - \tilde{\nu}^2)}{\sqrt{1 - \tilde{\nu} + \tilde{\nu}^2}}, \quad (11.17)$$

em que

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu\sigma + 0,5E\epsilon_p}{\sigma + E\epsilon_p}, \quad (11.18)$$

sendo ν o coeficiente de Poisson, $\tilde{\nu}$ o coeficiente generalizado de Poisson e ϵ_p a componente plástica da deformação. Neste contexto, procede-se à determinação da deformação local ϵ no provete entalhado para diferentes níveis de tensão nominal S , com base quer no método dos elementos finitos quer nos métodos de Neuber e de Molski-Glinka. Os resultados numéricos são calculados utilizando a malha de elementos finitos obtida no estudo de convergência do problema elástico, considerando quer o esquema de integração completa (HL-IC) quer o esquema de integração reduzida selectiva (HL-IRS) e uma lei bilinear de comportamento elastoplástico. Por outro lado, os resultados de previsão analítica são obtidos com base nos métodos de Neuber e de Molski-Glinka, considerando quer um estado de tensão plana (ETP) quer um estado de deformação plana (EDP) no provete.

Na tabela 11.2 apresentam-se os valores das propriedades mecânicas do alumínio da liga AlMgSi1. À excepção do coeficiente de Poisson, para o qual se considerou um valor da fonte bibliográfica [Pinho-da-Cruz *et al.* 2000], estes valores foram obtidos a partir dos resultados experimentais da curva tensão-deformação (para provetes não-entalhados) que se apresentam na tabela 11.1 [Trautwein 2005]. Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica são apresentados, em conjunto com resultados experimentais [Trautwein 2005], na figura 11.7.

Verifica-se que os resultados numéricos associados ao esquema quer de integração completa quer de integração reduzida selectiva são semelhantes em termos do valor de deformação. Este facto está de acordo com as considerações anteriormente referidas acerca da utilização da integração

Tabela 11.1: Resultados experimentais da curva tensão-deformação obtida a partir de provetes não-entalhados da liga de alumínio AlMgSi1.

ϵ [%]	σ [MPa]
0,000	0
0,310	210
0,335	223
0,381	237
0,403	241
0,499	247
0,692	249
1,049	253
2,048	257
3,074	261
4,001	265
4,690	266
6,024	267
7,523	270

Tabela 11.2: Propriedades mecânicas da liga de alumínio AlMgSi1.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade, E [GPa]	67,7
Coefficiente de Poisson, ν [-]	0,32
Coefficiente de encruamento, n [-]	0,0254
Expoente de encruamento, \tilde{k} [MPa]	286,7
Módulo de encruamento isotrópico, H [MPa]	476,0
Tensão de cedência, σ_c [MPa]	247,0

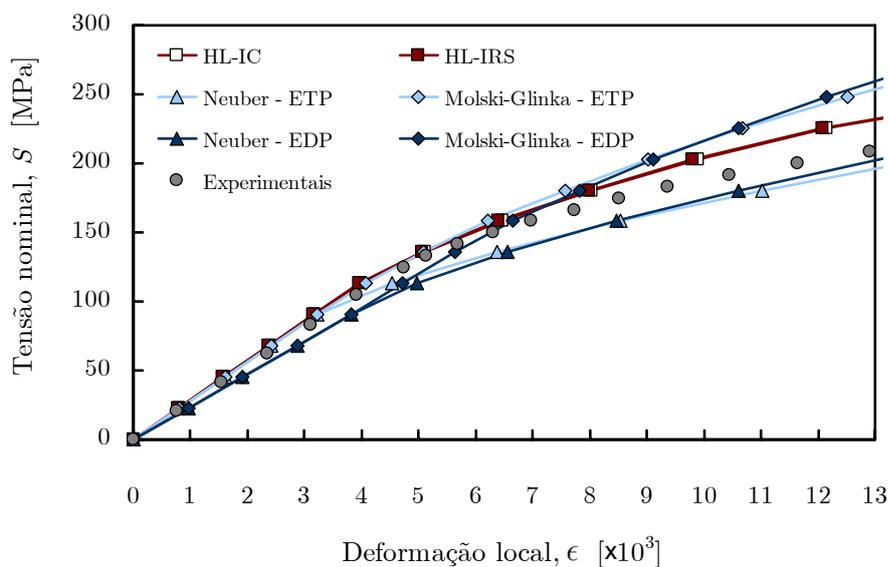


Figura 11.7: Resultados de previsão numérica e de previsão analítica, e resultados experimentais da deformação local ϵ , para diferentes níveis de tensão nominal S .

reduzida selectiva com condições de deslocamento prescrito (*vd.* Secção 11.2). Por outro lado, os valores de deformação obtidos com o método de Neuber são, quer para o estado de deformação plana quer para o estado de tensão plana, superiores ao de Molski-Glinka, o que está de acordo com o esperado. Além disso, os resultados experimentais encontram-se entre os resultados analíticos associados a um estado de tensão plana no provete, *i.e.* a um estado uniaxial de tensão da raiz do entalhe (*cf.* figura 11.6). Verifica-se ainda que para baixos valores de tensão nominal, os métodos de previsão analítica associados a um estado de deformação plana dão origem a valores máximos de deformação local. O facto de o provete ter uma espessura que corresponde a 20% da largura leva a que o estado real de tensão se deva aproximar do estado de tensão plana. Embora se tenha utilizado uma lei de comportamento bilinear na modelação numérica por elementos finitos, verifica-se que estes são os resultados que melhor se aproximam dos experimentais, ainda que se verifique uma subestimação dos valores de deformação local. No entanto, a consideração de uma lei de comportamento não-linear deverá corrigir esse efeito.

11.4 Análise de Desempenho

Na presente secção analisa-se o desempenho do algoritmo iterativo de resolução do sistema de equações recorrendo aos problemas elástico e elastoplástico referidos na Secção 11.1. Tal como foi referido na Secção 7.4, a velocidade de convergência do método do gradiente conjugado depende do condicionamento do sistema de equações lineares [Barrett *et al.* 1994]. Neste contexto, com base na determinação do factor de concentração de tensões do provete de alumínio com entalhe circular, procede-se à comparação dos tempos de resolução do problema numérico recorrendo ao método de gradiente conjugado com e sem preconditionamento. São realizados ensaios (i) sem preconditionamento (SP), (ii) com o preconditionador de Jacobi (JAC), (iii) com preconditionamento de sobrerrelaxação sucessiva simétrica (SSOR) e (iv) com a factorização incompleta de Cholesky de nível 0 (IC(0)). Os tempos totais de processamento encontram-se indicados na tabela 11.3, onde são também indicados os tempos relativos ao cálculo mais lento e o número de iterações despendidas em cada uma das análises.

Tabela 11.3: Indicadores de desempenho do algoritmo de resolução do sistema de equações lineares com e sem preconditionamento.

Indicadores de desempenho	SP	JAC	SSOR	IC(0)
Tempo total de resolução [s]	3 849,4	721,5	197,9	364,1
Tempo relativo [%]	100	18,7	5,1	9,5
Número de iterações	4 422	1 309	277	233

Constata-se que o preconditionador SSOR é o que apresenta menores tempos de resolução. Por outro lado, o preconditionador IC(0) permite a resolução do problema num menor número de iterações. Esta característica deve-se ao facto de o procedimento de factorização IC(0) ser mais moroso que o associado ao método SSOR. No entanto, a utilização da factorização IC(0) resulta num sistema de equações lineares mais bem-condicionado, pelo que o número de iterações necessárias é menor. A evolução dos resíduos relativos², R_r , associados aos diferentes ensaios é apresentada na figura 11.8. Verifica-se que a não-utilização de preconditionamento dá origem a fenómenos de instabilidade numérica de natureza oscilatória. Pelo contrário, a utilização de preconditionamento resulta num decréscimo mais suave de R_r com o número de iterações. O preconditionador JAC permite uma taxa de redução significativa do resíduo relativo, embora também se verifique a manifestação de fenómenos de natureza oscilatória no comportamento de R_r (*cf.* figura 11.9).

²O resíduo relativo é definido como a razão entre a norma do vector de resíduos do método do gradiente conjugado, $\|\mathbf{r}^{(k)}\|$, e a norma do vector de resíduos inicial, $\|\mathbf{r}^{(0)}\|$.

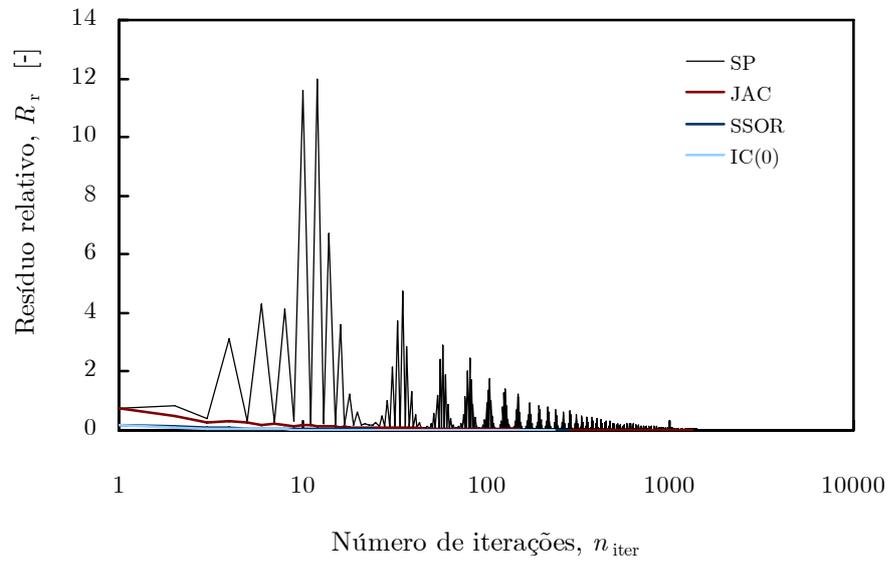


Figura 11.8: Evolução dos resíduos relativos, R_r , no processo iterativo de resolução do sistema de equações lineares, sem preconditionamento e com os preconditionadores implementados.

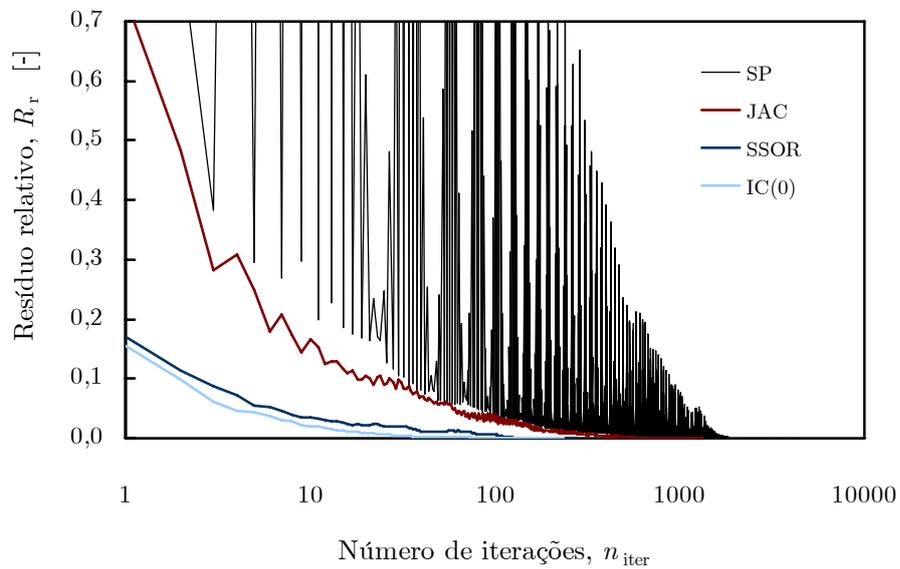


Figura 11.9: Pormenor da evolução dos resíduos relativos, R_r , no processo iterativo de resolução do sistema de equações lineares, sem preconditionamento e com os preconditionadores implementados.

Para proceder a uma análise de desempenho computacional em paralelo da modelação numérica do comportamento mecânico do provete entalhado, utilizou-se o *cluster* Tetis³, constituído por 13 PC⁴, com processadores Pentium IV de 2,8 e 3,0 GHz e 2 GB de memória RAM⁵, interligados por uma rede de 1 Gb/s. Nos ensaios realizados, foram utilizados dois processadores de 2,8 GHz e seis de 3,0 GHz. Um dos PC é utilizado como servidor do *cluster*, sendo a gestão das comunicações entre computadores suportada por um *switch* de 1 Gb/s (vd. figura 11.10). Este sistema baseia-se no sistema operativo SuSE⁶ Linux 9.0, no MPICH 1.2.5-2, na distribuição Torque do Open PBS⁷ e no sistema de gestão de filas de espera de processos MAUI. Considerando o problema no domínio

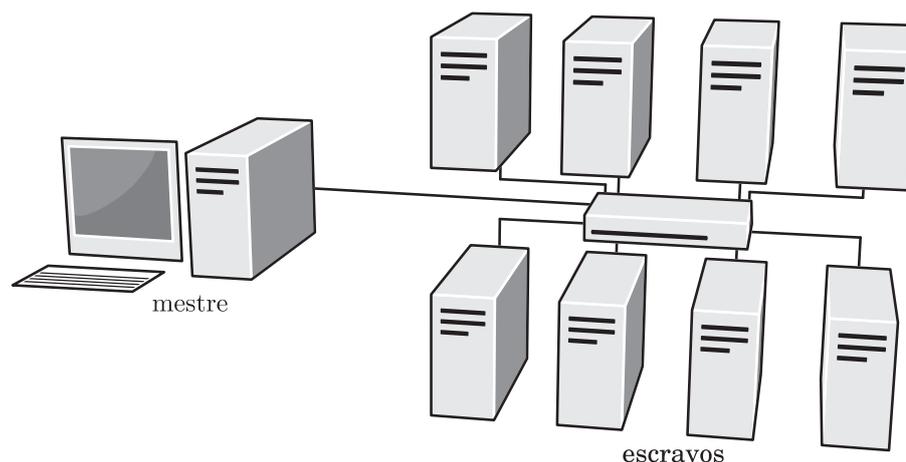


Figura 11.10: Representação de um *cluster* do tipo Beowulf, constituído por 1 nó mestre e 8 nós escravos.

elastoplástico, procede-se à avaliação do desempenho paralelo com base nos conceitos de *speed-up*, s_p , e da eficiência paralela, e_p . Na figura 11.11 apresenta-se a variação de s_p com o número de processadores n_p . A curva de comportamento linear, associada a um desempenho ideal do código paralelizado, é também apresentada. Nesta situação particular, o tempo de cálculo despendido em cada um de k processadores seria k vezes menor que o despendido no processamento em série, correspondendo a uma eficiência $e_p = 100\%$.

De acordo com os resultados apresentados, verifica-se que os valores de s_p apresentam, para os três tipos de preconditionador, um comportamento sublinear. Além disso, os desvios de s_p em relação à curva linear tendem a aumentar com o número de processadores. Em geral, este comportamento pode ser atribuído à conjugação dos seguintes factores: (i) a existência de operações executadas em série (e.g. leitura de dados), (ii) o aumento dos tempos de comunicação decorrentes das iterações efectuadas na resolução do sistema de equações lineares e (iii) o desequilíbrio no balanceamento da carga computacional pelos processadores. Neste contexto, observa-se que o tempo de execução em série, nomeadamente aquele despendido em leitura e iniciação (LI), tem um peso crescente com o número de processadores em relação aos tempos quer de construção e montagem da rigidez (CAR) do sistema quer de resolução do sistema (RS), para qualquer dos preconditionadores considerados. Este facto encontra-se ilustrado nas figuras 11.12, 11.13 e 11.14, para os preconditionadores JAC, SSOR e IC(0), respectivamente.

³Este *cluster* do tipo Beowulf é utilizado para cálculo científico de Estrutura Electrónica em Semicondutores e Metais e Estudos de Matéria Condensada com métodos de Monte Carlo pelo grupo de Física Teórica da Matéria Condensada do Departamento de Física da Universidade de Aveiro.

⁴PC: sigla de *Personal Computer*.

⁵RAM: sigla de *Random Access Memory*.

⁶SuSE: acrónimo de *Software und SystemEntwicklung*.

⁷PBS: sigla de *Portable Batch System*.

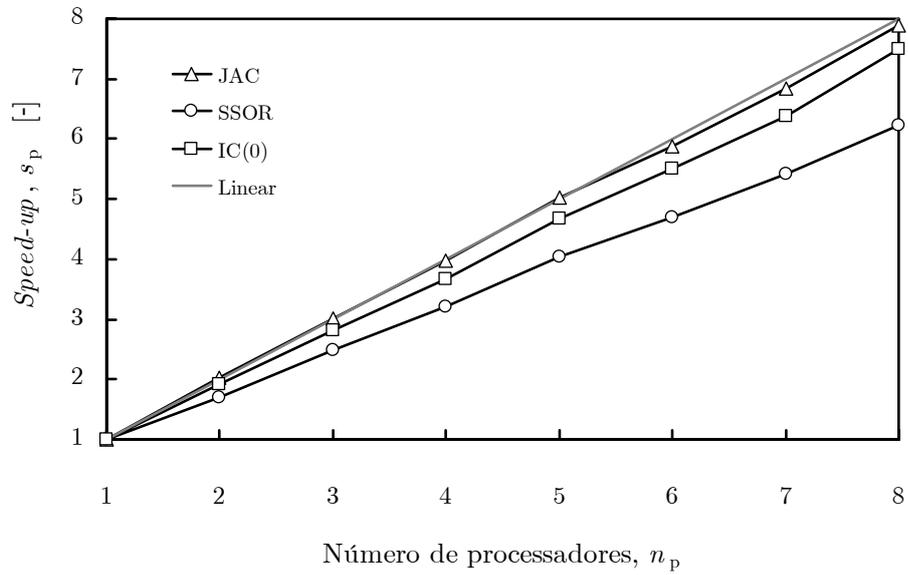


Figura 11.11: Evolução do *speed-up* com o número de processadores, para os vários preconditionadores.

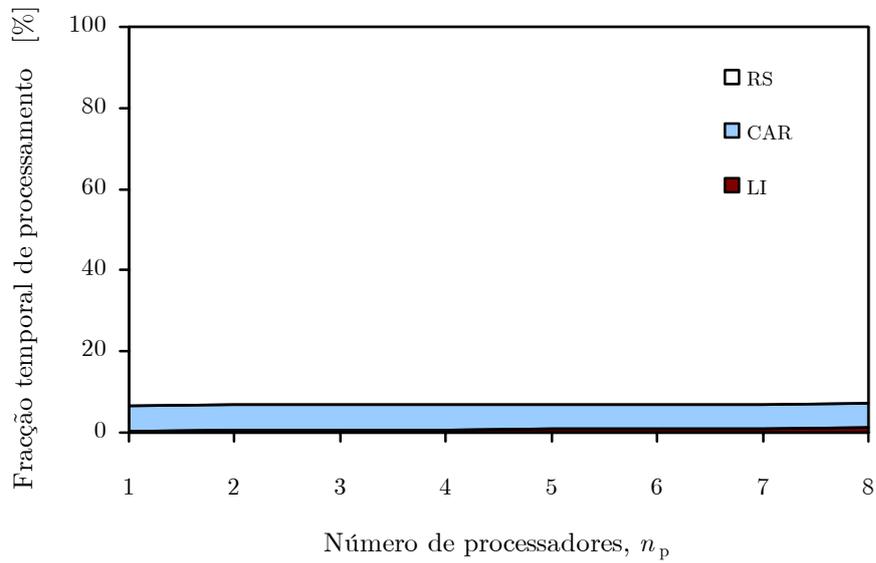


Figura 11.12: Evolução, com o número de processadores, da fração temporal de processamento das tarefas de leitura e iniciação (LI), construção e montagem da rigidez do sistema (CAR) e resolução do sistema (RS), para o preconditionador JAC.

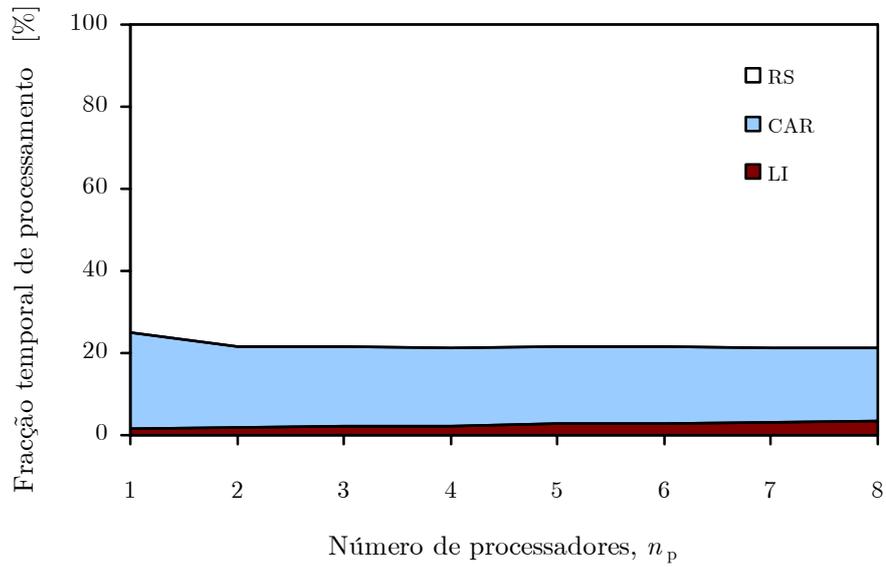


Figura 11.13: Evolução, com o número de processadores, da fração temporal de processamento das tarefas de leitura e iniciação (LI), construção e montagem da rigidez do sistema (CAR) e resolução do sistema (RS), para o pré-condicionador SSOR.

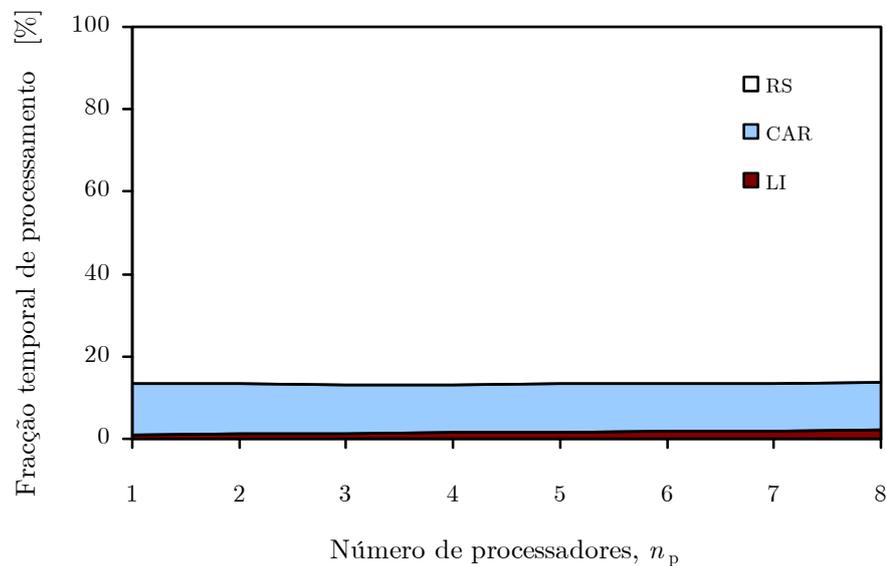


Figura 11.14: Evolução, com o número de processadores, da fração temporal de processamento das tarefas de leitura e iniciação (LI), construção e montagem da rigidez do sistema (CAR) e resolução do sistema (RS), para o pré-condicionador IC(0).

Constata-se que o peso relativo do tempo de execução em série atinge um máximo de 3,4% para o preconditionador SSOR, que é aquele que apresenta menores valores de s_p (*cf.* figura 11.11). Por outro lado, a decomposição de domínio é efectuada com o programa Metis [Karypis e Kumar 1998]. Nas figuras 11.15 a 11.17 apresentam-se as decomposições de domínio obtidas para as várias partições. Este programa procede à minimização das fronteiras dos subdomínios relativamente aos volumes correspondentes (*i.e.* leva à diminuição do tempo de comunicação em relação ao tempo de cálculo efectivo) e distribui o trabalho numérico pelos vários processadores de forma equilibrada. Deste modo, não são de esperar situações de não-balanceamento da carga computacional pelos processadores. Por outro lado, a existência do aumento de tempos de comunicação decorrentes das iterações parece não influenciar significativamente o desempenho paralelo, visto o *speed-up* associado ao preconditionador JAC não sofrer decréscimos significativos.

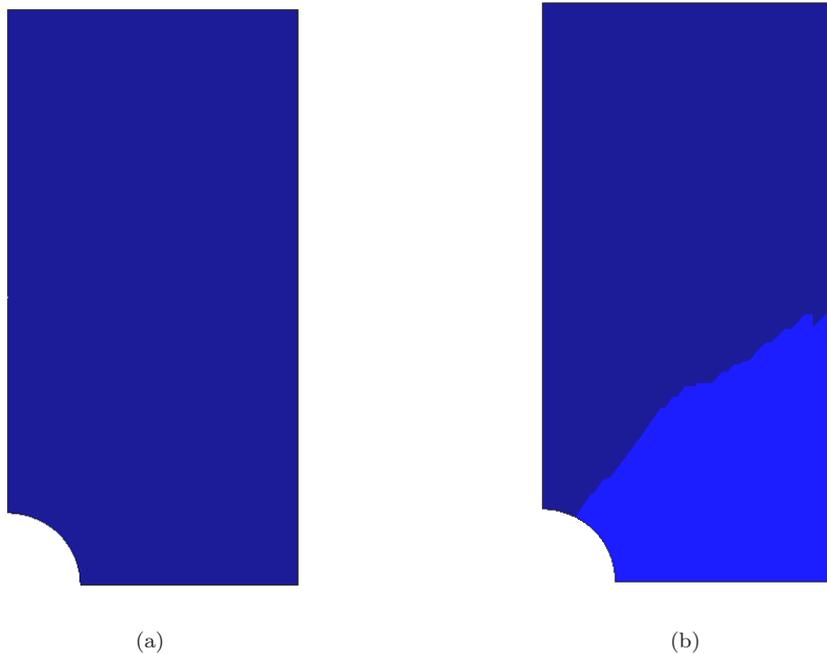
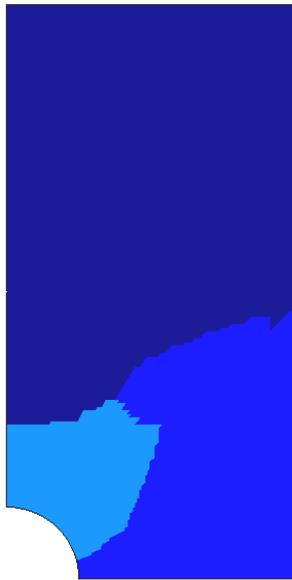


Figura 11.15: Representação das partições de domínio obtida com o programa Metis, para (a) 1 e (b) 2 processadores.

Na figura 11.18 representa-se a evolução da eficiência paralela, e_p , com o número de processadores, n_p . Verifica-se que a utilização do preconditionador JAC é a que se encontra associada a valores mais elevados de eficiência, que se mantêm acima dos 97% para a gama de processadores considerados. O preconditionador SSOR é aquele que resulta numa diminuição mais acentuada da eficiência com o número de processadores. Embora o preconditionador SSOR seja aquele a que correspondem valores mais reduzidos de eficiência, atenda-se a que este é o preconditionador que dá origem a menores tempos de processamento, conforme se pode constatar na figura 11.19. Deste modo, embora seja o preconditionador com mais baixos valores de eficiência, o SSOR é aquele a que corresponde um menor tempo de cálculo.

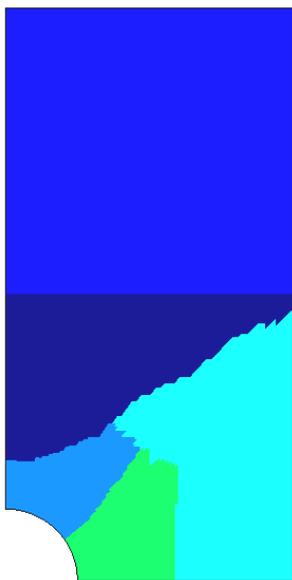
Assim, verifica-se que, embora ocorra um decréscimo progressivo da eficiência paralela do cálculo numérico, a paralelização efectuada levou a uma redução significativa do tempo total necessário para a resolução do problema considerado.



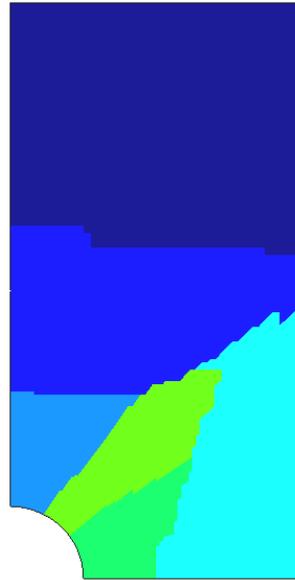
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 11.16: Representação das partições de domínio obtida com o programa Metis, para (a) 3, (b) 4, (c) 5 e (d) 6 processadores.

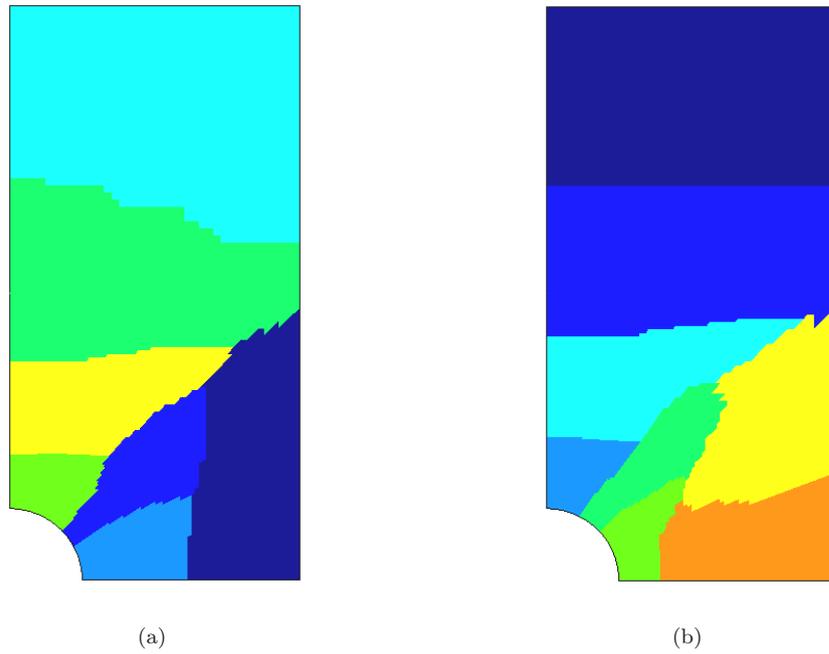


Figura 11.17: Representação das partições de domínio obtida com o programa Metis, para (a) 7 e (b) 8 processadores.

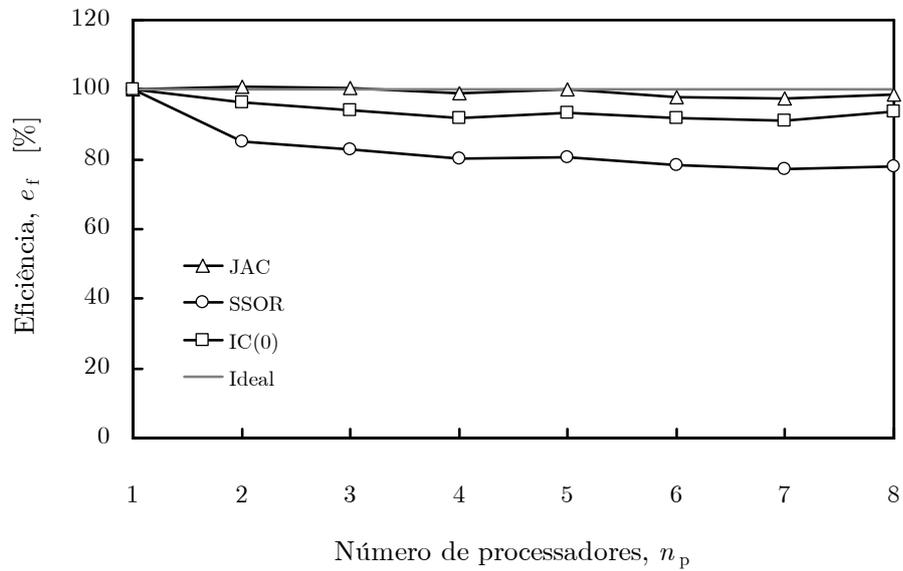


Figura 11.18: Evolução da eficiência com o número de processadores, para os vários tipos de preconditionador.

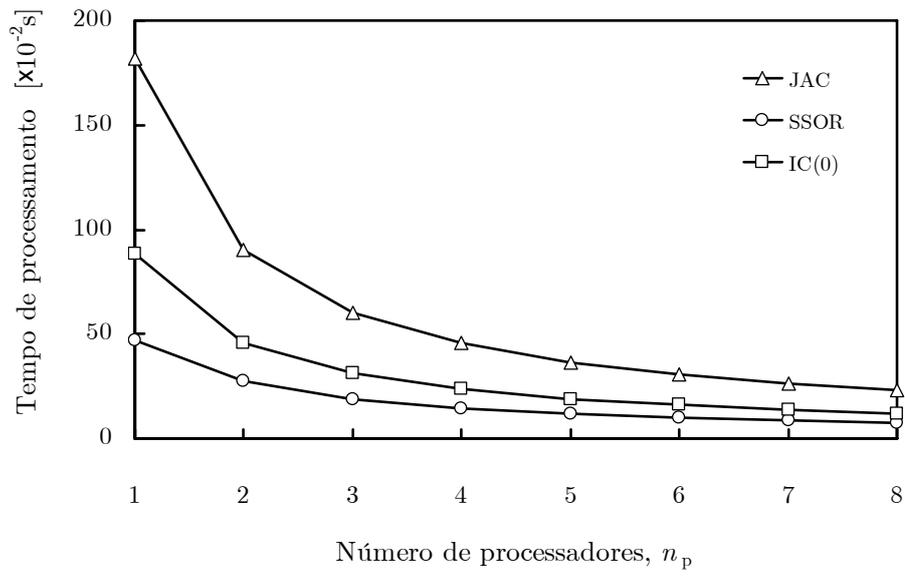


Figura 11.19: Evolução, com o número de processadores, do tempo total despendido na resolução do problema elastoplástico, para os vários tipos de condicionador.

Capítulo 12

Considerações Finais

Descrevem-se, de um modo detalhado, as principais conclusões deste trabalho. Apresentam-se, ainda, algumas perspectivas de desenvolvimento futuro do trabalho realizado.

12.1 Introdução

O trabalho desenvolvido no âmbito desta dissertação enquadra-se no objectivo global de desenvolvimento de um programa de cálculo numérico por elementos finitos que permita a modelação numérica do comportamento termomecânico de materiais compósitos utilizando a técnica de homogeneização por expansão assintótica e o cálculo paralelo e distribuído. Neste contexto, procedeu-se ao desenvolvimento de um módulo de cálculo numérico por elementos finitos que permite a simulação do comportamento termomecânico (linear) de materiais compósitos com base na técnica de homogeneização por expansão assintótica. Foram implementados modelos de comportamento que permitem a simulação numérica de processos não-lineares não só de condução transitória de calor mas também de elastoplasticidade. Procedeu-se, ainda, à paralelização numérica deste programa de cálculo numérico por elementos finitos. Este trabalho constitui a base de uma plataforma que deverá permitir a modelação numérica do comportamento termomecânico não-linear de materiais compósitos utilizando procedimentos de homogeneização.

12.2 Conclusões

No projecto de estruturas constituídas por materiais compósitos, para que se possa proceder correctamente à avaliação do seu comportamento termomecânico, é crucial conhecerem-se as suas propriedades termomecânicas efectivas. Assim, aplicou-se o método numérico de homogeneização por expansão assintótica e alguns métodos analíticos na determinação de propriedades efectivas mecânicas e térmicas de materiais compósitos. Foram considerados materiais compósitos quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas.

Numa primeira fase, em que se abordou a determinação de propriedades mecânicas de materiais compósitos, procedeu-se a um estudo da aplicabilidade, em termos do método de homogeneização por expansão assintótica, de malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos na

modelação de células representativas unitárias de materiais compósitos de fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas. Efectuou-se uma análise comparativa do comportamento dos vários tipos de elemento finito que foram implementados. Procedeu-se, ainda, à validação dos resultados numéricos obtidos recorrendo a resultados de previsão de natureza quer numérica quer analítica e a resultados experimentais.

- Considerando um material compósito de alumínio reforçado com fibras de boro, concluiu-se que num estudo de convergência baseado na norma de Frobenius da matriz homogeneizada de elasticidade, os elementos finitos hexaédricos lineares são aqueles que dão origem a resultados numéricos que apresentam uma aproximação mais gradual ao limite de convergência. De facto, verificou-se que o valor da norma de Frobenius da matriz homogeneizada de elasticidade obtido para este tipo de elementos finitos era, para aproximadamente 91 908 graus de liberdade, cerca de 0,85% inferior aos valores obtidos para os restantes tipos de elemento finito. Esta tendência foi verificada quer para o método de integração completa quer para o método de integração reduzida selectiva. Neste contexto, constatou-se que, ao contrário do que ocorre numa análise por elementos finitos convencional, a aplicação da metodologia de homogeneização por expansão assintótica requer a utilização de um número suficiente não só de graus de liberdade mas também de elementos finitos lineares;
- Verificou-se que os resultados obtidos com base no método de homogeneização por expansão assintótica aproximam de modo satisfatório os resultados obtidos experimentalmente, tendo sido obtidos valores para as propriedades E_{11} , E_{22} e G_{12} que diferem, em valor absoluto, apenas 0,6%, 3,2% e 5,2% dos respectivos valores experimentais.

Após se ter verificado a aplicabilidade de malhas não-estruturadas de elementos finitos tetraédricos na modelação de células representativas unitárias de materiais compósitos de fibras cilíndricas unidireccionais e contínuas, analisou-se a influência da fracção volúmica de reforço de um material compósito nos valores das propriedades efectivas mecânicas. Considerou-se um material compósito de resina epóxida reforçado com fibras de vidro. Procedeu-se, ainda, à previsão analítica de resultados, com base na lei das misturas, na lei das misturas inversas, nas equações de Halpin-Tsai e nas equações de Halpin-Tsai corrigidas. Os resultados de previsão numérica e de previsão analítica foram comparados com resultados experimentais.

- Verificou-se que o aumento da fracção volúmica de reforço levou a um aumento das componentes das matrizes homogeneizadas de elasticidade. Com base nestes resultados, obtiveram-se as propriedades elásticas do material compósito. Em relação ao valor do módulo de elasticidade, verificou-se que os resultados de previsão numérica coincidem com os de previsão analítica. Por outro lado, verificou-se que a distribuição dos resultados experimentais apresenta, em termos globais, uma tendência média a que correspondem, para os valores de fracção volúmica de reforço considerados a nível experimental (52,3% a 75,0%), valores de E_{11} cerca de 6% inferiores aos valores de previsão quer analítica quer numérica;
- Em termos do valor do módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras, E_{22} , verificou-se que a distribuição dos resultados experimentais apresenta, em termos globais, uma tendência média a que correspondem, para os valores de fracção volúmica de reforço considerados a nível experimental (43,1% a 73,1%), valores de E_{22} inferiores aos valores de previsão seja analítica seja numérica. Por outro lado, constatou-se que os resultados analíticos de Halpin-Tsai subestimam as previsões de E_{22} para fracções volúmicas de reforço superiores a 54,5%. No entanto, a equação de Halpin-Tsai corrigida deu origem a previsões analíticas que praticamente coincidem com as previsões numéricas. Por outro lado, verificou-se que as previsões analíticas obtidas com base na lei das misturas inversas subestimam o valor do módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras;

- Relativamente ao módulo de elasticidade transversal G_{12} , verificou-se que as previsões analíticas obtidas com base na lei das misturas inversas subestimam o seu valor. No que concerne aos restantes resultados, verificou-se que para fracções volúmicas de reforço de 20,1% a 49,1% os resultados experimentais se encontram em conformidade com os resultados de previsão numérica e de previsão analítica. No entanto, a distribuição dos resultados experimentais apresentou, para valores superiores de fracção volúmica de reforço, uma tendência média a que correspondem valores de G_{12} superiores aos valores de previsão seja analítica seja numérica. Mais uma vez se verificou não só uma subestimação das previsões de G_{12} por parte dos resultados analíticos de Halpin-Tsai mas também que a correcção da equação de Halpin-Tsai leva a que, em termos numéricos, estas previsões analíticas se aproximem das previsões numéricas;
- No que concerne ao coeficiente ν_{12} de Poisson, para as mais baixas fracções volúmicas de reforço, *i.e.* para valores de f_r inferiores a 47,1%, observou-se uma subestimação do coeficiente ν_{12} de Poisson por parte dos resultados de previsão analítica, verificando-se o oposto para fracções volúmicas de reforço superiores. No entanto, observou-se a existência de uma maior dispersão nos resultados experimentais para as mais baixas fracções volúmicas de reforço. Por outro lado, os resultados experimentais encontravam-se, para os valores de fracção volúmica de reforço não-inferiores a 47,1%, em conformidade com os resultados de previsão numérica.

Analisou-se a influência da fracção volúmica de partículas esféricas de reforço nas componentes da matriz homogeneizada de elasticidade de um material compósito de alumínio (liga AlCu4,5Mn) reforçado com carboneto de silício. Foram geradas 5 células representativas unitárias para fracções volúmicas de 10% a 50% de reforço. Após um estudo de convergência realizado com malhas de elementos finitos tetraédricos, procedeu-se a uma análise detalhada das matrizes homogeneizadas de elasticidade associadas às várias células representativas unitárias.

- Verificou-se que as componentes significativas das matrizes \mathbf{D}^h são as associadas a um comportamento ortotrópico do material. No entanto, embora as matrizes obtidas para as várias células representativas unitárias correspondam a comportamentos ortotrópicos, as suas médias aritméticas apresentam um carácter isotrópico para fracções volúmicas de reforço de 10% e 20%, cúbico para $f_r = 30\%$ e ortotrópico para $f_r = 40\%$ e $f_r = 50\%$. Em termos genéricos, constatou-se que a utilização da técnica de homogeneização assintótica associada a malhas de elementos finitos tetraédricos permite não só contornar os problemas relativos à modelação detalhada do comportamento mecânico macroestrutural de materiais compósitos de matriz metálica reforçados com partículas esféricas mas também definir, de modo numérico, a totalidade das propriedades que definem o comportamento elástico de um material compósito. Verificou-se, ainda que, para elevadas fracções volúmicas de reforço, a geometria da célula representativa unitária influencia, de modo determinante, as componentes da matriz constitutiva \mathbf{D}^h , afectando conseqüentemente o valor das referidas propriedades.

Procedeu-se à comparação dos resultados de previsão numérica obtidos para o módulo de elasticidade longitudinal do material compósito com resultados experimentais, resultados de previsão analítica de Halpin-Tsai, e os limites superiores e inferiores associados aos modelos micromecânicos de Voigt-Reuss, de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran.

- Verificou-se um afastamento considerável entre os limites de Voigt e de Reuss, o que advém do facto de os materiais da matriz e do reforço apresentarem módulos de elasticidade significativamente distintos. Contudo, os limites que definem um intervalo mais estreito para o módulo de elasticidade transversal são os de Ravichandran. Verificou-se que, à excepção do que ocorre para o valor mais elevado de fracção volúmica de reforço ($f_r = 50\%$), os resultados numéricos se encontram entre os limites de Ravichandran. Por outro lado, constatou-se

que os resultados de previsão analítica relativos às equações de Halpin-Tsai coincidem com o limite inferior de Hashin-Shtrikman. Os resultados numéricos revelam-se não-inferiores aos analíticos de Halpin-Tsai, tendo sido observada uma discrepância máxima entre estes resultados para uma fracção volúmica de reforço de 40%, à qual correspondem previsões numéricas cerca de 9% superiores às previsões analíticas. Verificou-se, ainda, que os resultados experimentais se encontram limitados superiormente pelo limite de Voigt, havendo um único destes resultados que se revela inferior ao limite de Reuss ($f_r = 9,8\%$). No entanto, os resultados experimentais apresentam uma tendência média que se revela em conformidade com os limites de Ravichandran. Contudo, constatou-se que grande parte dos resultados experimentais se encontra no exterior destes limites, aproximando-se mais do limite inferior de Hashin-Shtrikman que do respectivo limite superior, o que se encontra em conformidade com estudos previamente efectuados.

Os valores numéricos do coeficiente de Poisson foram comparados com resultados analíticos obtidos a partir das equações de Halpin-Tsai, com os limites superiores e inferiores de Hashin-Shtrikman e de Ravichandran, e com resultados experimentais.

- Verificou-se que os resultados experimentais apresentam variações significativas, sendo mino-
rados pelo limite inferior de Hashin-Shtrikman. No entanto, exceptuando a fracção volúmica
de reforço mais elevada (30%), há resultados experimentais que excedem o limite superior de
Hashin-Shtrikman. Por outro lado, embora os limites de Ravichandran definam um intervalo
bastante estreito para o módulo de Young, constatou-se que quaisquer dos valores experi-
mentais ou de previsão numérica saem fora desse intervalo. Verificou-se que os resultados
de previsão numérica seguem aproximadamente a tendência média dos resultados experi-
mentais. Além disso, observou-se que os resultados de previsão numérica apresentam menor
dispersão que os resultados experimentais, sendo ainda inferiores aos limites de Ravichan-
dran. Por outro lado, à excepção do valor numérico de ν_{23} para a fracção volúmica de reforço
de 50%, verificou-se que os resultados de previsão numérica se aproximam inferiormente dos
resultados analíticos de Halpin-Tsai.

Por fim, com o intuito de analisar o efeito da dimensão das partículas esféricas de reforço nos valo-
res do módulo de elasticidade longitudinal e do coeficiente de Poisson, procedeu-se à determinação
numérica das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas a células representativas unitárias correspon-
dentes a uma fracção volúmica de reforço de 30%, constituídas por 1 a 8 partículas de reforço. Os
resultados numéricos do módulo de elasticidade longitudinal e de coeficiente de Poisson do material
compósito foram comparados com resultados analíticos.

- Verificou-se que as diferentes células representativas unitárias definem materiais ortotrópi-
cos, correspondendo a célula representativa unitária com uma única partícula esférica a um
material cúbico. Foram obtidos os valores homogeneizados do módulo de elasticidade e do
coeficiente de Poisson. Relativamente ao módulo de elasticidade, verificou-se que, à excepção
da célula constituída por mais que uma partícula esférica, o seu valor se mantém próximo do
resultado analítico de Halpin-Tsai. No entanto, os valores do módulo de elasticidade associa-
dos à célula representativa unitária constituída por uma única partícula esférica resultam
cerca de 3% a 10% superiores aos das restantes células. Assim, verificou-se que, à excepção
deste último caso, o módulo de elasticidade não apresenta uma tendência bem definida de
crescimento ou decrescimento com a diminuição da dimensão das partículas esféricas. Este
facto encontra-se em oposição com o que se verifica experimentalmente. Na realidade, vários
estudos experimentais revelam que, para uma determinada fracção volúmica de reforço, o
módulo de elasticidade aumenta com a diminuição da dimensão das partículas de reforço,
o que pode ser atribuído ao aumento da eficiência de transferência de carga entre reforço e
matriz com o aumento da área de interface destes materiais;
- No que concerne aos valores do coeficiente de Poisson, verificou-se um comportamento se-
melhante ao dos valores do módulo de elasticidade, à excepção daqueles associados à célula

representativa unitária constituída por uma única partícula esférica, que resultam cerca de 6% inferiores aos referentes à célula representativa unitária com duas partículas esféricas. No entanto, este facto não entra em conflito com o que é verificado experimentalmente, que consiste num ligeiro decréscimo com o aumento da dimensão das partículas de reforço.

Em seguida, determinaram-se as propriedades termoelásticas de um material compósito de cobre reforçado com partículas esféricas de diamante. Procedeu-se ao estudo da influência da fracção volúmica de reforço nos valores efectivos dos coeficientes de expansibilidade térmica, para fracções volúmicas de reforço, f_r , entre 10% e 50%, inclusive. Os resultados numéricos foram comparados quer com resultados de previsão analítica quer com resultados experimentais.

- Constatou-se que os valores das componentes dos vectores homogeneizados dos módulos térmicos β^h são praticamente idênticos para cada uma destas fracções volúmicas de reforço. No entanto, verificou-se que estes valores decrescem com o aumento da fracção volúmica de reforço;
- Os resultados numéricos do coeficiente de expansibilidade térmica foram comparados com resultados experimentais, e com os resultados analíticos dos modelos de Kerner, de Schapery, e de Fahmy e Ragai. Verificou-se que os resultados numéricos são idênticos, o que revela que, em termos de expansibilidade térmica, o material compósito se comporta isotropicamente para as várias fracções volúmicas de reforço consideradas. Constatou-se, ainda, que os resultados de previsão analítica relativos ao limite superior de Schapery e ao modelo de Fahmy e Ragai coincidem com os do modelo de Kerner. Por outro lado, verificou-se que todos os resultados numéricos se encontram entre os limites de Schapery e aproximam, em termos de tendência, os resultados experimentais, exceptuando a situação correspondente a uma fracção volúmica de 50%. Deste modo, constatou-se que a técnica de homogeneização por expansão assintótica se revela adequada para se determinarem numericamente os valores efectivos dos coeficientes de expansibilidade térmica de um material compósito de partículas esféricas.

Foi analisado o efeito da dimensão das partículas esféricas de reforço nas componentes do vector dos módulos térmicos, para uma fracção volúmica de reforço constante. Os resultados numéricos do coeficiente de expansibilidade térmica foram comparados com resultados analíticos. Assim, procedeu-se à determinação numérica dos vectores homogeneizados dos módulos térmicos β^h associados a células representativas unitárias correspondentes a uma fracção volúmica de reforço de 30%, utilizando células representativas unitárias com 1 a 8 partículas de reforço.

- Verificou-se que às diferentes células representativas unitárias correspondem idênticos vectores dos módulos térmicos β^h . Constatou-se que, em termos dos vectores dos coeficientes de expansibilidade térmica, o material compósito não apresenta, em geral, um comportamento isotrópico, sendo os valores dos coeficientes de expansibilidade térmica não-normal numericamente insignificantes;
- Verificou-se que a tendência média dos valores do coeficiente de expansibilidade térmica é aproximadamente constante. No entanto, os valores associados às células representativas unitárias constituídas por três e por quatro partículas esféricas apresentaram, em relação aos valores associados às restantes células representativas unitárias, uma dispersão de resultados significativa. Este facto deve-se ao carácter ortotrópico das matrizes constitutivas \mathbf{D}^h associadas às referidas células. No entanto, a tendência média dos resultados encontra-se em conformidade com a constatação experimental de que o coeficiente de expansibilidade térmica de um material compósito de cobre reforçado com partículas de diamante não depende das dimensões das partículas de reforço.

Numa fase posterior, obtiveram-se as propriedades térmicas de um material compósito de vidro termorresistente de borossilicato reforçado com partículas esféricas de alumina. Estudou-se a

influência da fracção volúmica de reforço nos valores efectivos dos coeficientes de condutividade térmica de um material compósito de partículas esféricas.

- Verificou-se que as matrizes homogeneizadas de condutividade térmica \mathbf{k}^h definem materiais que, em termos de condutividade térmica, podem ser considerados ortotrópicos, aumentando os valores dos coeficientes de condutividade térmica normal com a fracção volúmica de reforço.

Os resultados obtidos numericamente foram comparados quer com resultados de previsão analítica quer com resultados experimentais. Os resultados de previsão analítica do coeficiente de condutividade térmica foram obtidos com base nos modelos de Maxwell, de Rayleigh e de Landauer. Consideraram-se, ainda, os limites superior e inferior de Hashin-Shtrikman.

- Verificou-se que os resultados numéricos se encontram entre os resultados do modelo de Landauer e os resultados do modelo de Maxwell e do limite inferior de Hashin-Shtrikman, sendo os que, em termos de tendência, melhor aproximam os resultados experimentais. Por outro lado, constatou-se que, para as fracções volúmicas de reforço mais elevadas, quer os resultados numéricos quer os resultados experimentais se afastam das curvas do modelo de Maxwell e do limite inferior de Hashin-Shtrikman. Este facto deve-se à existência de fenómenos de interacção entre as fases que constituem o material compósito. No entanto, o afastamento destes valores não é suficientemente relevante para que estes sigam o modelo de Landauer. Assim, o número de contactos entre partículas de reforço, que apresenta uma condutividade térmica superior à da matriz, não deverá ser significativo, mesmo para as fracções volúmicas mais elevadas. Deste modo, constatou-se que a técnica de homogeneização por expansão assintótica se revela adequada para se determinarem numericamente os valores efectivos dos coeficientes de condutividade térmica de um material compósito de partículas esféricas.

Procedeu-se, ainda, à determinação numérica das matrizes homogeneizadas de condutividade térmica, \mathbf{k}^h , associadas a células unitárias correspondentes a uma fracção volúmica de reforço de 30%, utilizando-se células representativas unitárias com 1 a 8 partículas de reforço.

- Verificou-se que as várias células representativas unitárias originam matrizes homogeneizadas de condutividade térmica \mathbf{k}^h distintas, o que indicia o facto de que, para além do valor da fracção volúmica de reforço, o coeficiente de condutividade térmica depende da morfologia da distribuição espacial das partículas de reforço na célula representativa unitária. Constatou-se que a tendência média dos valores dos coeficientes de condutividade térmica resulta aproximadamente constante. No entanto, verificou-se a existência de uma dispersão dos valores do coeficiente de condutividade, nomeadamente para as células constituídas por três e por quatro partículas esféricas de reforço, a que correspondem variações relativas de 12,7% e 9,5% do valor do coeficiente de condutividade térmica, respectivamente. Esta dispersão foi também verificada aquando da análise relativa quer ao módulo de elasticidade de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício quer ao coeficiente de expansibilidade térmica de um material compósito de matriz de cobre reforçado com partículas esféricas de diamante. Deste modo, verificou-se que as células representativas unitárias constituídas por três e quatro partículas esféricas de reforço definem materiais compósitos que podem ser associados a comportamentos termomecanicamente ortotrópicos.

Com o intuito de ilustrar a aplicação do método de homogeneização assintótica a problemas de termoelasticidade linear, modelou-se numericamente o comportamento termoelástico de um cilindro oco de comprimento infinito, considerando a prescrição de temperaturas nas suas superfícies interna e externa. Considerando um material compósito de alumínio (liga Al6061) reforçado com partículas de carboneto de silício, analisou-se o efeito da fracção volúmica de reforço, quer de fibras contínuas quer de partículas esféricas, nos valores máximos dos campos de deslocamento radial, de fluxo superficial de calor por condução na direcção radial e de tensão equivalente de von Mises. Com base no procedimento de localização, procedeu-se à determinação dos campos microestruturais de fluxo superficial de calor por condução e de tensão equivalente.

- Constatou-se que os valores máximos de fluxo superficial de calor por condução são semelhantes para os dois tipos de material compósito. Por outro lado, os valores máximos de deslocamento radial diminuem, em ambos os casos, com a fracção volúmica de reforço, verificando-se que o valor associado ao compósito de fibras é superior ao do compósito de partículas esféricas. Esta característica pode ser explicada pelo facto de a geometria cúbica associada à disposição das fibras induzir um maior deslocamento na microestrutura. Em relação ao valor da tensão equivalente, verificou-se que, para o compósito de fibras, este sofre um ligeiro aumento com a fracção volúmica de reforço. No entanto, para o compósito de partículas esféricas, verifica-se a existência de oscilações numéricas;
- Esta aplicação da técnica de homogeneização por expansão assintótica ao estudo do comportamento termoelástico de componentes estruturais permitiu ilustrar a possibilidade de proceder à análise do efeito da microestrutura no comportamento macroestrutural. Procedeu-se ainda à discussão de algumas particularidades da aplicação da técnica de localização.

Em seguida, efectuou-se uma análise do comportamento mecânico de um provete com entalhe circular, quer em regime elástico quer em regime elastoplástico. Analisou-se, ainda, o desempenho computacional de simulações numéricas efectuadas quer em série quer em paralelo, para os diferentes tipos de condicionamento utilizados no método do gradiente conjugado. Deste modo, com base em análises elásticas por elementos finitos, procedeu-se à determinação do factor de concentração de tensões do provete com entalhe circular, utilizando hexaedros lineares e recorrendo ao esquema quer de integração completa (HL-IC) quer de integração reduzida selectiva $\bar{\mathbf{B}}$ (HL-IRS). Os resultados numéricos obtidos foram comparados com um valor de previsão analítica.

- Verificou-se que os resultados associados a ambos os esquemas de integração têm uma variação monótona com o número de graus de liberdade. No entanto, os resultados do factor de concentração de tensões relativos ao esquema de integração completa sofrem uma diminuição, ao contrário dos resultados associados ao esquema de integração reduzida selectiva, que se comportam de modo contrário. Além disso, verificou-se que os primeiros atingem o valor analítico do factor de concentração de tensões para o máximo número de graus de liberdade. Pelo contrário, a utilização do esquema de integração reduzida selectiva dá origem a soluções que apresentam desvios superiores, em valor absoluto, a 2,8% do valor analítico. Esta característica pode ser explicada pelo facto de a aplicação de um deslocamento prescrito axial levar a que as reacções associadas ao equilíbrio mecânico sejam inferiores às obtidas com a integração completa. Deste modo, a utilização simultânea do esquema de integração reduzida selectiva e de um deslocamento prescrito leva a que os valores do factor de concentração de tensões sejam subestimados. Embora os resultados de ambos os esquemas apresentem, em termos de valor absoluto, variações relativas cerca de 0,6%, a discrepância entre o valor analítico e os resultados numéricos de integração reduzida selectiva leva a que se considerasse o valor obtido com base no esquema de integração completa, $K_t = 2,42$, como a solução admissível. Este valor difere cerca de 0,1% do resultado analítico.

Procedeu-se à determinação da deformação local ϵ no provete entalhado, utilizando o método dos elementos finitos, para diferentes carregamentos nominais de tracção. Consideraram-se os esquemas de integração completa e de integração reduzida selectiva e uma lei bilinear de comportamento elastoplástico. Obtiveram-se resultados de previsão analítica com base nos métodos de Neuber e de Molski-Glinka, considerando, no provete, quer um estado de tensão plana (ETP) quer um estado de deformação plana (EDP). O provete é constituído por alumínio (liga AlMgSi1), tendo sido obtidas propriedades mecânicas a partir de resultados experimentais de tensão-deformação publicados na bibliografia.

- Verificou-se que os resultados numéricos associados ao esquema quer de integração completa quer de integração reduzida selectiva dão origem a resultados semelhantes em termos do

valor de deformação. Por outro lado, os valores de deformação obtidos com o método de Neuber são, quer para o estado de deformação plana quer para o estado de tensão plana, superiores ao de Molski-Glinka, o que está de acordo com o esperado. Além disso, verificou-se que os resultados experimentais se encontram entre os resultados analíticos associados a um estado de tensão plana no provete. Constatou-se ainda que para baixos valores de tensão nominal, os métodos de previsão analítica associados a um estado de deformação plana dão origem a valores máximos de deformação local. O facto de o provete ter uma espessura que corresponde a 20% da largura leva a que o estado real de tensão se deva aproximar do estado de tensão plana. No entanto, embora se tenha utilizado uma lei de comportamento bilinear na modelação numérica por elementos finitos, verifica-se que estes são os resultados que melhor aproximam os resultados experimentais, ainda que se verifique uma subestimação dos valores de deformação local.

Procedeu-se a um conjunto de estudos de desempenho, centrado na utilização do método do gradiente conjugado para a resolução do sistema de equações lineares, com os diferentes preconditionadores implementados.

- Para uma análise elástica, verificou-se que a utilização de preconditionadores representa ganhos substanciais. De entre os preconditionadores utilizados, verificou-se que o preconditionador SSOR é o que apresenta menores tempos de resolução. Por outro lado, o preconditionador IC(0) permite a resolução do problema num menor número de iterações. Esta característica deve-se ao facto de o procedimento de factorização IC(0) ser mais moroso que o associado ao método SSOR. No entanto, a utilização da factorização IC(0) resulta num sistema de equações lineares mais bem-condicionado, pelo que o número de iterações necessárias é menor. Verificou-se que a não-utilização de preconditionamento dá origem a fenómenos de instabilidade numérica de natureza oscilatória. Pelo contrário, a utilização de preconditionamento resulta num decréscimo mais suave do resíduo relativo com o número de iterações. O preconditionador de Jacobi permite uma taxa de redução significativa do resíduo relativo, embora também se tenha verificado a manifestação de fenómenos de natureza oscilatória no comportamento do resíduo relativo.

Por fim, avaliou-se o desempenho computacional da modelação numérica do comportamento elastoplástico do provete entalhado utilizando um *cluster* Beowulf constituído por 8 processadores. Analisaram-se, para os preconditionadores utilizados no método do gradiente conjugado, não só as evoluções do *speed-up* e da eficiência associadas ao processo de cálculo paralelo mas também alguns aspectos da evolução dos resíduos numéricos.

- Verificou-se que os valores de s_p apresentam, para os três tipos de preconditionador, um comportamento sublinear. Além disso, os desvios de s_p em relação à curva linear tendem a aumentar com o número de processadores. Um dos factores que levou a este comportamento foi a influência do tempo de execução em série que, apesar de corresponder sempre a menos de 3,4% do tempo total de cálculo, tem um peso relativo crescente à medida que o número de processadores vai aumentando. Em termos de eficiência, verificou-se que a utilização do preconditionador JAC é a associada a valores mais elevados de e_p , que se mantêm acima dos 97% para a gama de processadores considerados. O preconditionador SSOR é aquele que resulta numa diminuição mais acentuada da eficiência com o número de processadores. No entanto, embora o preconditionador SSOR seja aquele a que correspondem valores mais reduzidos de eficiência, atenda-se a que este é o preconditionador que dá origem a menores tempos de processamento. Neste contexto, embora ocorra um decréscimo progressivo da eficiência paralela do cálculo numérico, a paralelização efectuada levou a uma redução significativa do tempo total necessário para a resolução do problema considerado.

12.3 Perspectivas de Trabalho Futuro

Tenciona-se investir futuramente na melhoria de eficiência computacional e na implementação de novas aplicações para o programa desenvolvido. Assim, pretende-se:

- Proceder ao acoplamento dos módulos de cálculo térmico não-linear e de elastoplasticidade, com o intuito de se dispor de um programa totalmente paralelizado que permita a modelação do comportamento termoelastoplástico de materiais. Com base neste programa, pretende-se, ainda, proceder à implementação de metodologias de homogeneização por expansão assintótica para situações de termoelastoplasticidade;
- Alargar o número de métodos de resolução de sistemas de equações lineares paralelizados, implementando outros métodos iterativos não-estacionários, tais como, por exemplo, o método do resíduo mínimo generalizado, o método do gradiente biconjugado estabilizado, bem como alargar o número de preconditionadores disponíveis. Tenciona-se, ainda, implementar o método de decomposição de domínio de Schwarz, *i.e.* com sobreposição de domínios;
- Desenvolver e implementar metodologias de optimização de forma e de topologia com homogeneização, assentes no cálculo paralelo e distribuído. Neste caso, a optimização tanto poderá ser feita ao nível da macroescala, em função da solicitação imposta e das propriedades dos materiais que constituem a microescala, quanto ao nível da própria microescala, onde a distribuição dos materiais constituintes na célula representativa unitária pode ser optimizada para responder à solicitação da macroescala;
- Implementar outras capacidades da interface normalizada para passagem de mensagens MPI, tais como, por exemplo, a gestão dinâmica de processos, o acesso remoto a zonas de memória partilhada, paralelismo em operações de entrada/saída e extensões a operações colectivas.

Apêndice A

Notação, Nomenclatura, Siglas e Acrónimos

Descrevem-se a notação, a nomenclatura, as siglas e os acrónimos que se utilizam no presente trabalho. As definições da simbologia encontram-se agrupadas de acordo com os vários capítulos do presente trabalho, sendo ainda apresentado separadamente um conjunto de siglas e acrónimos.

A.1 Problema Térmico — Condução de Calor em Regime Transitório

c	–	Calor específico
\mathbf{C}	–	Matriz de capacidade térmica
\mathbf{f}	–	Vector dos fluxos prescritos e dos termos de convecção e de radiação associados às temperaturas exteriores do meio envolvente
\mathbf{f}_{PN}	–	Vector de fluxos nodais
\mathbf{F}	–	Vector de fluxos equivalentes
\mathbf{F}_t	–	Vector de fluxos equivalentes no instante t
$\mathbf{F}_{t+\Delta t}$	–	Vector de fluxos equivalentes no instante $t + \Delta t$
$\text{grad}(T)$	–	Gradiente do campo de temperaturas
h_c	–	Coefficiente de convecção
i	–	Índice superior do processo iterativo
\mathbf{k}	–	Tensor de condutividade térmica
\mathbf{K}	–	Matriz de rigidez térmica
\mathbf{K}_c	–	Matriz de convecção
\mathbf{K}_G	–	Matriz global de rigidez térmica
\mathbf{K}_k	–	Matriz de condutividade térmica
\mathbf{K}_r	–	Matriz de radiação

$\tilde{\mathbf{M}}$	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma, <i>i.e.</i> de interpolação do campo do gradiente de temperaturas
n_q	– Número de fluxos prescritos $\tilde{\mathbf{P}}_N$
\mathbf{n}	– Versor normal exterior à superfície Γ
N	– Número de iterações
$N_{\text{máx}}$	– Número máximo de iterações admissível
$N_{\text{nós}}$	– Número de nós, correspondente ao número de componentes do vector $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$
N_t	– Função de forma temporal no instante t
$N_{t+\Delta t}$	– Função de forma temporal no instante $t + \Delta t$
\dot{N}_t	– Taxa de variação temporal da função de forma temporal N_t
$\dot{N}_{t+\Delta t}$	– Taxa de variação temporal da função de forma temporal $N_{t+\Delta t}$
$\tilde{\mathbf{N}}$	– Matriz global de funções de forma no domínio Ω
$\tilde{\mathbf{N}}_\Gamma$	– Matriz global de funções de forma na superfície Γ
$\tilde{\mathbf{P}}_N$	– Vector de fluxos nodais prescritos
\bar{q}	– Fluxo superficial de calor prescrito
\mathbf{q}_k	– Vector de fluxos superficiais (<i>i.e.</i> por unidade de área) de calor por condução
Q	– Taxa temporal de geração de calor por unidade de volume
\mathbf{Q}	– Vector dos termos de geração de calor
\mathbf{R}	– Resíduo
\mathbf{R}_t	– Resíduo no instante t
$\mathbf{R}_{t+\Delta t}$	– Resíduo no instante $t + \Delta t$
t	– Tempo
t_f	– Instante temporal final
t'	– Pseudotempo de um processo incremental em que se discretiza o nível de carga térmica
T	– Campo de temperaturas
T_0	– Campo inicial de temperaturas
T_∞	– Temperatura do meio ambiente
T'	– Temperatura absoluta da superfície Γ_{R2}
T'_r	– Temperatura absoluta da superfície da fonte de radiação
\dot{T}	– Taxa de variação temporal do campo de temperaturas
\bar{T}	– Temperatura prescrita na superfície Γ_D
\mathbf{T}	– Vector das temperaturas nodais, em que as componentes relativas aos nós associados a Γ_D correspondem a valores de temperatura prescrita
\mathbf{T}_t	– Vector de temperaturas nodais no instante t
$\mathbf{T}_{t+\Delta t}$	– Vector de temperaturas nodais no instante $t + \Delta t$
$\dot{\mathbf{T}}$	– Vector das taxas nodais de variação temporal de temperatura
x_i	– Coordenadas cartesianas, com $i = 1, \dots, 3$
W	– Função de peso para a aplicação do método dos resíduos pesados
γ_r	– Coeficiente dependente quer da constante de Stefan-Boltzman quer das emissividades e dos factores de forma das superfícies intervenientes na troca de calor por radiação
Γ	– Fronteira do domínio Ω
Γ_D	– Superfície de definição de condições de fronteira de Dirichlet
Γ_N	– Superfície de definição de condições de fronteira de Neumann
Γ_R	– Superfície de definição de condições de fronteira de Robin
Γ_{R1}	– Superfície de definição de condições de fronteira de Robin de convecção

Γ_{R2}	– Superfície de definição de condições de fronteira de Robin de radiação
δT	– Campo arbitrário de temperaturas virtuais contínuo e suficientemente regular em Ω para $t \in]0, t_f]$, com $\delta T = 0$ em $\Gamma_D \times]0, t_f]$
$\delta \mathbf{T}$	– Vector das temperaturas virtuais nodais, cujas componentes relativas aos nós associados a Γ_D são nulas
Δt	– Incremento discreto de tempo
ε_{tol}	– Parâmetro de tolerância predefinido
κ_r	– Coeficiente de radiação
Λ	– Parâmetro de ponderação de avanço da integração temporal, com $\Lambda \in [0, 1]$
ρ	– Massa específica
τ	– Parâmetro temporal, tal que $0 \leq \tau \leq \Delta t$
Ω	– Conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ
$\bar{\Omega}$	– Fecho de Ω , sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$
$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}}$	– Matriz tangente à curva do resíduo — matriz jacobiana de \mathbf{R}
$\ \cdot\ $	– Norma euclidiana de um vector

A.2 Problema Termomecânico — Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada

\mathbf{a}	– Vector das acelerações
\mathbf{B}	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma
c	– Calor específico
\mathbf{D}	– Tensor de elasticidade
\mathbf{f}	– Vector das forças volúmicas
\mathbf{F}	– Vector de forças externas
\mathbf{F}_N	– Vector de forças distribuídas na superfície Γ_N
\mathbf{F}_T	– Vector de forças de dilatação térmica
\mathbf{F}_f	– Vector de forças distribuídas no volume Ω
$\text{grad}(T)$	– Gradiente do campo de temperaturas
\mathbf{k}	– Tensor de condutividade térmica
\mathbf{K}_u	– Matriz de rigidez
n_r	– Número de forças prescritas $\bar{\mathbf{R}}_N$
\mathbf{n}	– Versor normal exterior à superfície Γ
\mathbf{N}	– Matriz global de funções de forma (<i>i.e.</i> de interpolação) no domínio Ω
\mathbf{N}_Γ	– Matriz global de funções de forma (<i>i.e.</i> de interpolação) na superfície Γ
Q	– Taxa temporal de geração de calor por unidade de volume
\mathbf{R}_N	– Vector de forças nodais
$\bar{\mathbf{R}}_N$	– Vector de forças nodais prescritas
t	– Tempo
t_f	– Instante temporal final
$\bar{\mathbf{t}}$	– Força superficial prescrita na superfície Γ_N
T	– Campo de temperaturas
$T\beta : \dot{\epsilon}$	– Termo de dissipação termoelástica
T_0	– Temperatura de referência
\dot{T}	– Taxa de variação temporal do campo de temperaturas

\mathbf{u}	– Vector de deslocamentos ou campo de deslocamentos contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ em Γ_D
$\bar{\mathbf{u}}$	– Deslocamento prescrito na superfície Γ_D
\mathbf{U}	– Vector dos deslocamentos nodais, em que as componentes relativas aos nós associados a Γ_D correspondem a valores de deslocamento prescrito
x_i	– Coordenadas cartesianas, com $i = 1, \dots, 3$
$\boldsymbol{\alpha}$	– Tensor de expansibilidade térmica
$\boldsymbol{\beta}$	– Tensor dos módulos térmicos
Γ	– Fronteira do domínio Ω
Γ_D	– Superfície de definição de condições de fronteira de Dirichlet
Γ_N	– Superfície de definição de condições de fronteira de Neumann
$\delta\mathbf{u}$	– Campo arbitrário de deslocamentos virtuais contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta\mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D
$\delta\mathbf{U}$	– Vector dos deslocamentos virtuais nodais, sendo nulas as componentes relativas aos nós associados a Γ_D
$\delta\boldsymbol{\epsilon}$	– Campo de deformações virtuais
$\boldsymbol{\epsilon}$	– Campo de deformações
$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$	– Tensor das taxas de variação temporal do campo de deformações
ρ	– Massa específica
$\rho\mathbf{a}$	– Termo de inércia mecânica
$\boldsymbol{\sigma}$	– Tensor das tensões de Cauchy
Ω	– Conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ
$\bar{\Omega}$	– Fecho de Ω , sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$

A.3 Problema Mecânico — Elastoplasticidade Clássica

\mathbf{B}	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma
\mathbf{D}	– Tensor de elasticidade
\mathbf{D}^{ep}	– Módulo elastoplástico tangente ou matriz elastoplástica tangente
$\hat{\mathbf{D}}^{\text{ep}}$	– Módulo elastoplástico coerente ou matriz elastoplástica coerente
\mathbf{e}_n	– Enésimo versor do referencial cartesiano ortonormado associado à descrição de entidades tensoriais, com $n = 1, \dots, 3$
f	– Superfície de limite de elasticidade no espaço das tensões
\dot{f}	– Taxa pseudotemporal da superfície de limite de elasticidade no espaço das tensões
\mathbf{f}	– Vector das forças volúmicas
\mathbf{F}	– Vector de forças externas
\mathbf{F}_f	– Vector de forças distribuídas no volume Ω
\mathbf{F}_N	– Vector de forças distribuídas superfície Γ_N
\mathbf{F}_t	– Vector de forças externas no instante t
$\mathbf{F}_{t+\Delta t}$	– Vector de forças externas no instante $t + \Delta t$
G	– Módulo de elasticidade transversal
H	– Módulo de encruamento isotrópico
i	– Índice
\mathbf{I}	– Vector de forças internas
\mathbf{I}_t	– Vector de forças internas no instante t
$\mathbf{I}_{t+\Delta t}$	– Vector de forças internas no instante $t + \Delta t$

j	– Índice
k	– Índice
l	– Índice
\mathbf{K}_T	– Matriz tangente associada ao processo iterativo
n	– Índice
n_r	– Número de forças nodais prescritas $\bar{\mathbf{R}}_N$
\mathbf{n}	– Versor normal exterior à superfície Γ
$\hat{\mathbf{n}}$	– Tensor unitário normal e exterior à superfície de limite de elasticidade
N	– Número de iterações
$N_{\text{máx}}$	– Número máximo de iterações admissível
$N_{\text{nós}}$	– Número de componentes do vector \mathbf{U}
\mathbf{N}	– Matriz global de funções de forma no domínio Ω
\mathbf{N}_Γ	– Matriz global de funções de forma na superfície Γ
\mathbf{R}	– Resíduo
\mathbf{R}_t	– Resíduo no instante t
$\mathbf{R}_{t+\Delta t}$	– Resíduo no instante $t + \Delta t$
\mathbf{R}_N	– Vector de forças nodais
$\bar{\mathbf{R}}_N$	– Vector de forças nodais prescritas
\mathbf{s}	– Tensor das tensões desviadoras
t	– Tempo ou pseudotempo
t'	– Pseudotempo
$\bar{\mathbf{t}}$	– Força superficial prescrita na superfície Γ_N
\mathbf{u}	– Vector de deslocamentos
$\bar{\mathbf{u}}$	– Deslocamento prescrito na superfície Γ_D
\mathbf{U}	– Vector dos deslocamentos nodais, em que as componentes relativas aos nós associados a Γ_D correspondem a valores de deslocamento prescrito
\mathbf{U}_t	– Vector dos deslocamentos nodais no instante t
$\mathbf{U}_{t+\Delta t}$	– Vector dos deslocamentos nodais no instante $t + \Delta t$
x_i	– Coordenadas cartesianas, com $i = 1, \dots, 3$
$\tilde{\beta}$	– Parâmetro do módulo elastoplástico coerente
Γ	– Fronteira de Ω
Γ_D	– Superfície com condições de fronteira de Dirichlet
Γ_N	– Superfície com condições de fronteira de Neumann
δ_{ij}	– Símbolo de delta de Kronecker
$\delta\mathbf{u}$	– Campo arbitrário de deslocamentos virtuais contínuo e suficientemente regular em Ω , com $\delta\mathbf{u} = \mathbf{0}$ em Γ_D
$\delta\mathbf{U}$	– Vector dos deslocamentos virtuais nodais, sendo nulas as componentes relativas aos nós associados a Γ_D
$\Delta\mathbf{F}_{t+\Delta t}$	– Incremento do vector de forças externas no intervalo de pseudotempo Δt
$\Delta\mathbf{U}_{t+\Delta t}$	– Incremento do vector dos deslocamentos nodais no intervalo de pseudotempo Δt
$\Delta\boldsymbol{\epsilon}_{t+\Delta t}$	– Incremento do tensor das deformações no intervalo de pseudotempo Δt
$\Delta\lambda_{t+\Delta t}$	– Incremento do multiplicador plástico no intervalo de pseudotempo Δt
ε_{tol}	– Parâmetro de tolerância predefinido
$\bar{\epsilon}^P$	– Deformação plástica equivalente
$\bar{\epsilon}_t^P$	– Deformação plástica equivalente no pseudo-instante t
$\dot{\bar{\epsilon}}^P$	– Taxa pseudotemporal de deformação plástica equivalente

ϵ	– Tensor das deformações totais
ϵ_t	– Tensor das deformações no pseudo-instante t
$\epsilon_{t+\Delta t}$	– Tensor das deformações no pseudo-instante $t + \Delta t$
ϵ^e	– Componente elástica do tensor das deformações totais
ϵ^p	– Componente plástica do tensor das deformações totais
ϵ_t^p	– Componente plástica do tensor das deformações no pseudo-instante t
$\dot{\epsilon}^p$	– Tensor das taxas pseudotemporais de deformação plástica
F	– Algoritmo numérico de integração implícita em elastoplasticidade
ζ	– Parâmetro da elastoplasticidade
κ	– Módulo de incompressibilidade
λ	– Multiplicador plástico
Π	– Plano desviador
ϱ	– Parâmetro do módulo elastoplástico tangente
$\bar{\varrho}$	– Parâmetro dos módulos elastoplásticos tangente e coerente
$\tilde{\varrho}$	– Parâmetro do módulo elastoplástico coerente
$\bar{\sigma}$	– Tensão equivalente de von Mises
σ_Y	– Tensão de limite de elasticidade em tracção simples
σ_Y^0	– Valor inicial da tensão de limite de elasticidade em tracção simples
σ	– Tensor das tensões de Cauchy
σ_t	– Tensor das tensões de Cauchy no pseudo-instante t
$\sigma_{t+\Delta t}$	– Tensor das tensões de Cauchy no pseudo-instante $t + \Delta t$
φ_e	– Parâmetro escalar de encruamento
Ω	– Conjunto aberto $\Omega \in \mathbb{R}^3$, delimitado pela fronteira Γ
$\bar{\Omega}$	– Fecho de Ω , sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$
\mathfrak{S}	– Tensor identidade não-geral de quarta ordem
$\mathbf{1}$	– Tensor identidade de segunda ordem
$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}}$	– Matriz jacobiana de \mathbf{R}
$\ \cdot\ $	– Norma de Frobenius de uma matriz ou de um tensor de segunda ordem ou norma euclidiana de um vector

A.4 Homogeneização por Expansão Assimptótica em Termoelasticidade Quase-Estática Desacoplada

D_{ijkl}	– Componentes do tensor de elasticidade
D_{ijkl}^h	– Componentes do tensor homogeneizado de elasticidade
D_{ijkl}^ε	– Componentes do tensor de elasticidade no sistema de coordenadas da macroescala
\mathbf{D}	– Tensor de elasticidade
\mathbf{D}^h	– Tensor homogeneizado de elasticidade
f_i	– Componentes do vector de forças volúmicas
h_c	– Coeficiente de convecção
i	– Índice
\mathbf{I}_j^k	– Componentes do tensor identidade de segunda ordem, $\mathbf{1}$, num referencial cartesiano ortonormado
j	– Índice
k	– Índice

k_{ij}	–	Componentes do tensor de condutividade térmica
k_{ij}^h	–	Componentes do tensor homogeneizado de condutividade térmica
k_{ij}^ε	–	Componentes do tensor de condutividade térmica no sistema de coordenadas da macroescala
\mathbf{k}	–	Tensor de condutividade térmica
\mathbf{k}^h	–	Tensor homogeneizado de condutividade térmica
l	–	Índice
m	–	Índice
n	–	Índice
n_i	–	Componentes de um versor normal exterior às superfícies Γ_{N_T} ou Γ_{R_T}
n_j	–	Componentes de um versor normal exterior à superfície Γ_{N_u}
p	–	Índice
q_i	–	Componentes do vector de fluxos superficiais de calor por condução
\bar{q}	–	Valor prescrito de fluxo de calor por condução por unidade área
\tilde{q}_i^ε	–	Aproximação de ordem zero em ε para o campo microestrutural de fluxos superficiais de calor por condução
Q	–	Taxa temporal de geração de calor por unidade de volume
\bar{t}_i	–	Valor prescrito de força superficial
T	–	Campo de temperaturas
T_0	–	Temperatura de referência
T_∞	–	Temperatura do meio ambiente
$T^{(r)}$	–	Corrector de ordem r do campo de temperaturas, com $r \in \mathbb{N}_0$
$T^{(0)}$	–	Temperatura global do material homogeneizado associado à macroescala
$T^{(2)}$	–	Corrector de segunda ordem do campo de temperaturas
T^ε	–	Campo de temperaturas no sistema de coordenadas da macroescala
\tilde{T}^ε	–	Aproximação de primeira ordem, <i>i.e.</i> linear relativamente a ε , da expansão assimptótica do campo de temperaturas T^ε
\bar{T}	–	Valor prescrito de temperatura
$\bar{T}^{(1)}$	–	Constante de integração em \mathbf{y}
$\bar{T}^{(2)}$	–	Constante de integração em \mathbf{y}
u_i	–	Componentes do vector de deslocamentos
$u_i^{(r)}$	–	Correctores de ordem r do campo de deslocamentos, com $r \in \mathbb{N}_0$
$u_i^{(0)}$	–	Deslocamento global do material homogeneizado associado à macroescala
$u_i^{(2)}$	–	Corrector de segunda ordem do campo de deslocamentos
\bar{u}_i	–	Valor prescrito de deslocamento
$\bar{u}_i^{(1)}$	–	Constantes de integração em \mathbf{y}
$\bar{u}_i^{(2)}$	–	Constantes de integração em \mathbf{y}
u_i^ε	–	Componentes do campo de deslocamentos no sistema de coordenadas da macroescala
\tilde{u}_i^ε	–	Aproximação de primeira ordem, <i>i.e.</i> linear relativamente a ε , da expansão assimptótica do campo de deslocamentos u_i^ε
$\mathbf{u}^{(0)}$	–	Campo macroestrutural de deslocamentos
\mathbf{u}^ε	–	Campo de deslocamentos no sistema de coordenadas da macroescala
V_Ω^0	–	Conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em Γ_{D_T} ou Γ_{D_u}
\tilde{V}_Y	–	Conjunto das funções Y -periódicas contínuas suficientemente regulares com valor médio nulo em Y

x_i	– Coordenadas cartesianas da macroescala
\mathbf{x}	– Variável do domínio da macroescala
y_i	– Coordenadas cartesianas da microescala
\mathbf{y}	– Variável do domínio da microescala
Y	– Domínio da microescala
α_{ij}	– Componentes do tensor de expansibilidade térmica
α_{ij}^ε	– Componentes do tensor de expansibilidade térmica no sistema de coordenadas da macroescala
$\boldsymbol{\alpha}$	– Tensor de expansibilidade térmica
β_{ij}	– Componentes do tensor dos módulos térmicos
β_{ij}^h	– Componentes do tensor homogeneizado dos módulos térmicos
$\boldsymbol{\beta}^h$	– Tensor homogeneizado dos módulos térmicos
Γ	– Fronteira de Ω
Γ_{DT}	– Superfície com condições de fronteira de Dirichlet
Γ_{NT}	– Superfície com condições de fronteira de Neumann
Γ_{RT}	– Superfície com condições de fronteira de Robin
Γ_Y	– Fronteira do domínio Y da célula unitária
δ_{ij}	– Símbolo de delta de Kronecker
ε	– Relação entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroestrutura ou índice superior de εY -periodicidade
ϵ_{ij}	– Componentes do tensor das deformações
$\tilde{\epsilon}_{ij}^\varepsilon$	– Aproximação de ordem zero em ε para o campo microestrutural de deformações
ϑ_i^j	– Componentes Y -periódicas do tensor do campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva de segunda ordem
Θ_i^{jkl}	– Componentes Y -periódicas do tensor do campo de deslocamentos característicos de segunda ordem
Ξ_i	– Componentes do campo macroestrutural homogeneizado de fluxos superficiais de calor por condução
σ_{ij}	– Componentes do tensor das tensões de Cauchy
$\tilde{\sigma}_i^\varepsilon$	– Aproximação de ordem zero em ε para o campo microestrutural de tensões
Σ_{ij}	– Componentes do campo macroestrutural homogeneizado de tensões
Υ^i	– Componentes Y -periódicas do vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos
Υ	– Vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos de primeira ordem
Φ^{ij}	– Componentes Y -periódicas do tensor do campo de deslocamentos termocaracterísticos de segunda ordem
χ_i^{kl}	– Componentes Y -periódicas do tensor do campo de deslocamentos característicos
χ	– Tensor do campo de deslocamentos característicos de primeira ordem
Ψ_i	– Componentes Y -periódicas do vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva
Ψ	– Vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva
Ω	– Domínio da macroescala
Ω^h	– Domínio da macroescala associado a um material homogéneo
$\bar{\Omega}$	– Fecho de Ω , sendo $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$

\mathfrak{S}_{ij}^{kl}	– Componentes do tensor identidade não-geral de quarta ordem \mathfrak{S} num referencial cartesiano ortonormado
$\mathbf{1}$	– Tensor identidade de segunda ordem
$\langle \cdot \rangle_Y$	– Valor médio de uma função Y -periódica em Y

A.5 Computação Paralela

e_f	– Eficiência do cálculo paralelo
f	– Fração intrinsecamente sequencial, <i>i.e.</i> não-paralelizável, de um programa
N	– Número de nós que formam uma rede estática, número de processadores/memórias numa rede dinâmica ou número de entradas/saídas numa rede Ómega
P	– Número de processadores
s_e	– <i>Speed-up</i> escalado
s_p	– <i>Speed-up</i>
T_s	– Tempo de execução de um algoritmo sequencial
T_p	– Tempo de execução de um algoritmo paralelo

A.6 Resolução de Sistemas de Equações Lineares

\mathbf{A}	– Matriz de coeficientes do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{b}	– Vector de termos independentes do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{B}	– Matriz de erro da decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{CC}^T + \mathbf{B}$
\mathbf{c}	– Vector de incógnitas do sistema $\mathbf{Pc} = \mathbf{d}$
\mathbf{C}	– Matriz triangular inferior da decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{CC}^T + \mathbf{B}$
\mathbf{d}	– Vector de termos independentes do sistema $\mathbf{Pc} = \mathbf{d}$
\mathbf{D}	– Matriz diagonal da decomposição \mathbf{LDL}^T
\mathbf{D}_A	– Matriz diagonal de \mathbf{A} , <i>i.e.</i> $\mathbf{D}_A \doteq \text{diag}(\mathbf{A})$
\mathbf{e}	– Erro associado ao sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{G}	– Matriz triangular inferior — factor de Cholesky da decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{GG}^T$
k	– Índice de iteração
K_m	– Subespaço de Krylov de dimensão m
\mathbf{L}	– Matriz triangular inferior da decomposição \mathbf{LDL}^T
\mathbf{L}_A	– Matriz triangular estritamente inferior de \mathbf{A}
\mathbf{M}	– Matriz de decomposição da matriz de coeficientes do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
$N_{\text{máx}}$	– Número máximo de iterações admissível
\mathbf{N}	– Matriz de decomposição da matriz de coeficientes do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{p}	– Vector de direcção de busca do método do gradiente conjugado
\mathbf{P}	– Matriz de condicionamento
\mathbf{r}	– Resíduo associado ao sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
$\mathbf{r}^{(0)}$	– Resíduo inicial associado ao sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{U}_A	– Matriz triangular estritamente superior de \mathbf{A}
w	– Parâmetro de ponderação dos métodos de sobre-relaxação
\mathbf{x}	– Vector de incógnitas dos sistemas $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ e $\mathbf{G}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$
$\mathbf{x}^{(0)}$	– Aproximação inicial da solução do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
\mathbf{x}^*	– Solução exacta do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

\mathbf{y}	– Vector de incógnitas do sistema $\mathbf{G}\mathbf{y} = \mathbf{b}$ ou vector de termos independentes do sistema $\mathbf{G}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$
\mathbf{z}	– Resíduo preconditionado, com $\mathbf{z} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{r}$
α	– Parâmetro escalar do método do gradiente conjugado
β	– Parâmetro escalar do método do gradiente conjugado
$\kappa(\mathbf{A})$	– Número de condição espectral da matriz \mathbf{A} , com $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A})}$
$\lambda_{\max}(\mathbf{A})$	– Valor próprio máximo da matriz \mathbf{A}
$\lambda_{\min}(\mathbf{A})$	– Valor próprio mínimo da matriz \mathbf{A}
φ	– Função quadrática associada ao método do gradiente conjugado
$\ \mathbf{x}\ _{\mathbf{A}}$	– Norma- \mathbf{A} de \mathbf{x} , com $\ \mathbf{x}\ _{\mathbf{A}} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}$

A.7 O Programa COMMA3D

\mathbf{A}	– Matriz de coeficientes
\mathbf{B}	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma, para o campo de deslocamentos
\mathbf{B}^{mac}	– Matriz elementar das derivadas parciais das funções de forma associada a um elemento finito da macroescala, para o campo de deslocamentos
\mathbf{B}^{mic}	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma associada aos elementos finitos da microescala, para o campo de deslocamentos
$\bar{\mathbf{B}}$	– Método de integração reduzida selectiva
\mathbf{C}_r	– Representação de qualquer um dos correctores Υ , χ e Ψ
\mathbf{D}	– Matriz (global) de elasticidade
\mathbf{D}^h	– Matriz homogeneizada de elasticidade
\mathbf{D}^{mic}	– Matriz global de elasticidade associada aos elementos finitos da microescala
f_i	– Componente do vector \mathbf{f}
\mathbf{f}	– Vector dos termos independentes do sistema global de equações $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$
\mathbf{F}^D	– Matriz dos vectores de solicitações mecânicas características
\mathbf{F}^k	– Matriz dos vectores de solicitações termocaracterísticas
\mathbf{F}^β	– Vector de solicitações termoelastocaracterísticas
\mathbf{i}	– Vector que, no esquema de armazenamento CRS, contém o índice relativo à coluna de cada coeficiente não-nulo na matriz \mathbf{A}
\mathbf{I}	– Matriz identidade
\mathbf{j}	– Vector que, no esquema de armazenamento CRS, contém o índice, em \mathbf{m} , do primeiro valor não-nulo de cada linha da matriz \mathbf{A}
k	– Índice superior de quantidades elementares
\mathbf{k}	– Matriz (global) de condutividade térmica
\mathbf{k}^e	– Matriz elementar de condutividade térmica
\mathbf{k}^h	– Matriz homogeneizada de condutividade térmica
\mathbf{k}^{mic}	– Matriz global de condutividade térmica associada aos elementos finitos da microescala
K_{ii}	– Componente diagonal matriz \mathbf{K}
\mathbf{K}	– Matriz dos coeficientes do sistema global de equações $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$
\mathbf{m}	– Vector que, no esquema de armazenamento CRS, contém unicamente os valores não-nulos de \mathbf{A}

$\tilde{\mathbf{M}}$	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma, <i>i.e.</i> de interpolação do campo do gradiente de temperaturas
$\tilde{\mathbf{M}}^{\text{mac}}$	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma associada a um elemento finito da macroescala, para o campo do gradiente de temperaturas
$\tilde{\mathbf{M}}^{\text{mic}}$	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma associada aos elementos finitos da microescala, para o campo do gradiente de temperaturas
n	– Número de linhas da matriz dos coeficientes \mathbf{A}
n_{ef}	– Número total de elementos finitos utilizados na discretização da célula representativa unitária
$n_{\bar{n}}$	– Número de coeficientes não-nulos da matriz de coeficientes \mathbf{A}
\mathbf{p}	– Vector de direcção de busca do método do gradiente conjugado
$\mathbf{q}^{(1)}$	– Campo microestrutural de fluxos superficiais de calor por condução
T_i	– Componente do vector de temperaturas
u_i	– Componente do vector de deslocamentos
\bar{u}_i	– Valor prescrito de deslocamento
\mathbf{u}	– Vector de incógnitas do sistema global de equações $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$
w_p	– Peso de penalidade
y_i	– Coordenadas cartesianas da microescala, com $i = 1, \dots, 3$
y_i^0	– Limites das coordenadas cartesianas da microescala que definem uma célula paralelepipedica, com $i = 1, \dots, 3$
Y	– Domínio da microescala
Y	– Volume total da célula representativa unitária
Y^k	– Volume de um elemento finito genérico k
α	– Parâmetro escalar do método do gradiente conjugado
$\boldsymbol{\alpha}^h$	– Vector homogeneizado dos coeficientes de dilatação térmica
β	– Parâmetro escalar do método do gradiente conjugado
$\boldsymbol{\beta}$	– Vector (global) dos módulos térmicos
$\boldsymbol{\beta}^h$	– Vector homogeneizado dos módulos térmicos
$\boldsymbol{\beta}^{\text{mic}}$	– Vector global dos módulos térmicos associada aos elementos finitos da microescala
$\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}$	– Campo microestrutural de deformação
λ	– Multiplicador de Lagrange
$\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$	– Campo microestrutural de tensão
$\boldsymbol{\Upsilon}$	– Matriz de deslocamentos termocaracterísticos
$\boldsymbol{\chi}$	– Matriz de deslocamentos característicos
$\boldsymbol{\Psi}$	– Vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva

A.8 Propriedades Termomecânicas Lineares de Materiais Compósitos

D_{ij}^h	– Componentes da matriz homogeneizada de elasticidade
\mathbf{D}^h	– Matriz homogeneizada de elasticidade
E_m	– Módulo de elasticidade do material da matriz
E_r	– Módulo de elasticidade do material do reforço
E_{11}	– Módulo de elasticidade longitudinal na direcção das fibras

E_{22}	– Módulo de elasticidade longitudinal na direcção transversal às fibras
e_{33}	– Módulo de elasticidade longitudinal associado à direcção 3
$E_{\text{inf}}^{\text{HS}}$	– Limite inferior de Hashin-Shtrikman para o módulo de elasticidade longitudinal
$E_{\text{sup}}^{\text{HS}}$	– Limite superior de Hashin-Shtrikman para o módulo de elasticidade longitudinal
E^{R}	– Módulo de elasticidade longitudinal de Reuss
$E_{\text{inf}}^{\text{Ra}}$	– Limite inferior de Ravichandran para o módulo de elasticidade longitudinal
$E_{\text{sup}}^{\text{Ra}}$	– Limite superior de Ravichandran para o módulo de elasticidade longitudinal
E^{V}	– Módulo de elasticidade longitudinal de Voigt
f_r	– Fração volúmica de reforço
\mathbf{F}^{D}	– Matriz das solicitações mecânicas características
$\mathbf{F}_{kl}^{\text{D}}$	– Modos de solicitações mecânicas características
\mathbf{F}^{k}	– Campo de solicitações termocaracterísticas
\mathbf{F}^{β}	– Campo das solicitações termoelastocaracterísticas
G	– Módulo de corte
G_{m}	– Módulo de corte do material da matriz
G_{12}	– Módulo de corte associado às direcções 1 e 2
G_{13}	– Módulo de corte associado às direcções 1 e 3
G_{23}	– Módulo de corte associado às direcções 2 e 3
$G_{\text{inf}}^{\text{HS}}$	– Limite inferior de Hashin-Shtrikman para o módulo de corte
$G_{\text{sup}}^{\text{HS}}$	– Limite superior de Hashin-Shtrikman para o módulo de corte
h	– Índice superior de propriedade homogeneizada
inf	– Índice inferior de inferior
k_{m}	– Coeficiente de condutividade térmica do material da matriz
k_r	– Coeficiente de condutividade térmica do material do reforço
k_{11}	– Coeficiente de condutividade térmica associado à direcção 1
k_{22}	– Coeficiente de condutividade térmica associado à direcção 2
k_{33}	– Coeficiente de condutividade térmica associado à direcção 3
k_{ij}^{h}	– Componentes da matriz homogeneizada de condutividade térmica
$k_{\text{inf}}^{\text{HS}}$	– Limite inferior de Hashin-Shtrikman para o coeficiente de condutividade térmica
$k_{\text{sup}}^{\text{HS}}$	– Limite superior de Hashin-Shtrikman para o coeficiente de condutividade térmica
k^{L}	– Coeficiente de condutividade térmica de Landauer
k^{M}	– Coeficiente de condutividade térmica de Maxwell
k^{R}	– Coeficiente de condutividade térmica de Rayleigh
\mathbf{k}^{h}	– Matriz homogeneizada de condutividade térmica
m	– Índice inferior de matriz
n_{el}	– Número de elementos finitos
n_{gl}	– Número de graus de liberdade
r	– Índice inferior de reforço
sup	– Índice inferior de superior
x_1	– Coordenada na direcção 1
x_2	– Coordenada na direcção 2
x_3	– Coordenada na direcção 3
α_{m}	– Coeficiente de expansibilidade térmica do material da matriz
α_r	– Coeficiente de expansibilidade térmica do material do reforço

α_{11}	–	Coeficiente de expansibilidade térmica associado à direcção 1
α_{22}	–	Coeficiente de expansibilidade térmica associado à direcção 2
α_{33}	–	Coeficiente de expansibilidade térmica associado à direcção 3
α^{FR}	–	Coeficiente de expansibilidade térmica de Fahmy e Ragai
α^{K}	–	Coeficiente de expansibilidade térmica de Kerner
α^{S}	–	Coeficiente de expansibilidade térmica de Schapery
$\alpha_{\text{inf}}^{\text{S}}$	–	Limite inferior de Schapery para o coeficiente de expansibilidade térmica
$\alpha_{\text{sup}}^{\text{S}}$	–	Limite superior de Schapery para o coeficiente de expansibilidade térmica
β_{ij}^{h}	–	Componentes do vector homogeneizado dos módulos térmicos
β^{h}	–	Vector homogeneizado dos módulos térmicos
γ_{13}	–	Deformação angular associada às direcções 1 e 3
γ_{12}	–	Deformação angular associada às direcções 1 e 2
γ_{23}	–	Deformação angular associada às direcções 2 e 3
η_1	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
η_2	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
η_3	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
η_4	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
η^*	–	Parâmetro auxiliar das equações de Halpin-Tsai
κ	–	Módulo de incompressibilidade
κ_{m}	–	Módulo de incompressibilidade do material da matriz
κ_{r}	–	Módulo de incompressibilidade do material de reforço
$\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}}$	–	Limite inferior de Hashin-Shtrikman para o módulo de incompressibilidade
$\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}}$	–	Limite superior de Hashin-Shtrikman para o módulo de incompressibilidade
ν_{m}	–	Coeficiente de Poisson do material da matriz
ν_{r}	–	Coeficiente de Poisson do material do reforço
ν_{12}	–	Coeficiente de Poisson associado às direcções 1 e 2
ν_{13}	–	Coeficiente de Poisson associado às direcções 1 e 3
ν_{23}	–	Coeficiente de Poisson associado às direcções 2 e 3
$\nu_{\text{inf}}^{\text{HS}}$	–	Limite inferior de Hashin-Shtrikman para o coeficiente de Poisson
$\nu_{\text{sup}}^{\text{HS}}$	–	Limite superior de Hashin-Shtrikman para o coeficiente de Poisson
$\nu_{\text{inf}}^{\text{Ra}}$	–	Limite inferior de Ravichandran para o coeficiente de Poisson
$\nu_{\text{sup}}^{\text{Ra}}$	–	Limite superior de Ravichandran para o coeficiente de Poisson
ξ_1	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
ξ_2	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
ξ_3	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
ξ_4	–	Parâmetro das equações de Halpin-Tsai
ξ^*	–	Parâmetro auxiliar das equações de Halpin-Tsai
τ_{12}	–	Tensão de corte associada às direcções 1 e 2
τ_{13}	–	Tensão de corte associada às direcções 1 e 3
τ_{23}	–	Tensão de corte associada às direcções 2 e 3
Υ	–	Campo de deslocamentos termocaracterísticos
ϕ_{da}	–	Razão diâmetro-aresta — relação entre o diâmetro de uma esfera e o comprimento da aresta da célula representativa unitária
χ	–	Campo de deslocamentos característicos
χ_{kl}	–	Modos próprios de deformação associados aos deslocamentos característicos
ψ_{r}	–	Parâmetro das equações de Ravichandran
Ψ	–	Campo dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva
$\ \cdot\ $	–	Norma de Frobenius de uma matriz

A.9 Modelação do Comportamento Termoelástico de Materiais Compósitos

d_{rr}	– Deslocamento radial
E_m	– Módulo de elasticidade do material da matriz
E_r	– Módulo de elasticidade do material do reforço
f_r	– Fracção volúmica de reforço
k_m	– Coeficiente de condutividade térmica do material da matriz
k_r	– Coeficiente de condutividade térmica do material do reforço
m	– Índice inferior de matriz
q_{rr}	– Fluxo superficial de calor por condução na direcção radial
r	– Índice inferior de reforço
r	– Raio
r_{ext}	– Raio externo
r_{int}	– Raio interno
T_0	– Temperatura de referência
α_m	– Coeficiente de expansibilidade térmica do material da matriz
α_r	– Coeficiente de expansibilidade térmica do material do reforço
ν_m	– Coeficiente de Poisson do material da matriz
ν_r	– Coeficiente de Poisson do material do reforço
$\sigma_{\theta\theta}(r)$	– Campo (radial) de tensão circunferencial
$\bar{\sigma}$	– Tensão equivalente de von Mises

A.10 Modelação de Comportamento Elastoplástico em Provetes Entalhados

\bar{B}	– Método de integração reduzida selectiva
e	– Deformação nominal na secção transversal
e_p	– Eficiência paralela
E	– Módulo de elasticidade longitudinal
E_1	– Módulo de elasticidade longitudinal num estado de deformação plana
H	– Módulo de encruamento isotrópico
\tilde{k}	– Coeficiente de encruamento
\tilde{k}_1	– Coeficiente de encruamento num estado de deformação plana
K_t	– Factor de concentração de tensões, em elasticidade
K_ϵ	– Factor de concentração de deformações, em elastoplasticidade
K_σ	– Factor de concentração de tensões, em elastoplasticidade
n	– Expoente de encruamento
n_{gl}	– Número de graus de liberdade
n_p	– Número de processadores
n_1	– Expoente de encruamento num estado de deformação plana
r_{cr}	– Raio de curvatura na raiz do entalhe
R_r	– Resíduo relativo
s_p	– <i>Speed-up</i>
S	– Tensão nominal na secção transversal
w	– Espessura

W_S	–	Densidade de energia de deformação nominal
W_σ	–	Densidade de energia de deformação na raiz de um entalhe
ϵ	–	Valor local de deformação
ϵ_{MG}	–	Deformação de Molski-Glinka
ϵ_N	–	Deformação de Neuber
ϵ_p	–	Componente plástica da deformação
ϵ_1	–	Deformação principal numa condição de deformação plana
$\bar{\epsilon}$	–	Deformação
ν	–	Coefficiente de Poisson
$\tilde{\nu}$	–	Coefficiente generalizado de Poisson
σ	–	Valor (local) da tensão longitudinal
σ_c	–	Tensão de cedência
$\sigma_{m\acute{a}x}$	–	Tensão máxima existente na zona do entalhe
σ_{MG}	–	Tensão de Molski-Glinka
σ_N	–	Tensão de Neuber
σ_1	–	Tensão principal numa condição de deformação plana
$\ \mathbf{r}^{(k)}\ $	–	Norma do vector de resíduos
$\ \mathbf{r}^{(0)}\ $	–	Norma do vector de resíduos inicial

A.11 Siglas e Acrónimos

Bi-CGSTAB	–	<i>Bi-Conjugate Gradient STABilized</i>
BSEND	–	<i>Buffered SEND</i>
CAR	–	Construção e Assemblagem da Rigidez
CC-NUMA	–	<i>Cache-Coherent Non-Uniform Memory Access</i>
CESDIS	–	<i>Center of Excellence in Space Data Information Sciences</i>
CG	–	<i>Conjugate Gradient</i>
Chimp	–	<i>Common High-level Interface to Message-Passing</i>
COMA	–	<i>Cache-Only Memory Architecture</i>
COMMA3D	–	<i>COMposite Material Analyser — 3-Dimensional</i>
CRS	–	<i>Compressed Row Storage</i>
E	–	Emissor
EDP	–	Estado de Deformação Plana
ETCA	–	<i>Établissement Technique Central de l'Armement</i>
ETD	–	Estado de Tensão Plana
FD	–	Fluxo de Dados
FI	–	Fluxo de Instruções
<i>flits</i>	–	<i>flow-control digits</i>
FLOPS	–	<i>FLoating-point Operations Per Second</i>
FORTRAN	–	IBM Mathematical FOR mula TRAN slating System
GMRES	–	<i>Generalised Minimal RESidual</i>
HEA	–	Homogeneização por Expansão Assimptótica
HL	–	Hexaedro Linear
HL-IC	–	Hexaedro Linear com Integração Completa
HL-IRS	–	Hexaedro Linear com Integração Reduzida Selectiva
HPF	–	<i>High Performance Fortran</i>
HQ	–	Hexaedro Quadrático

IBSEND	–	<i>Immediate Buffered SEND</i>
IC	–	Incompleta de Cholesky
IC(0)	–	Incompleta de Cholesky de nível 0
IC(1)	–	Incompleta de Cholesky de nível 1
IRECV	–	<i>Immediate RECeive</i>
IRSEND	–	<i>Immediate Ready SEND</i>
ISEND	–	<i>Immediate SEND</i>
ISSEND	–	<i>Immediate Synchronous SEND</i>
JAC	–	JACobi
LI	–	Leitura e Iniciação
M	–	Memória
MIMD	–	<i>Multiple Instruction streams–Multiple Data streams</i>
MINRES	–	<i>MINimal RESidual</i>
MISD	–	<i>Multiple Instruction streams–Single Data stream</i>
MPI	–	<i>Message-Passing Interface</i>
MPICH	–	<i>Message-Passing Interface CHameleon</i>
MPP	–	<i>Massively Parallel Processors</i>
NASA	–	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NORMA	–	<i>NON-Remote Memory Access</i>
NUMA	–	<i>Non-Uniform Memory Access</i>
P	–	Processador
PBS	–	<i>Portable Batch System</i>
PC	–	<i>Personal Computer</i>
PE	–	Partícula Esférica
PICL	–	<i>Portable Instrumented Communication Library</i>
PARMACS	–	<i>PARallel MACroS</i>
PVM	–	<i>Parallel Virtual Machine</i>
R	–	Receptor
RAM	–	<i>Random Access Memory</i>
RECV	–	<i>RECeive</i>
RS	–	Resolução do Sistema
RSEND	–	<i>Ready SEND</i>
SIMD	–	<i>Single Instruction stream–Multiple Data streams</i>
SISD	–	<i>Single Instruction stream–Single Data stream</i>
SMP	–	<i>Symmetric Multi-Processor</i>
SOR	–	<i>Successive Over-Relaxation</i>
SP	–	Sem Precondicionamento
SPMD	–	<i>Single Program–Multiple Data</i>
SSEND	–	<i>Synchronous SEND</i>
SSOR	–	<i>Symmetric Successive Over-Relaxation</i>
SuSE	–	<i>Software und SystemEntwicklung</i>
SYMMLQ	–	<i>SYMMetric LQ</i>
TL	–	Tetraedro Linear
TQ	–	Tetraedro Quadrático
UC	–	Unidade de Controlo
UP	–	Unidade de Processamento
UMA	–	<i>Uniform Memory Access</i>
VLIW	–	<i>Very Long Instruction Word</i>

Apêndice B

Rotinas de Comunicação Ponto-a-Ponto

Analisam-se detalhadamente os principais aspectos relativos ao processo de passagem de mensagens em cálculo paralelo e distribuído utilizando rotinas de comunicação ponto-a-ponto, quer bloqueante quer não-bloqueante.

B.1 Rotinas de Comunicação Ponto-a-Ponto Bloqueante

Tal como foi referido na Secção 6.7.2.1, as principais rotinas de comunicação ponto-a-ponto bloqueante são:

- `MPI_RECV` — de recepção;
- `MPI_SSEND` — de envio síncrono;
- `MPI_RSEND` — de envio pronto;
- `MPI_BSEND` — de envio armazenado;
- `MPI_SEND` — de envio padrão.

Em seguida procede-se à análise dos aspectos mais relevantes do processo de passagem de mensagens em cálculo paralelo e distribuído utilizando as rotinas bloqueantes de comunicação ponto-a-ponto.

B.1.1 Rotinas Bloqueantes de Envio Síncrono e de Recepção

Na figura B.1 ilustra-se a comunicação entre dois processos utilizando as rotinas bloqueantes de envio síncrono e de recepção, em que o tempo decorre da esquerda para a direita. As linhas a cheio dos processos emissor (E) e receptor (R) representam instantes em que se verifica a execução dos processos nos nós correspondentes. As linhas a traço descontínuo representam interrupções devidas à passagem de mensagens, enquanto que as linhas a tracejado correspondem à cópia da mensagem de um *buffer* para o outro.

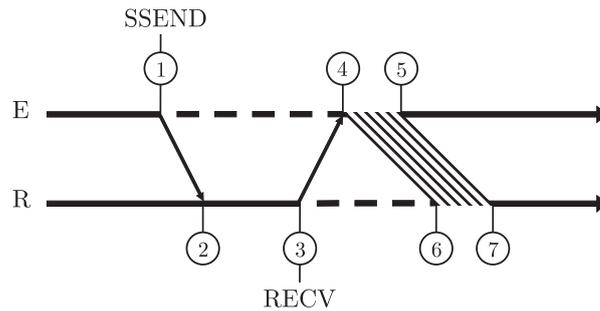


Figura B.1: Representação esquemática de envio síncrono e recepção bloqueantes de mensagem.

De acordo com a figura B.1, pode verificar-se que inicialmente os processos E e R decorrem de modo independente enquanto no nó do processo E vão sendo produzidos os dados de que o processo R necessitará posteriormente. Estes dados vão sendo armazenados no *buffer* de emissão. Finalizado o processo de armazenamento dos dados, o processo E procede à execução do comando de envio síncrono `MPI_SSEND`, enviando uma mensagem ao processo R com a informação de que se encontra pronto para proceder à transferência de dados, e aguardando, entretanto, pela sincronização do processo R (instante 1). Posteriormente, o processo R é informado de que o processo E se encontra pronto para transferir dados (instante 2). Assim, logo que o processo R se encontra disponível para receber os dados, executa o comando de recepção `MPI_RECV`, informando o processo E de que este pode iniciar o processo de transferência da mensagem (instante 3), *i.e.* da cópia dos dados do *buffer* de emissão para o *buffer* de recepção. Somente quando o processo emissor recebe a mensagem de confirmação¹ por parte do receptor é que se inicia a transferência de dados (instante 4) que irão ser copiados para o *buffer* do processo R (instante 6).

Os caracteres bloqueantes dos modos de envio e de recepção utilizados reflectem-se no facto de os processos E e R somente retomarem a sua execução assim que no *buffer* de emissão se concluir a transferência de dados (instante 5) e se verificar o recebimento integral da mensagem por parte do *buffer* de recepção (instante 7), respectivamente. Assim, os processos E e R suspendem a sua execução nos intervalos de tempo 1–5 e 3–7, respectivamente. Conforme se pode ainda constatar na figura B.1, existem duas fontes distintas de *overhead* na passagem da mensagem: *overhead* de sistema e *overhead* de sincronização. O *overhead* de sistema advém do tempo despendido nas cópias dos dados que constituem uma mensagem do *buffer* do processo E para a rede de interligação e desta para o *buffer* do processo R. O *overhead* de sincronização corresponde ao tempo despendido por um dos processos na espera pela ocorrência de um evento no outro processo. Assim, relativamente ao *overhead* de sincronização, no presente caso verifica-se que o processo E tem de esperar pela execução do comando de recepção e pela mensagem de confirmação por parte do processo R, para que proceda à transferência da mensagem. Também no processo receptor ocorre um *overhead* de sincronização decorrente da transmissão da mensagem de confirmação. Embora no exemplo apresentado o *overhead* de sincronização associado ao processo E seja superior ao do processo R, a ocorrência da situação inversa é também possível. Para tal, basta que a execução do comando de recepção `MPI_RECV`, por parte do processo R, preceda a execução do comando de envio síncrono `MPI_SSEND`, por parte do processo E. Conforme se pode constatar, o *overhead* de sincronização pode ser bastante significativo no modo de comunicação síncrono. Os restantes modos de envio bloqueante utilizam diferentes estratégias de comunicação, com o intuito de se reduzir o *overhead* de sincronização.

¹Do inglês: *handshake*.

B.1.2 Rotinas Bloqueantes de Envio Pronto e de Recepção

Na figura B.2 ilustra-se a comunicação entre dois processos utilizando as rotinas bloqueantes de envio pronto e de recepção. Neste caso, a mensagem é enviada para a rede de interligação, logo que ocorra a execução do comando de envio pronto `MPI_RSEND` por parte do processo E (instante 3). No entanto, é necessário que o processo E tenha já recebido (instante 2) uma notificação previamente enviada por parte do receptor (instante 1), informando-o de que a transferência pode ser efectuada. Caso contrário, ocorre um erro no programa. Deste modo, este tipo de comunicação deverá apenas ser utilizado no caso do programador ter a certeza absoluta de que o comando de recepção `MPI_RECV` é executado antes do comando `MPI_RSEND`. A utilização do tipo pronto de envio visa fundamentalmente minimizar os *overheads* de sincronização e de sistema que se encontram associados ao processo emissor da mensagem. Constatam-se que no envio pronto bloqueante, ao contrário do que ocorre no caso do envio síncrono bloqueante, o processo E apenas depende, em espera, o tempo necessário para que os dados que constituem a mensagem sejam transmitidos do *buffer* de emissão para a rede de interligação (intervalo de tempo 3–4), os quais serão posteriormente armazenados no *buffer* de recepção do processo R (intervalo de tempo 5–6). No entanto, atenda-se ao facto de, no caso do comando de recepção `MPI_RECV` ser executado excessivamente cedo, a execução do processo R poder encontrar-se suspensa por demasiado tempo (intervalo de tempo 1–6), incorrendo-se assim num *overhead* de sincronização excessivamente grande.

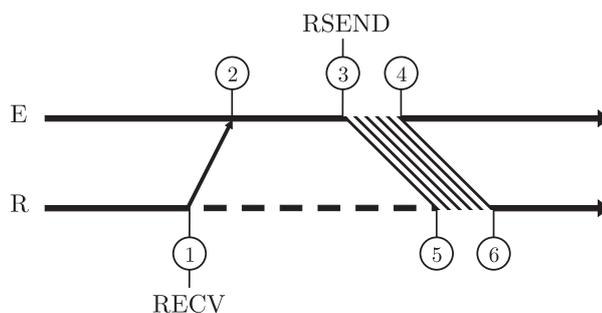


Figura B.2: Representação esquemática de envio pronto e recepção bloqueantes de mensagem.

B.1.3 Rotinas Bloqueantes de Envio Armazenado e de Recepção

A comunicação entre dois processos utilizando as rotinas bloqueantes de envio armazenado e de recepção encontra-se ilustrada na figura B.3. Verifica-se que, aquando da execução do comando de envio armazenado `MPI_BSEND` (instante 1), a mensagem é copiada do *buffer* de emissão do processo E para um *buffer* de sistema, o qual deve ser previamente definido pelo programador. Após a conclusão da operação de cópia (instante 2), a que corresponde um *overhead* de sistema, o processo E retorna ao seu modo de execução. Deste modo, o processo E pode proceder a alterações nos dados do seu *buffer* de emissão, visto que estas não se irão reflectir na mensagem que será enviada. Assim que o processo R se encontre disponível para receber os dados, procede à execução do comando de recepção `MPI_RECV` (instante 3), enviando ao processo E uma notificação de que a transferência pode ser efectuada. Após a recepção desta notificação (instante 4), a mensagem é então transferida, através da rede de interligação, do *buffer* de sistema para o *buffer* do processo R. Somente após se verificar a recepção da totalidade da mensagem por parte do *buffer* do processo R, é que este retorna ao seu modo de execução (instante 5). Assim, constata-se que, embora não haja *overhead* de sincronização para o processo E, este pode ser significativo para o processo R, especialmente no caso de o comando de recepção ser executado previamente ao de envio armazenado. No entanto, a existência de um cópia adicional da mensagem do *buffer* de emissão

para o *buffer* de sistema leva a um acréscimo do *overhead* de sistema neste modo de comunicação. A definição do *buffer* de sistema, por parte do programador, deve ser cuidadosamente efectuada, visto ocorrer um erro no programa no caso do espaço de armazenamento ser insuficiente para alojar a mensagem.

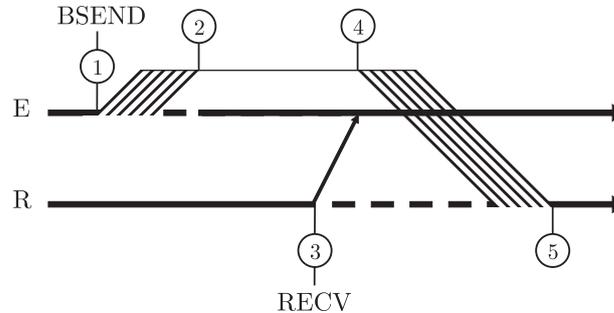


Figura B.3: Representação esquemática de envio armazenado e recepção bloqueantes de mensagem.

B.1.4 Rotinas Bloqueantes de Envio Padrão e de Recepção

O modo de comunicação entre dois processos utilizando as rotinas bloqueantes de envio padrão e de recepção depende da implementação de MPI considerada [MPIF 1995]. No entanto, em geral podem ocorrer duas situações distintas consoante o tamanho da mensagem a ser transmitida seja ou não superior a um valor crítico, designado valor-limiar. Neste contexto, no caso do tamanho da mensagem não ser superior ao valor-limiar (*vd.* figura B.4), verifica-se que, após a execução do comando de envio padrão `MPI_SEND` (instante 1), a mensagem é copiada, através da rede de interligação, do *buffer* de emissão do processo E para um *buffer* do sistema localizado no nó associado ao processo R (instante 3). Assim que no *buffer* de emissão se completa a transferência da mensagem, o processo E retorna ao seu modo de execução (instante 2). Deste modo, ao contrário do que ocorre numa comunicação com as rotinas bloqueantes de envio armazenado e de recepção, em que o *buffer* de sistema deve ser previamente definido pelo programador, nesta situação o referido *buffer* é definido pelo próprio sistema aquando da execução do programa. Posteriormente, a mensagem é transferida do *buffer* do sistema para o *buffer* do processo R, assim que este último execute o comando bloqueante de recepção `MPI_RECV` (instante 4). O processo R retorna ao seu modo de execução, assim que se conclua a recepção da totalidade da mensagem por parte do seu *buffer* de recepção (instante 5). Deste modo, pode constatar-se que, tal como se verifica no caso do envio armazenado bloqueante, a utilização de um *buffer* de sistema parece eliminar o *overhead* de sincronização do processo E, embora se origine um *overhead* de sistema associado à operação de cópia da mensagem para o *buffer* de sistema. No entanto, no caso do espaço de memória do *buffer* de sistema não ser suficiente para albergar de uma só vez todos os dados da mensagem, em vez de ocorrer um erro no processo E, verifica-se que este se mantém bloqueado até que o processo R inicie a transferência de dados do *buffer* de sistema para o seu *buffer* de recepção, libertando assim memória para que o processo E prossiga o processo de cópia. Deste modo, nesta situação particular verifica-se que no processo E pode ocorrer um *overhead* de sincronização. Por fim, refira-se que no caso do comando de recepção `MPI_RECV` ser executado demasiadamente cedo, o processo R pode incorrer num *overhead* de sincronização excessivo.

Na situação alternativa, *i.e.* no caso de o tamanho da mensagem ser superior ao valor-limiar (*vd.* figura B.5), o processo de comunicação ocorre de um modo que, em parte, se assemelha ao verificado quando se utiliza o comando de envio síncrono `MPI_SSEND`. Finalizado o processo de armazenamento dos dados no seu *buffer* de emissão, o processo E procede à execução do comando

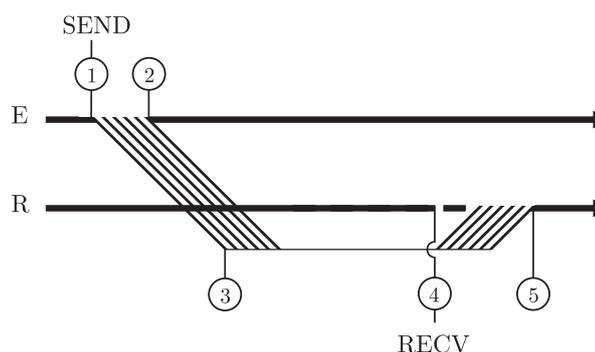


Figura B.4: Representação esquemática de envio padrão e recepção bloqueantes de mensagem (dimensão não-superior ao valor-limiar).

de envio padrão `MPI_SEND` (instante 1) e mantém-se bloqueado até que receba uma notificação, por parte do processo R, de que a transmissão pode ser efectuada (instante 3). Este facto reflecte-se na ocorrência de um *overhead* de sincronização no processo E. A referida notificação é emitida pelo processo R, assim que este se encontra disponível para receber os dados, executando assim o comando de recepção `MPI_RECV` (instante 2). Por fim, os processos E e R retomam a sua execução, assim que se conclua a transferência de dados do *buffer* de emissão (instante 4) e o recebimento integral da mensagem por parte do *buffer* de recepção (instante 5), respectivamente.

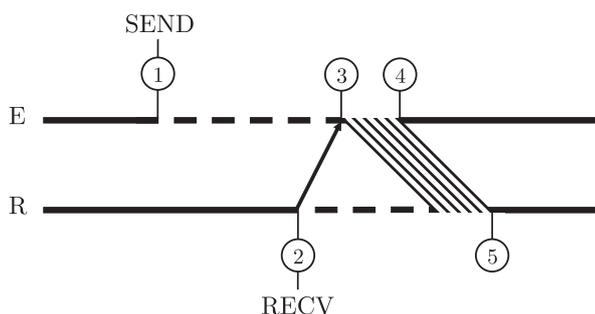


Figura B.5: Representação esquemática de envio padrão e recepção bloqueantes de mensagem (dimensão superior ao valor-limiar).

De acordo com o que foi referido relativamente aos diferentes tipos de envio bloqueante, pode concluir-se que o envio síncrono é o de utilização mais segura. De facto, este tipo de envio não é afectado nem pela ordem com que são executados os comandos de envio e de recepção (ao contrário do envio pronto), nem pela dimensão do *buffer* de sistema utilizado (ao contrário dos envios armazenado e padrão). Este facto confere máxima portabilidade a este tipo de envio bloqueante. No entanto, apresenta o inconveniente de poderem ocorrer *overheads* de sincronização excessivamente longos.

O envio pronto caracteriza-se por ser aquele a que corresponde um *overhead* total mínimo. Além disso, este tipo de envio não requer que o processo emissor receba uma mensagem de confirmação por parte do receptor (tal como no envio síncrono), nem uma operação de cópia da mensagem para um *buffer* de sistema (tal como os envios armazenado e padrão). Todavia, o facto de o comando de recepção ter necessariamente de anteceder o de envio impossibilita a sua utilização de um modo generalizado. O envio armazenado elimina o *overhead* de sincronização do processo emissor, sendo ainda indiferente à ordem com que são executados os comandos de envio e de recepção (ao contrário

do envio pronto). Além disso, este tipo de envio permite ao programador controlar as dimensões do *buffer* de sistema a ser utilizado. Como inconveniente apresenta a característica de originar um *overhead* de sistema associado à operação de cópia da mensagem para o *buffer* de sistema.

Por fim, o envio padrão, que corresponde à implementação básica do MPI, tenta obter uma relação de compromisso que optimize a transmissão de mensagens: armazena mensagens de pequenas dimensões com o intuito de se evitarem *overheads* de sincronização e envia sincronamente mensagens de grandes dimensões de modo a não só minimizar o *overhead* do sistema mas também a evitar a utilização de *buffers* excessivamente grandes.

B.2 Rotinas de Comunicação Ponto-a-Ponto Não-Bloqueante

As principais rotinas de comunicação ponto-a-ponto não-bloqueante são:

- `MPI_Irecv` — de recepção;
- `MPI_Isend` — de envio síncrono;
- `MPI_Irsend` — de envio pronto;
- `MPI_IbSEND` — de envio armazenado;
- `MPI_ISEND` — de envio padrão.

Devido ao facto de estas rotinas permitirem que um processo continue a ser executado logo após a sua invocação, possibilitando assim que o processo desempenhe outras tarefas em simultâneo com as de comunicação, não é seguro proceder-se à modificação do conteúdo de um *buffer* antes de se ter a certeza de que transferência de dados tenha sido concluída de modo efectivo. Neste contexto, a utilização da rotina auxiliar `MPI_WAIT` permite suspender a execução de processos de emissão e de recepção não-bloqueantes até que o *buffer* de emissão fique livre e o *buffer* de recepção receba a totalidade da mensagem, respectivamente. Assim, num processo que utilize uma rotina de envio não-bloqueante, a execução do comando `MPI_WAIT` garante que a reutilização do *buffer* de emissão por parte do processo não adultera a mensagem a ser enviada. Por outro lado, um processo que utilize uma rotina de recepção não-bloqueante executa o comando `MPI_WAIT`, assim que necessite dos dados que constituem a mensagem, de modo a se assegurar de que a mensagem foi integralmente recebida no seu *buffer*. Uma outra alternativa consiste na utilização da rotina auxiliar `MPI_TEST` que, ao contrário da rotina `MPI_WAIT`, não procede ao bloqueamento dos processos, mas permite verificar se a comunicação já foi ou não concluída.

De seguida, sem perda de generalidade e com o intuito de não prolongar demasiado a presente exposição, procede-se a uma abordagem do modo de comunicação considerando apenas as rotinas não-bloqueantes de envio padrão e de recepção. Recorre-se, ainda, ao comando de espera `MPI_WAIT`. A análise das restantes rotinas não-bloqueantes em relação às correspondentes rotinas bloqueantes é feita de modo análogo.

Tal como se verificou para a comunicação entre dois processos utilizando as rotinas bloqueantes, dependendo do tamanho da mensagem a ser transmitida, na comunicação entre dois processos utilizando as rotinas não-bloqueantes de envio padrão e de recepção podem ocorrer, geralmente, duas situações distintas. No caso do tamanho da mensagem não ser superior ao valor-limiar (*vd.* figura B.6) verifica-se que, após a execução do comando de envio padrão `MPI_ISEND` (instante 1), a mensagem é copiada, através da rede de interligação, do *buffer* de emissão do processo E para um *buffer* do sistema localizado no nó associado ao processo R (instante 3). No entanto, devido ao carácter não-bloqueante da comunicação, o processo E retorna imediatamente ao seu modo de execução (instante 1), não aguardando que se complete a transferência da mensagem no *buffer* de emissão (instante 2). Deste modo, para se garantir que a mensagem é correctamente copiada, o processo E necessita de executar um comando de espera `MPI_WAIT`, antes de proceder a qualquer alteração dos dados existentes no *buffer* de emissão (instante 4). Devido ao facto de, no exemplo

apresentado, ter sido já completada a transferência da mensagem do *buffer* de emissão para a rede de interligação (instante 2), não se verifica a suspensão da execução do processo E. Posteriormente, a mensagem é transferida do *buffer* do sistema para o *buffer* do processo R, assim que este último execute o comando não-bloqueante de recepção `MPI_IRecv` (instante 5). No entanto, o processo R retorna imediatamente ao seu modo de execução, pelo que não aguarda pela conclusão da recepção da mensagem. Quando o processo R necessita dos dados que constituem a mensagem, de modo a garantir que esta foi integralmente recebida no seu *buffer*, procede à execução de um comando de espera `MPI_Wait` (instante 6). Note-se que, em alternativa, a execução suficientemente tardia do comando de espera (*e.g.* instante 8), *i.e.* após a conclusão da transferência da mensagem da rede de interligação para o *buffer* de recepção (instante 7), não acarretaria uma suspensão da execução do processo R. O facto de a comunicação envolver mensagens de pequena dimensão leva a que, embora a transferência possa ocorrer simultaneamente à execução dos processos, não seja de esperar uma redução significativa do *overhead* de sistema. Todavia a utilização do envio não-bloqueante revela-se vantajosa no caso do *buffer* de sistema não se encontrar disponível. Nesta situação, a utilização da versão bloqueante de envio obrigaria a que o processo E tivesse necessariamente de aguardar que o processo R retirasse alguns dos dados do *buffer* de sistema. Pelo contrário, a utilização da versão não-bloqueante de envio permite que o processo E continue a ser executado enquanto não se verifica a ocorrência da operação de cópia da mensagem. Por outro lado, a utilização da versão não-bloqueante de recepção, ao permitir que o processo R continue a ser executado até que se verifique a execução do comando `MPI_Wait`, leva a uma redução do *overhead* de sincronização, o que se torna ainda mais significativo no caso do comando de recepção ser executado previamente ao comando de envio.

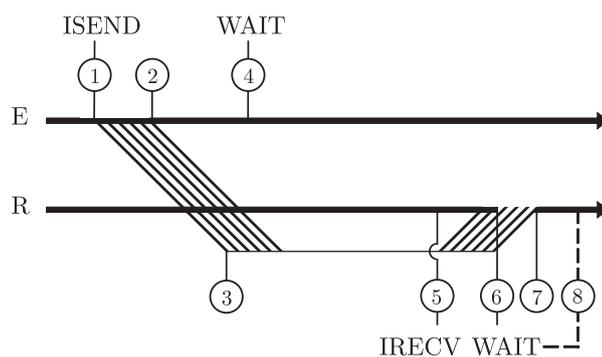


Figura B.6: Representação esquemática de envio padrão e recepção não-bloqueantes de mensagem (dimensão não-superior ao valor-limiar).

No caso de o tamanho da mensagem ser superior ao valor-limiar (*vd.* figura B.7), assim que finaliza o processo de armazenamento dos dados no seu *buffer* de emissão, o processo E procede à execução do comando de envio padrão `MPI_Isend` (instante 1) e retorna imediatamente ao seu modo de execução. Assim, relativamente à situação em que se utiliza o envio padrão bloqueante (*vd.* figura B.5), verifica-se que ocorre uma redução do *overhead* de sincronização associado ao processo E, visto este processo continuar a operar até que seja porventura executado o comando `MPI_Wait` (instante 2). O *overhead* de sincronização poderá ser nulo no caso do comando de espera ser executado suficientemente tarde (*e.g.* instante 8), *i.e.* após a conclusão da transferência da mensagem do *buffer* de emissão para a rede de interligação (instante 6). A transferência de dados do *buffer* de emissão (instante 4) inicia-se, assim que o processo E recebe uma notificação, por parte do processo R, de que a transmissão pode ser efectuada. Esta notificação é emitida pelo processo R, assim que o seu *buffer* se encontre disponível para receber os dados, pelo que é executado o comando de recepção `MPI_IRecv` (instante 3). O processo R regressa imediatamente ao seu modo de execução, não aguardando pela conclusão da recepção da mensagem (instante 7). Assim que o

processo R necessite dos dados que constituem a mensagem, procede à execução de um comando de espera `MPI_WAIT` (instante 5), de modo a garantir que a mensagem seja integralmente recebida no seu *buffer* (instante 7). No caso do comando de espera ser executado suficientemente tarde (e.g. instante 9), não se verifica uma suspensão da execução do processo R. Por fim, refira-se, ainda, que a utilização da versão não-bloqueante de recepção leva a uma redução significativa do *overhead* de sincronização do processo R no caso do comando de recepção ser executado previamente ao comando de envio.

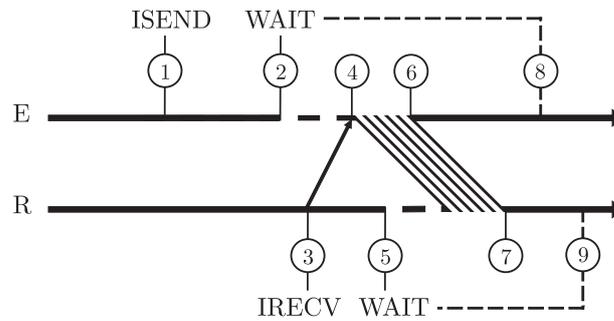


Figura B.7: Representação esquemática de envio padrão e recepção não-bloqueantes de mensagem (dimensão superior ao valor-limiar).

Assim, pode dizer-se que, de um modo geral, as rotinas não-bloqueantes apresentam a vantagem de os processos emissor e receptor poderem continuar o seu modo de execução, mesmo que a mensagem ainda não tenha sido completamente transferida do *buffer* de emissão ou para o *buffer* de recepção, respectivamente. Este facto permite a eliminação de fenómenos de bloqueio mútuo e a redução do *overhead* de sistema. No entanto, a sua utilização exige um controlo mais cuidado por parte do programador.

Por fim, atenda-se ao facto de na comunicação ponto-a-ponto ser possível ainda combinar rotinas de envio bloqueantes com rotinas de recepção não-bloqueantes e vice-versa.

Bibliografia

- [Adams e Doner 1967] D.F. Adams e D.R. Doner. Longitudinal Shear Loading of a Unidirectional Composite, *Journal of Composite Materials* **1**(1):4–17, 1967, *apud* [Liu 1997].
- [Adams *et al.* 1967] D.F. Adams, D.R. Doner e R.L. Thomas. *Mechanical Behavior of Fiber-Reinforced Composite Materials*, AFML-TR-67-96, Air Force Materials Laboratory, Wright-Patterson Air Force Base, Dayton, Ohio, Estados Unidos da América, 1967, *apud* [Liu 1997].
- [Adams *et al.* 1969] R.D. Adams, M.A.O. Fox, R.J.L. Flood, R.J. Friend e R.L. Hewitt. The Dynamic Properties of Unidirectional Carbon and Glass Fiber-Reinforced Plastics in Torsion and Flexure, *Journal of Composite Materials* **3**(4):594–603, 1969, *apud* [Liu 1997].
- [Almasi e Gottlieb 1994] G.S. Almasi e A. Gottlieb. *Highly Parallel Computing*, 2.^a edição, The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Redwood City, Califórnia, Estados Unidos da América, 1994.
- [Amato *et al.* 2000] N.M. Amato, J. Perdue, A. Pietracaprina, G. Pucci e M. Mathis. *Predicting Performance on SMP's. A Case Study: The SGI Power Challenge*, Actas do International Parallel and Distributed Processing Symposium — IPDPS 2000, Cancun, México, pp. 729–737, Maio de 2000.
- [Amaziane *et al.* 1991] B. Amaziane, A. Bourgeat e J. Koebbe. Numerical Simulation and Homogenization of Two-Phase Flow in Heterogeneous Porous Media, *Transport in Porous Media* **6**(5–6):519–547, 1991.
- [Amdahl 1967] G.M. Amdahl. *Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities*, Actas do 1967 AFIPS Spring Joint Computer Conference, AFIPS Press, Reston, Virgínia, Estados Unidos da América, Vol. 30, pp. 483–485, Abril de 1967.
- [Amza *et al.* 1996] C. Amza, A.L. Cox, S. Dwarkadas, P. Keleher, H. Lu, R. Rajamony, W. Yu e W. Zwaenepoel. TreadMarks: Shared Memory Computing on Networks of Workstations, *IEEE Computer* **29**(2):18–28, 1996.
- [Annaratone *et al.* 1987] M. Annaratone, E. Arnould, T. Gross, H.T. Kung, M. Lam, O. Menzilioglu e J.A. Webb. The WARP Computer: Architecture, Implementation and Performance. *IEEE Transactions on Computers* **C-36**(12):1523–1538, 1987.
- [Arpón *et al.* 2003] R. Arpón, J.M. Molina, R.A. Saravanan, C. García-Cordovilla, E. Louis e J. Narciso. Thermal Expansion Behaviour of Aluminium/SiC Composites with Bimodal Particle Distributions, *Acta Materialia* **51**(11):3145–3156, 2003.
- [Ashton *et al.* 1969] J.E. Ashton, J.C. Halpin e P.H. Petit. *Primer on Composite Materials: Analysis*, Technomic Publishing Co., Inc., Stamford, Connecticut, Estados Unidos da América, 1969.
- [Axelsson 1996] O. Axelsson. *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.

-
- [Bakhvalov e Panasenko 1989] N.S. Bakhvalov e G.P. Panasenko. *Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media*, Mathematics and its Applications (Soviet Series), Vol. 36, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Países Baixos, 1989.
- [Banks-Sills *et al.* 1997] L. Banks-Sills, V. Leiderman e D. Fang. On the Effect of Particle Shape and Orientation on Elastic Properties of Metal Matrix Composites, *Composites Part B — Engineering* **28B**(4):465–481, 1997.
- [Barbosa 2000] J.M.G. Barbosa. *Paralelismo em Processamento e Análise de Imagens Médicas*, Dissertação de Tese de Doutoramento em Engenharia Electrotécnica e de Computadores, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, Porto, Portugal, 2000.
- [Barnes *et al.* 1968] G.H. Barnes, R.M. Brown, M. Kato, D.J. Kuck, D.L. Slotnick e R.A. Stokes. The ILLIAC IV Computer, *IEEE Transactions on Computers* **C-17**(8):746–757, 1968.
- [Barrett *et al.* 1994] R. Barrett, M. Berry, T.F. Chan, J. Demmel, J.M. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine e H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, Filadélfia, Estados Unidos da América, 1994.
- [Basu 1987] A. Basu. Parallel Processing Systems: A Nomenclature Based on Their Characteristics, *IEE Proceedings — Computers and Digital Techniques* **134**(3):143–147, 1987.
- [Bathe 1996] K.J. Bathe. *Finite Element Procedures*, Prentice-Hall International Editions, Inc., Nova Jérsea, Estados Unidos da América, 1996.
- [Bendsøe e Kikuchi 1988] M.P. Bendsøe e N. Kikuchi. Generating Optimal Topologies in Structural Design using a Homogenization Method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **71**(2):197–224, 1988.
- [Beneš 1962] V.E. Beneš. On Rearrangeable Three-Stage Connecting Networks, *The Bell System Technical Journal* **41**(5):1481–1492, 1962.
- [Beneš 1965] V.E. Beneš. *Mathematical Theory of Connecting Networks and Telephone Traffic*, Academic Press, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1965.
- [Bensoussan *et al.* 1978] A. Bensoussan, J.-L. Lions e G. Papanicolaou. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland Publishing Co., Amesterdão, Países Baixos, 1978.
- [Benzi 2002] M. Benzi. Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey, *Journal of Computational Physics* **182**(2):418–477, 2002.
- [Berlyand 1998] L. Berlyand. Effective Properties of Superconducting and Superfluid Composites, *International Journal of Modern Physics B — Condensed Matter Physics, Statistical Physics and Applied Physics* **12**(29–31):3063–3073, 1998.
- [Bodin *et al.* 1994] F. Bodin, T. Priol, P. Mehrotra e D. Gannon. *Directions in Parallel Programming: HPF, Shared Virtual Memory and Object Parallelism in pC++*. ICASE Report n.º 94–54, ICASE-NASA, Hampton, Virgínia, Estados Unidos da América, 1994.
- [Böhm 1998] H.J. Böhm. *A Short Introduction to Basic Aspects of Continuum Micromechanics*, CDL-FMD-Report, Christian Doppler Laboratorium für Mikromechanik der Werkstoffe, Institut für Leichtbau und Flugzeugbau, Technische Universität Wien, Viena, Áustria, 1998.
- [Boley e Weiner 1997] A.B. Boley e J.H. Weiner. *Theory of Thermal Stresses*, Dover Publications, Mineola, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1997.
- [Boller e Seeger 1987] C. Boller e T. Seeger. *Materials Data for Cyclic Loading, Part D: Aluminium and Titanium Alloys*, Materials Science Monographs, Elsevier, Oxford, Reino Unido, 1987.
-

-
- [Butler e Lusk 1992] R. Butler e E. Lusk. *User's Guide to the p4 Parallel Programming System*, Technical Report TM-ANL-92/17, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, Estados Unidos da América, Outubro de 1992.
- [Bytner e Gambin 1993] S. Bytner e B. Gambin. Homogenization of Heterogeneous Magnetoelastic Medium, *Archives of Mechanics* **45**(2):223–233, 1993.
- [Caglar 2004] S.G. Caglar. *An Implementation of MPI 1.2 for Linux Clusters*. Dissertação de mestrado, Departamento de Ciência da Computação, Universidade de São Francisco, São Francisco, Califórnia, Estados Unidos da América, 2004.
- [Calkin *et al.* 1994] R. Calkin, R. Hempel, H.-C. Hoppe e P. Wypior. Portable Programming with the PARMACS Message-Passing Library, *Parallel Computing* **20**(4):615–632, 1994.
- [Campbell *et al.* 1978] L. Campbell, F. Engel Jr., T. Gibson, M. Greenfield, J. Harkins, B. Holberton, B. Martin, J. Matheny, J.C. Noll, R. Ragan, C. Sampson e B. Swain. Fortran 77, *Communications of the ACM* **21**(10):806–820, 1978.
- [Campos 2005] A.G.O.A. Campos. *Modelação e Análise Numérica do Comportamento Mecânico e Térmico de Ligas de Alumínio*, Dissertação de Tese de Doutoramento, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 2005.
- [Castillero *et al.* 1997] J.B. Castillero, R.G. Diaz, J.A.O. Hernandez e R.R. Ramos. Electromechanical Properties of Continuous Fibre-Reinforced Piezoelectric Composites, *Mechanics of Composite Materials* **33**(5):475–482, 1997.
- [Castillero *et al.* 1998] J.B. Castillero, J.A. Otero, R.R. Ramos e A. Bourgeat. Asymptotic Homogenization of Laminated Piezocomposite Materials, *International Journal of Solids and Structures* **35**(5–6):527–541, 1998.
- [Chamis 1984] C.C. Chamis. Simplified Composite Micromechanics Equations for Hygral, Thermal and Mechanical Properties, *SAMPE (Society for the Advancement of Material and Process Engineering) Quarterly* **15**(3):14–23, 1984, *apud* [Sun e Vaidya 1996].
- [Cheng 1992] C.-H. Cheng. *Modeling of the Thermal Elasto-Plastic Behavior for Composite Materials using the Homogenization Method*, Dissertação de Tese de Doutoramento, Universidade do Michigan, Estados Unidos da América, 1992.
- [Chollacoop *et al.* 2003] N. Chollacoop, M. Dao e S. Suresh, Depth-Sensing Instrumented Indentation with Dual Sharp Indenters, *Acta Materialia* **51**(13):3713–3729, 2003.
- [Chung 1999] P.W. Chung. *Computational Methods for Multi-Scale/Multi-Physics Problems in Heterogeneous/Composite Structures*, Dissertação de Tese de Doutoramento, Universidade do Minesota, Minesota, Estados Unidos da América, 1999.
- [Chung *et al.* 2001] P.W. Chung, K.K. Tamma e R.R. Namburu. Asymptotic Expansion Homogenization for Heterogenous Media: Computational Issues and Applications, *Composites Part A — Applied Science and Manufacturing* **32**(9):1291–1301, 2001.
- [Cioranescu e Donato 1999] D. Cioranescu e P. Donato. *An Introduction to Homogenization*, Oxford Lecture Series in Mathematics and Its Applications, Vol. 17, Oxford University Press, Oxford, Reino Unido, 1999.
- [Clarke 1997] J.A. Clarke. Emulating Shared Memory to Simplify Distributed-Memory Programming, *IEEE Computational Science & Engineering* **4**(1):55–62, 1997.
- [Clos 1953] C. Clos. A Study of Non-Blocking Switching Networks, *The Bell System Technical Journal* **32**(2):406–424, 1953.
-

-
- [Comte e Hifdi 1979] D. Comte e N. Hifdi. *LAU Multiprocessor: Microfunctional Description and Technologic Choice*, Actas do 1st European Conference on Parallel and Distributed Processing, Toulouse, França, pp. 8–15, Fevereiro de 1979.
- [Cook *et al.* 2002] R.D. Cook, D.S. Malkus, M.E. Plesha e R.J. Witt. *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*, 4.^a edição, John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 2002.
- [Culler *et al.* 1998] D.E. Culler, J.P. Singh e A. Gupta. *Parallel Computer Architecture: A Hardware/Software Approach*, Morgan Kaufmann Publishers, Inc., São Francisco, Califórnia, Estados Unidos da América, 1998.
- [Dal Maso 1993] G. Dal Maso. *An Introduction to Γ -Convergence*, Birkhäuser, Boston, Estados Unidos da América, 1993.
- [Dally e Seitz 1987] W.J. Dally e C.L. Seitz. Deadlock-Free Message Routing in Multiprocessor Interconnection Networks, *IEEE Transactions on Computers* **36**(5):547–553, 1987.
- [Das 1997] P.S. Das. *Evolution and Application of a Parallel Algorithm for Explicit Transient Finite Element Analysis on SIMD/MIMD Computers*, Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Departamento de Engenharia Mecânica, Florida Atlantic University, Florida, Estados Unidos da América, Maio de 1997.
- [Dasgupta 1990] S. Dasgupta. A Hierarchical Taxonomic System for Computer Architectures, *IEEE Computer* **23**(3):64–74, 1990.
- [Davies 1994] N.J. Davies. *The Performance and Scalability of Parallel Systems*, Dissertação de Tese de Doutorado em Informática, Departamento de Informática, Universidade de Bristol, Reino Unido, 1994.
- [De Giorgi e Spagnolo 1973] E. De Giorgi e S. Spagnolo. Sulla Convergenza degli Integrali dell'Energia per Operatori Ellittici del Secondo Ordine, *Bollettino della Unione Matematica Italiana* **8**(4):391–411, 1973.
- [Dimitrienko 1998a] Yu.I. Dimitrienko. Mechanics of Porous Media with Phase Transformations and Periodical Structures — 1. Method of Asymptotic Averaging, *European Journal of Mechanics, Series A — Solids* **17**(2):305–319, 1998.
- [Dimitrienko 1998b] Yu.I. Dimitrienko. Mechanics of Porous Media with Phase Transformations and Periodical Structures — 2. Solutions of Local and Global Problems, *European Journal of Mechanics, Series A — Solids* **17**(2):321–337, 1998.
- [Doghri 2000] I. Doghri. *Mechanics of Deformable Solids — Linear, Nonlinear, Analytical and Computational Aspects*, Springer-Verlag, Berlim, Alemanha, 2000.
- [Dowling 2006] N.E. Dowling. *Mechanical Behavior of Materials — Engineering Methods for Deformation, Fracture, and Fatigue*, 3.^a edição, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérсия, Estados Unidos da América, 2006.
- [Dowling *et al.* 1977] N.E. Dowling, W.R. Brose e W.K. Wilson. *Notched Member Fatigue Life Predictions by the Local Strain Approach*, Advances in Engineering, R. M. Wetzel (editor), SAE — Society of Automotive Engineers, Vol. 6, pp. 55–84, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1977.
- [Duff *et al.* 1989] I.S. Duff, A.M. Erisman e J.K. Reid. *Direct Methods for Sparse Matrices*, Oxford University Press, Londres, Reino Unido, 1989.
-

-
- [Duncan 1990] R. Duncan. A Survey of Parallel Computer Architectures, *IEEE Computer* **23**(2):5–16, 1990.
- [Elomari *et al.* 1998] S. Elomari, M.D. Skibo, A. Sundarrajan e H. Richards. Thermal Expansion Behavior of Particulate Metal-Matrix Composites, *Composites Science and Technology* **58**(3–4):369–376, 1998.
- [Engeli *et al.* 1959] M. Engeli, Th. Ginsburg, H. Rutishauser e E. Stiefel. *Refined Iterative Methods for Computation of the Solution and the Eigenvalues of Self-Adjoint Boundary Value Problems*, Mitteilungen aus dem Institute für Angewandte Mathematik, Vol. 8, Birkhäuser Verlag, Estugarda, Alemenha, 1959.
- [Evans 1968] D.J. Evans. Method for Solving Linear Equations with Symmetric Positive Definite Matrices, *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications* **4**(3):295–314, 1968.
- [Fagg *et al.* 1997] G.E. Fagg, J.J. Dongarra e A. Geist. *Heterogeneous MPI Application Interoperation and Process Management under PVMPI*. Technical Report, Computer Science Department, Universidade do Tennessee, Knoxville, Tennessee, Estados Unidos da América, Junho de 1997.
- [Fahmy e Ragai 1970] A.A. Fahmy e A.N. Ragai. Thermal-Expansion Behavior of Two-Phase Solids, *Journal of Applied Physics* **41**(13):5108–5111, 1970.
- [Farhat e Wilson 1987] C. Farhat e E. Wilson. A New Finite Element Concurrent Computer Program Architecture, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **24**(9):1771–1792, 1987.
- [Felippa 2006] C.A. Felippa. *Introduction to Finite Element Methods*, Department of Aerospace Engineering Sciences, University of Colorado at Boulder, Boulder, Colorado, Estados Unidos da América, 2006.
- [Feng 1972] T.Y. Feng. *Some Characteristics of Associative/Parallel Processing*, Actas do 1972 Sagamore Computing Conference, pp. 5–16, Agosto de 1972.
- [Flower e Kolawa 1994] J. Flower e A. Kolawa. Express is Not Just a Message Passing System: Current and Future Directions in Express, *Parallel Computing* **20**(4):597–614, 1994.
- [Flynn 1966] M.J. Flynn. Very High-Speed Computing Systems, *Proceedings of the IEEE* **54**(12):1901–1909, 1966.
- [Flynn 1972] M.J. Flynn. Some Computer Organizations and Their Effectiveness, *IEEE Transactions on Computers* **C-21**(9):948–960, 1972.
- [Flynn 1996] M.J. Flynn. Parallel Processors Were the Future... and May Yet Be, *IEEE Computer* **29**(12):151–152, 1996.
- [Fourier 1822] J. Fourier. *Théorie Analytique de la Chaleur*, Firmin Didot, Père et Fils, Paris, França, 1822.
- [Francfort 1983] G.A. Francfort. Homogenization and Linear Thermoelasticity, *SIAM Journal on Mathematical Analysis* **14**(4):696–708, 1983.
- [FreeBSD 2003] The FreeBSD Documentation Project. *FreeBSD Handbook — User Guide*, 3.^a edição, M. Stokely e C. Lee (editores), FreeBSD Mall, Inc., Califórnia, Estados Unidos da América, Vol. 1, 2003.
- [Fung e Tong 2001] Y.C. Fung e P. Tong. *Classical and Computational Solid Mechanics*, Advanced Series in Engineering Science, Vol. 1, World Scientific, Farrer Road, Singapura, 2001.
-

-
- [Galiana *et al.* 1994] F.D. Galiana, H. Javidi e S. McFee. On the Application of a Pre-Conditioned Conjugate Gradient Algorithm to Power Network Analysis, *IEEE Transactions on Power System* **9**(2):629–636, 1994.
- [Gałka *et al.* 1994] A. Gałka, J.J. Telega e R. Wojnar. Thermodiffusion in Heterogeneous Elastic Solids and Homogenization, *Archives of Mechanics* **46**(3):267–314, 1994.
- [Gałka *et al.* 1996] A. Gałka, J.J. Telega e R. Wojnar. Some Computational Aspects of Homogenization of Thermopiezoelectric Composites, *CAMES (Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences)* **3**(2):133–154, 1996.
- [Gangi 2000] A.F. Gangi. *Fourth-Order Elastic-Moduli Tensors by Inspection*, Actas do Ninth International Workshop on Seismic Anisotropy — 9IWSA — Anisotropy 2000: Fractures, Converted Waves and Case Studies, L. Ikelle e A.F. Gangi (editores), Society of Exploration Geophysicists, Tulsa, Oklahoma, Estados Unidos da América, 2000.
- [Garg *et al.* 1973] S.K. Garg, V. Svalbonas e G.A. Gurtman. *Analysis of Structural Composite Materials*, Marcel Dekker, Inc., Nova York, Estados Unidos da América, 1973, *apud* [Liu 1997].
- [Geist *et al.* 1990] G.A. Geist, M.T. Heath, B.W. Peyton e P.H. Worley. *A User's Guide to PICT: A Portable Instrumented Communication Library*, Technical Report TM-11616, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, Estados Unidos da América, Outubro de 1990.
- [Geist *et al.* 1994] A. Geist, A. Beguelin, J. Dongarra, W. Jiang, R. Mancheck e V. Sunderam. *PVM: Parallel Virtual Machine — A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing*, Scientific and Engineering Series, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1994.
- [Genevois 1992] P. Genevois. *Étude Expérimentale et Modélisation du Comportement Plastique Anisotrope de Tôles d'Acier en Grandes Transformations*, Dissertação de Tese de Doutorado, Instituto Nacional Politécnico de Grenoble, Grenoble, França, 1992.
- [Glinka 1985a] G. Glinka. Energy Density Approach to Calculation of Inelastic Strain-Stress near Notches and Cracks, *Engineering Fracture Mechanics* **22**(3):485–508, 1985.
- [Glinka 1985b] G. Glinka. Calculation of Inelastic Notch-Tip Strain-Stress Histories under Cyclic Loading, *Engineering Fracture Mechanics* **22**(5):839–854, 1985.
- [Golub e O'Leary 1989] G.H. Golub e D.P. O'Leary. Some History of the Conjugate Gradient and Lanczos Methods, *SIAM Review* **31**(1):50–102, 1989.
- [Golub e van Loan 1996] G.H. Golub e C.F. van Loan. *Matrix Computations*, 3.^a edição, John Hopkins Series in the Mathematical Sciences, Vol. 3, The John Hopkins University Press, Baltimore, Estados Unidos da América, 1996.
- [Graham 1999] P. Graham. *OpenMp: A Parallel Programming Model for Shared-Memory Architectures*, Technical Report, EPCC — Edinburgh Parallel Computing Centre, Universidade de Edimburgo, Escócia, Reino Unido, 1999.
- [Grama *et al.* 1993] A.Y. Grama, A. Gupta e V. Kumar. Isoefficiency: Measuring the Scalability of Parallel Algorithms and Architectures, *IEEE Parallel & Distributed Technology: Systems & Applications* **1**(3):12–21, 1993.
- [Greszczuk 1966] L.B. Greszczuk. *Theoretical and Experimental Studies on Properties and Behavior of Filamentary Composites*, Actas da 21st Annual Technical and Management Conference, Chicago, Illinois, Estados Unidos da América, Reinforced Plastics Division, The Society of the Plastics Industry, Inc., Vol. 2, Secção 8–A, pp. 1–10, 1966, *apud* [Liu 1997].
-

- [Gropp e Lusk 2001] W. Gropp e E. Lusk. *Installation and User's Guide for mpich, a Portable Implementation of MPI*, Technical Report ANL-01/x, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, Estados Unidos da América, 2001.
- [Gropp e Smith 1993] W. D. Gropp e B. Smith. *Chameleon Parallel Programming Tools Users Manual*, Technical Report ANL-93/23, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, Estados Unidos da América, Março 1993.
- [Gropp *et al.* 1996] W. Gropp, E. Lusk, N. Doss e A. Skjellum. A High-Performance, Portable Implementation of the MPI message Passing Interface Standard. *Parallel Computing* **22**(6):789–828, 1996.
- [Gropp *et al.* 1998] W. Gropp, S. Huss-Lederman, A. Lumsdaine, E. Lusk, B. Nitzberg, W. Saphir e M. Snir. *MPI — The Complete Reference — The MPI-2 Extensions*, Vol. 2, Scientific and Engineering Computation Series, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1998.
- [Gropp *et al.* 2003] W. Gropp, E. Lusk e T. Sterling. *Beowulf Cluster Computing with Linux*, 2.^a edição, The MIT Press series in Scientific and Engineering Computation, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 2003.
- [Grujić *et al.* 1996] A. Grujić, M. Tomašević e V. Milutinović. A Simulation Study of Hardware-Oriented DSM Approaches. *IEEE Parallel & Distributed Technology: Systems & Applications* **4**(1):74–83, 1996.
- [Guedes e Kikuchi 1990] J.M. Guedes e N. Kikuchi. Preprocessing and Postprocessing for Materials Based on the Homogenization Method with Adaptive Finite Element Methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **83**(2):143–198, 1990.
- [Gustafson 1988] J.L. Gustafson. Reevaluating Amdahl's Law. *Communications of the ACM* **31**(5):532–533, 1988.
- [Halpin e Kardos 1976] J.C. Halpin e J.L. Kardos. The Halpin-Tsai Equations: A Review, *Polymer Engineering and Science* **16**(5):344–352, 1976.
- [Händler 1977] W. Händler. *The Impact Classification Schemes on Computer Architecture*, Actas da 1977 International Conference on Parallel Processing, Institute of Electrical and Electronics Engineers, São Francisco, Califórnia, Estados Unidos da América, pp. 7–15, Agosto de 1977.
- [Hardrath e Ohman 1951] H.F. Hardrath e L. Ohman. *A Study of Elastic and Plastic Stress Concentration Factors due to Notches and Fillets in Flat Plates*, Technical Note 2566, NACA — National Advisory Committee for Aeronautics, Langley Aeronautical Laboratory, Langley Field, Virgínia, Estados Unidos da América, Dezembro de 1951.
- [Hashin 1962] Z. Hashin. The Elastic Moduli of Heterogeneous Materials, *Journal of Applied Mechanics* **29**(1):143–150, 1962.
- [Hashin e Shtrikman 1962] Z. Hashin e S. Shtrikman. On Some Variational Principles in Anisotropic and Nonhomogeneous Elasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **10**(4):335–342, 1962.
- [Hashin e Shtrikman 1963] Z. Hashin e 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.
- [Hencky 1924] H. Hencky. Zur Theorie plastischer Deformationen und der hierdurch im Material hervorgerufenen Nachspannungen, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **4**:323–334, 1924.

-
- [Hennessy e Patterson 2002] J.L. Hennessy e D.A. Patterson. *Computer Architecture: A Quantitative Approach*, 3.^a edição, Morgan Kaufmann Publishers, Inc., São Francisco, Califórnia, Estados Unidos da América, 2002.
- [Hermans 1967] J.J. Hermans. The Elastic Properties of Fiber Reinforced Materials when the Fibers are Aligned, *Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen (Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences), Series B — Physical Sciences* **70**(1):1–9, 1967.
- [Hestenes 1956] M.R. Hestenes. *The Conjugate-Gradient Method for Solving Linear Systems*, Actas do Symposia in Applied Mathematics, Vol. 6, pp. 83–102, McGraw-Hill, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1956.
- [Hestenes e Stiefel 1952] M.R. Hestenes e E.L. Stiefel. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards* **49**(6):409–436, 1952.
- [Hewitt e de Malherbe 1970] R.L. Hewitt e M.C. de Malherbe. An Approximation for the Longitudinal Shear Modulus of Continuous Fibre Composites, *Journal of Composite Materials* **4**(2):280–282, 1970.
- [Hill 1963] R. Hill. Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **11**(5):357–372, 1963.
- [Hill 1964] R. Hill. Theory of Mechanical Properties of Fiber-Strengthened Materials: I. Elastic Behaviour, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **12**(4):199–212, 1964.
- [Hillis 1985] W.D. Hillis. *The Connection Machine*, The MIT Press series in Artificial Intelligence, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1985.
- [Hinton *et al.* 1992] E. Hinton, R.D. Wood, N. Bicanic, P.S. White e T. Hellen. *NAFEMS — Introduction to Nonlinear Finite Analysis*, E. Hinton (editor), NAFEMS, East Kilbride, Reino Unido, 1992.
- [Hintz e Tate 1972] R.G. Hintz e D.P. Tate. *Control Data STAR-100 Processor Design*, Actas do Comcon 72 — IEEE Computer Society International Conference, pp. 1–4, Boston, Massachusetts, Estados Unidos da América, Setembro de 1972.
- [Hlavička 1997] J. Hlavička. *Computer Architecture*, České Vysoké Učení Technické v Praze — Czech Technical University in Prague, Universidade de Praga, Praga, República Checa, 1997.
- [Hockney 1987] R.W. Hockney. *Classification and Evaluation of Parallel Computer Systems*, Actas do 4th International DFVLR Seminar on Foundations of Engineering Sciences: Parallel Computing in Science and Engineering, Lecture Notes in Computer Science, R. Dierstein, D. Müller-Wichards e H.-M. Wacker (editores), Springer-Verlag, Vol. 295, pp. 13–25, Londres, Reino Unido, 1987.
- [Hogge 1981] M.A. Hogge. *A Comparison of Two- and Three-Level Integration Schemes for Non-Linear Heat Conduction*, Numerical Methods in Heat Transfer, R.W. Lewis, K. Morgan e O.C. Zienkiewicz (editores), John Wiley & Sons, pp. 75–90, Chichester, Reino Unido, 1981.
- [Hollister e Kikuchi 1992] S.J. Hollister e N. Kikuchi. A Comparison of Homogenization and Standard Mechanics Analyses for Periodic Porous Composites, *Computational Mechanics* **10**(2):73–95, 1992.
- [Hollister *et al.* 1991] S.J. Hollister, D.P. Fyhrie, K.J. Jepsen e S.A. Goldstein. Application of Homogenization Theory to the Study of Trabecular Bone Mechanics, *Journal of Biomechanics* **24**(9):825–839, 1991.
-

- [Hollister *et al.* 1994] S.J. Hollister, J.M. Brennan e N. Kikuchi. A Homogenization Sampling Procedure for Calculating Trabecular Bone Effective Stiffness and Tissue Level Stress, *Journal of Biomechanics* **27**(4):433–444, 1994.
- [HPF 1993] High Performance Fortran Forum. *High Performance Fortran Language Specification*, Version 1.0, Technical Report, Rice University, Houston, Texas, Estados Unidos da América, Maio de 1993.
- [Hsieh e Tuan 2005] C.L. Hsieh e W.H. Tuan. Elastic Properties of Ceramic-Metal Particulate Composites, *Materials Science and Engineering A — Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing* **393**(1–2):133–139, 2005.
- [Hsieh e Tuan 2006] C.L. Hsieh e W.H. Tuan. Elastic and Thermal Expansion Behavior of Two-Phase Composites, *Materials Science and Engineering A — Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing* **425**(1–2):349–360, 2006.
- [Hughes 1980] T.J.R. Hughes. Generalization of Selective Integration Procedures to Anisotropic and Nonlinear Media, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **15**(9):1413–1418, 1980.
- [Hughes 1987] T.J.R. Hughes. *The Finite Element Method — Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérquia, Estados Unidos da América, 1987.
- [Hughes e Taylor 1978] T.J.R. Hughes e R.L. Taylor. Unconditionally Stable Algorithms for Quasi-Static Elasto/Visco-Plastic Finite Element Analysis, *Computers & Structures* **8**(2):169–173, 1978.
- [Hull e Clyne 1996] D. Hull e T.W. Clyne. *An Introduction to Composite Materials*, 2.^a edição, Cambridge Solid State Science Series, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.
- [Hwang 1993] K. Hwang. *Advanced Computer Architecture: Parallelism, Scalability, Programmability*, McGraw-Hill, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1993.
- [Hwang e Briggs 1984] K. Hwang e F.A. Briggs. *Computer Architecture and Parallel Processing*, McGraw-Hill Book Company, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1984.
- [Ibbett e Topham 1989] R.N. Ibbett e N.P. Topham. *Architecture of High-Performance Computers*, Vol. II, Macmillan, Londres, Reino Unido, 1989.
- [Incropera e DeWitt 1990] F.P. Incropera e D.P. DeWitt. *Introduction to Heat Transfer*, 2.^a edição, John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1990.
- [Irons e Ahmad 1980] B. Irons e S. Ahmad. *Techniques of Finite Elements*, Ellis Horwood Ltd., Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1980.
- [Johnson 1988] E.E. Johnson. Completing an MIMD Multiprocessor Taxonomy, *ACM SIGARCH Computer Architecture News* **16**(3):44–47, 1988.
- [Júdice e Patrício 1996] J.J. Júdice e J.M. Patrício. *Sistemas de Equações Lineares*, Departamento de Matemática, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 1996.
- [Jung *et al.* 1999] H.K. Jung, Y.M. Cheong, H.J. Ryu e S.H. Hong. Analysis of Anisotropy in Elastic Constants of SiC_p/2124 Al Metal Matrix Composites, *Scripta Materialia* **41**(12):1261–1267, 1999.

-
- [Kalamkarov *et al.* 2006] A.L. Kalamkarov, A.V. Georgiades, S.K. Rokkam, V.P. Veedu e M.N. Ghasemi-Nejhad. Analytical and Numerical Techniques to Predict Carbon Nanotubes Properties, *International Journal of Solids and Structures* **43**(22–23):6832–6854, 2006.
- [Karypis e Kumar 1998] G. Karypis e V. Kumar. *METIS — A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices, Version 4.0*, Technical Report, Department of Computer Science/Army HPC Research Center, Universidade de Minnesota, Mineápolis, Minnesota, Estados Unidos da América, 1998.
- [Kawamoto e Kyoya 1993] T. Kawamoto e T. Kyoya. *Some Applications of Homogenization Method in Rock Mechanics*, Actas do Seminar on Impact of Computational Mechanics on Engineering Problems, V.A. Pulmano e V. Murti (editores), Sydney, Austrália, pp. 63–70, 1993.
- [Kenaga *et al.* 1987] D. Kenaga, J.F. Doyle e C.T. Sun. The Characterization of Boron/Aluminum Composite in the Nonlinear Range as an Orthotropic Elastic-Plastic Material, *Journal of Composite Materials* **21**(6):516–531, 1987, *apud* [Sun e Vaidya 1996].
- [Kermani e Kleinrock 1979] P. Kermani e L. Kleinrock. Virtual Cut-Through: A New Computer Communication Switching Technique, *Computer Networks* **3**(4):267–286, 1979.
- [Kerner 1956] E.H. Kerner. The Elastic and Thermo-Elastic Properties of Composite Media, *Proceedings of the Physical Society — Section B* **69**(8):808–813, 1956.
- [Kernighan e Ritchie 1978] B.W. Kernighan e D.M. Ritchie. *The C Programming Language*, 1.^a edição, Prentice Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérsea, Estados Unidos da América, 1978.
- [Khan e Huang 1995] A.S. Khan e S. Huang. *Continuum Theory of Plasticity*, 4.^a edição, John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1995.
- [Kim e Im 2003] S.Y. Kim e Y.T. Im. Parallel Processing of 3D Rigid-Viscoplastic Finite Element Analysis using Domain Decomposition and Modified Block Jacobi Preconditioning Technique, *Journal of Materials Processing Technology* **134**(2):254–264, 2003.
- [Kohonen 1987] T. Kohonen. *Content-Addressable Memories*, 2.^a edição, Spinger-Verlag, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1987.
- [Koishi *et al.* 1997] M. Koishi, M. Shiratori, T. Miyoshi e K. Kabe. Homogenization Method for Dynamic Viscoelastic Analysis of Composite Materials, *JSME (Japan Society of Mechanical Engineers) International Journal, Series A — Mechanics and Material Engineering* **40**(3):306–312, 1997.
- [Krieg e Krieg 1977] R.D. Krieg e D.B. Krieg. Accuracies of Numerical Solution Methods for the Elastic-Perfectly Plastic Model, *Journal of Pressure Vessel Technology* **99**(4):510–515, 1977.
- [Krishnamurthy 1990] E.V. Krishnamurthy. *Parallel Processing: Principles and Practice*, Addison-Wesley Longman Publishing Company, Inc., Boston, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1990.
- [Kuhn e Tucker 1951] H.W. Kuhn e A.W. Tucker. *Nonlinear Programming*, Actas do Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, J. Neyman (editor), University of California Press, Universidade da Califórnia, Berkeley, Califórnia, Estados Unidos da América, pp. 481–492, 1951.
- [Kumar *et al.* 1993] M. Kumar, Y. Baransky e M. Denneau. The GF11 Parallel Computer, *Parallel Computing* **19**(12):1393–1412, 1993.
-

- [Kung e Leiserson 1979] H.T. Kung e C.E. Leiserson. *Systolic arrays (for VLSI)*, Sparse Matrix Proceedings 1978, I.S. Duff e G.W. Stewart (editores), Knoxville, Tennessee, Society for Industrial and Applied Mathematics, pp. 256–282, 1979.
- [Kung *et al.* 1987] S.Y. Kung, S.C. Lo, S.N. Jean e J.N. Hwang. Wavefront Array Processors — Concept to Implementation, *IEEE Computer* **20**(7):18–33, 1987.
- [Lagache *et al.* 1994] M. Lagache, A. Agbossou, J. Pastor e D. Muller. Role of Interphase on the Elastic Behavior of Composite Materials: Theoretical and Experimental Analysis, *Journal of Composite Materials* **28**(12):1140–1157, 1994.
- [Landauer 1952] R. Landauer. The Electrical Resistance of Binary Metallic Mixtures, *Journal of Applied Physics* **23**(7):779–784, 1952.
- [Langtangen 2003] H.P. Langtangen. *Computational Partial Differential Equations: Numerical Methods and Diffpack Programming*, 2.^a edição, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 2, Springer-Verlag, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 2003.
- [Lenoski *et al.* 1992] D. Lenoski, J. Laudon, K. Gharachorloo, W.-D. Weber, A. Gupta, J. Hennessy, M. Horowitz e M.S. Lam. The Stanford DASH Multiprocessor, *IEEE Computer* **25**(3):63–79, 1992.
- [Leopold 2001] C. Leopold. *Parallel and Distributed Computing: A Survey of Models, Paradigms and Approaches*, John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 2001.
- [Lewis *et al.* 96] R.W. Lewis, K. Morgan, H.R. Thomas e K.N. Seetharamu. *The Finite Element Method in Heat Transfer Analysis*, John Wiley & Sons, Chichester, Reino Unido, 1996.
- [Lions 1981] J.-L. Lions. *Some Methods in the Mathematical Analysis of Systems and their Control*, Gordon & Breach Science Publishers, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1981.
- [Lipovski e Malek 1987] G.J. Lipovski e M. Malek. *Parallel Computing: Theory and Comparisons*, John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1987.
- [Liu 1997] G.R. Liu. A Step-by-Step Method of Rule-of-Mixture of Fiber- and Particle-Reinforced Composite Materials, *Composite Structures* **40**(3–4):313–322, 1997.
- [Manteuffel 1980] T.A. Manteuffel. An Incomplete Factorization Technique for Positive Definite Linear Systems, *Mathematics of Computation* **34**(150):473–497, 1980.
- [Martin *et al.* 1991] B.E. Martin, C.H. Pedersen e J. Bedford-Roberts. An Object-Based Taxonomy for Distributed Computing Systems, *IEEE Computer* **24**(8):17–27, Agosto de 1991.
- [Martins 1998] E.F.V. Martins. *Multiprocessador de Passagem de Mensagens*, Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia Electrotécnica, Departamento de Electrónica e Comunicações, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 1998.
- [Mattson e Henry 1998] T.G. Mattson e G. Henry. An Overview of the Intel TFLOPS Supercomputer, *Intel Technology Journal* **2**(1):1-12, 1998.
- [Maxwell 1873] J.C. Maxwell. *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, Oxford, Reino Unido, 1873.
- [Meguid e Kalamkarov 1994] S.A. Meguid e A.L. Kalamkarov. Asymptotic Homogenization of Elastic Composite Materials with a Regular Structure, *International Journal of Solids and Structures* **31**(3):303–316, 1994.

-
- [Meijerink e van der Vorst 1977] J.A. Meijerink e H.A. van der Vorst. An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix, *Mathematics of Computation* **31**(137):148–162, 1977.
- [Merlin e Schweitzer 1980a] P.M. Merlin e P.J. Schweitzer. Deadlock Avoidance in Store-and-Forward Networks — I: Store-and-Forward Deadlock, *IEEE Transactions on Communications* **28**(3):345–354, 1980.
- [Merlin e Schweitzer 1980b] P.M. Merlin e P.J. Schweitzer. Deadlock Avoidance in Store-and-Forward Networks — II: Other Deadlock Types, *IEEE Transactions on Communications* **28**(3):355–360, 1980.
- [Messina *et al.* 1998] P. Messina, D. Culler, W. Pfeiffer, W. Martin, J.T. Oden e G. Smith. Architecture, *Communications of the ACM* **41**(11):36–44, 1998.
- [Meurant 1999] G. Meurant. *Computer Solution of Large Linear Systems*, Studies in Mathematics and its Applications, Vol. 28, North Holland, Elsevier Science B.V., Amesterdão, Países Baixos, 1999.
- [Mills *et al.* 1991] J.G. Mills, L.J. Clarke e A.S. Trew. *Chimp Concepts*, Report EPCC-KTC-CHIMP-CONC, Edinburgh Parallel Computing Centre, Universidade de Edimburgo, Edimburgo, Reino Unido, Abril de 1991.
- [Molski e Glinka 1981] K. Molski e G. Glinka. A Method of Elastic-Plastic Stress and Strain Calculation at a Notch Root, *Materials Science and Engineering* **50**(1):93–100, 1981.
- [Moon *et al.* 2005] R.J. Moon, M. Tilbrook, M. Hoffman e A. Neubrand. Al-Al₂O₃ Composites with Interpenetrating Network Structures: Composite Modulus Estimation, *Journal of the American Ceramic Society* **88**(3):666–674, 2005.
- [MPIF 1994] Message Passing Interface Forum. MPI: A Message-Passing Interface Standard, *The International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing* **8**(3–4):159–416, 1994.
- [MPIF 1995] Message Passing Interface Forum. *MPI: A Message-Passing Interface Standard*, Technical Report, Universidade do Tennessee, Knoxville, Tennessee, Estados Unidos da América, Junho de 1995.
- [MPIF 1997] Message Passing Interface Forum. *MPI-2: Extensions to the Message-Passing Interface*, Technical Report, Universidade do Tennessee, Knoxville, Tennessee, Estados Unidos da América, Julho de 1997.
- [Murat e Tartar 1997] F. Murat e L. Tartar. *H-Convergence*, Topics in the Mathematical Modelling of Composite Materials, Series Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, Vol. 31, pp. 21–43, Birkhäuser, Boston, Estados Unidos da América, 1997.
- [Murdocca e Heuring 2000] M.J. Murdocca e V.P. Heuring. *Principles of Computer Architecture*, Prentice Hall, Inc., Upper Saddle River, Nova Jérсия, Estados Unidos da América, 2000.
- [Nagtegaal 1982] J.C. Nagtegaal. On the Implementation of Inelastic Constitutive Equations with Special Reference to Large Deformation Problems, *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering* **33**(1–3):469–484, 1982.
- [Nagtegaal *et al.* 1974] J.C. Nagtegaal, D.M. Parks e J.R. Rice. On Numerically Accurate Finite Element Solutions in the Fully Plastic Range, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **4**(2):153–177, 1974.
-

- [Nemat-Nasser e Hori 1993] S. Nemat-Nasser e M. Hori. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics, North-Holland Publishing Co., Amesterdão, Países Baixos, 1993.
- [Neuber 1961] H. Neuber. Theory of Stress Concentration for Shear-Strained Prismatic Bodies With Arbitrary Nonlinear Stress-Strain Law, *Journal of Applied Mechanics* **28**(4):544–550, 1961.
- [Nguetseng 1989] G. Nguetseng. A General Convergence Result for a Functional Related to the Theory of Homogenization, *SIAM Journal of Mathematical Analysis* **20**(3):608–629, 1989.
- [Okoli e Smith 2000] O.I. Okoli e G.F. Smith. The Effect of Strain Rate and Fibre Content on the Poisson’s Ratio of Glass/Epoxy Composites, *Composite Structures* **48**(1–3):157–161, 2000.
- [Oleřnik *et al.* 1992] O.A. Oleřnik, A.S. Shamaev e G.A. Yosifian. *Mathematical Problems in Elasticity and Homogenization*, Studies in Mathematics and its Applications, Vol. 26, North-Holland Publishing Co., Amesterdão, Países Baixos, 1992.
- [Oliveira 2006] J.A.D. Oliveira. *Modelaęão Micromecânica do Comportamento de Materiais Compostos de Matriz de Alumřnio*, Dissertaęão de Mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 2006.
- [Oliveira *et al.* 2004] J.A. Oliveira, J. Pinho-da-Cruz, A. Andrade-Campos e F. Teixeira-Dias. *On the Modelling of Representative Unit-Cell Geometries with GiD*, Actas da 2nd Conference on Advances and Applications of GiD — GiD 2004, Monografia CIMNE n.º 88, pp. 181–184, 18 a 20 de Fevereiro, UPC — Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Espanha, 2004.
- [Olovsson *et al.* 2006] L. Olovsson, K. Simonsson e M. Unosson. Shear Locking Reduction in Eight-Noded Tri-Linear Solid Finite Elements, *Computers & Structures* **84**(7):476–484, 2006.
- [Oñate 1995] E. Oñate. *Cálculo de Estructuras por el Método de Elementos Finitos — Análisis Estático Lineal*, 2.^a edição, CIMNE — Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería, Barcelona, Espanha, 1995.
- [Ortega 1988] J.M. Ortega. *Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems*, Frontiers of Computer Science, Plenum Publishing Co., Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1988.
- [Ortiz e Popov 1985] M. Ortiz e E.P. Popov. Accuracy and Stability of Integration Algorithms for Elastoplastic Constitutive Relations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **21**(9):1561–1576, 1985.
- [Paige e Saunders 1975] C.C. Paige e M.A. Saunders. Solution of Sparse Indefinite Systems of Linear Equations, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **12**(4):617–629, 1975.
- [Pastor 1997] J. Pastor. Homogenization of Linear Piezoelectric Media, *Mechanics Research Communications* **24**(2):145–150, 1997.
- [Pilkey 1997] W.D. Pilkey. *Peterson’s Stress Concentration Factors*, 2.^a edição, Wiley-Interscience, John Wiley & Sons, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1997.
- [Pinho-da-Cruz *et al.* 2000] J.A.M. Pinho da Cruz, J.D.M. Costa, L.F.P. Borrego, J.A.M. Ferreira. Fatigue Life Prediction in AlMgSi1 Lap Joint Weldments, *International Journal of Fatigue* **22**(7): 601–610, 2000.

-
- [Pinho-da-Cruz *et al.* 2005] J. Pinho-da-Cruz, J. Oliveira, A. Andrade-Campos e F. Teixeira-Dias, *Cálculo Estrutural Elástico de Materiais Compósitos de AlSiC_p Recorrendo a Técnicas de Paralelização e Homogeneização Assimptótica*, Actas do Congresso de Métodos Numéricos em Ingeniería 2005, Granada, Espanha, 2005.
- [Poisson 1824] S.D. Poisson. *Second Mémoire sur la Théorie du Magnétisme*, Académie Royale des Sciences de l'Institut de France **5**:488–533, 1824.
- [Polák 1983] J. Polák. Stress and Strain Concentration Factor Evaluation using the Equivalent Energy Concept, *Materials Science and Engineering* **61**(3):195–200, 1983.
- [Pool *et al.* 1992] E.L. Pool, N.R. Knight e D.D. Davis. High-Performance Equation Solvers and their Impact on Finite Element Analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **33**(4):855–868, 1992.
- [Protić *et al.* 1996] J. Protić, M. Tomašević e V. Milutinović. Distributed Shared Memory: Concepts and Systems, *IEEE Parallel & Distributed Technology: Systems & Applications*, pp. 63–79, 1996.
- [Quénot *et al.* 1993] G. Quénot, C. Coutelle, J. Serot e B. Zavidovique. *A Wavefront Array Processor for on the Fly Processing of Digital Video Streams*, Actas da International Conference on Application-Specific Array Processors, IEEE Conference Proceedings, pp. 101–108, 1993.
- [Ramberg e Osgood 1943] W. Ramberg e W.R. Osgood. *Description of Stress-Strain Curves by Three Parameters*, Technical Note 902, NACA — National Advisory Committee for Aeronautics, Washington D.C., Estados Unidos da América, Julho de 1943.
- [Ravichandran 1994] K.S. Ravichandran. Elastic Properties of Two-Phase Composites, *Journal of the American Ceramic Society* **77**(5):1178–1184, 1994, *apud* [Hsieh e Tuan 2006].
- [Rayleigh 1892] J.W. Rayleigh. On the Influence of Obstacles Arranged in Rectangular Order upon the Properties of a Medium, *Philosophical Magazine* **34**(5):481–502, 1892.
- [Reid 1971] J.K. Reid. *On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations*, Actas da Oxford Conference of the Institute of Mathematics and Its Applications: Large Sparse Sets of Linear Equations, J.K. Reid (editor), Academic Press, pp. 231–254, Londres, Reino Unido, 1971.
- [Reuss 1929] A. Reuss. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **9**:49–58, 1929.
- [Rizzo 1991] A.R. Rizzo. Estimating Errors in FE Analyses, *Mechanical Engineering — CIME — Computers in Mechanical Engineering* **113**(5):61–63, 1991.
- [Robert 1982] Y. Robert. Regular Incomplete Factorizations of Real Positive Definite Matrices, *Linear Algebra Its Applications* **48**:105–117, 1982.
- [Rudolph 1972] J.A. Rudolph. *A Production Implementation of an Associative Array Processor — STARAN*, Actas da 1972 AFIPS Fall Joint Computer Conference, Vol. 41, pp. 229–241, AFIPS Press, Montvale, Nova Jérсия, Estados Unidos da América, Dezembro de 1972.
- [Russel 1978] R.M. Russell. The CRAY-1 Computer System, *Communications of the ACM* **21**(1):63–72, 1978.
- [Saad 2003] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2.^a edição, SIAM, Filadélfia, Estados Unidos da América, 2003.
-

- [Saad e Schultz 1986] Y. Saad e M.H. Schultz. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* **7**(3):856–869, 1986.
- [Saad e van der Vorst 2000] Y. Saad e H.A. van der Vorst. Iterative Solution of Linear Systems in the 20-th Century, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **123**(1–2):1–33, 2000.
- [Saint-Georges *et al.* 1996] P. Saint-Georges, G. Warzee, R. Beauwens e Y. Notay. High-Performance PCG Solvers for FEM Structural Analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **39**(8):1313–1340, 1996.
- [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992] J. Sanchez-Hubert e E. Sanchez-Palencia. *Introduction aux Méthodes Asymptotiques et à L’Homogénéisation — Application à la Mécanique des Milieux Continus*, Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise, Masson, Paris, França, 1992.
- [Sanchez-Palencia 1970] E. Sanchez-Palencia. Solutions Périodiques par Rapport aux Variables d’Espace et Applications, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences — Série A–B* **271**:A1129–A1132, 1970.
- [Sanchez-Palencia 1980] E. Sanchez-Palencia. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, Lectures Notes in Physics, Vol. 127, Springer-Verlag, Berlim, Alemanha, 1980.
- [Schwarz 1870] H.A. Schwarz. Ueber einen Grenzübergang durch alternirendes Verfahren, *Vierteljahresschrift der Naturforschenden Gesellschaft in Zürich* **15**:272–286, 1870.
- [Seeger e Heuler 1980] T. Seeger e P. Heuler. Generalised Application of Neuber’s Rule, *Journal of Testing and Evaluation* **8**(4):199–204, 1980.
- [Seeger *et al.* 1977] T. Seeger, A. Beste e A. Amstutz. *Elastic-Plastic Stress Strain Behaviour of Monotonic and Cyclic Loaded Notched Plates*, Actas da ICF4 — 4th Internatinal Conference on Fracture — Fracture 1977, D.M.R. Taplin (editor), University of Waterloo Press, Waterloo, Ontário, Canadá, Vol. 2, pp. 943-952, 1977.
- [Segurado e Llorca 2002] J. Segurado e J. Llorca. A Numerical Approximation to the Elastic Properties of Sphere-Reinforced Composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **50**(10):2107–2121, 2002.
- [Shan e Chou 1995] H.-Z. Shan e T.-W. Chou. Transverse Elastic Moduli of Unidirectional Fiber Composites with Fiber/Matrix Interfacial Debonding, *Composites Science and Technology* **53**(4):383–391, 1995.
- [Shapery 1968] R.A. Shapery. Thermal Expansion Coefficients of Composite Materials based on Energy Principles, *Journal of Composite Materials* **2**(3):380–404, 1968.
- [Shaw 1982] D.E. Shaw. *The NON-VON Supercomputer*, Technical Report, Department of Computer Science, Columbia University, Nova Iorque, Estados Unidos da América, Agosto de 1982.
- [Shen *et al.* 1994] Y.-L. Shen, A. Needleman e S. Suresh. Coefficients of Thermal Expansion of Metal-Matrix Composites for Electronic Packaging, *Metallurgical and Materials Transactions A — Physical Metallurgy and Materials Science* **25**(4):839–850, 1994.
- [Shewchuk 1994] J.R. Shewchuk. *An Introduction to the Conjugate Gradient Method without the Agonizing Pain*, School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgo, Estados Unidos da América, 1994.
- [Shore 1973] J.E. Shore. Second Thoughts on Parallel Processing, *Computers & Electrical Engineering* **1**(1):95–109, 1973.

-
- [Siegel e Stunkel 1996] H.J. Siegel e C.B. Stunkel. Inside Parallel Computers: Trends in Interconnection Networks, *IEEE Computational Science and Engineering* **3**(3):69–71, 1996.
- [Siegel *et al.* 1984] H.J. Siegel, T. Schwederski, N.J. Davis IV e J.T. Kuehn. PASM: A Reconfigurable Parallel System for Image Processing, *ACM SIGARCH Computer Architecture News* **12**(4):7–19, 1984.
- [Silva e Buyya 1999] L.M. Silva e R. Buyya. *Parallel Programming Models and Paradigms*, High Performance Cluster Computing: Programming and Applications, R. Buyya (editor), Vol. 2, pp. 4–27, Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, Nova Jérsea, Estados Unidos da América, 1999.
- [Silzars *et al.* 1992] A. Silzars, S. Keck, K. Aghajavian e E. Gramegna. *Ceramic Reinforced Materials: A New Tool for Electronic Designers to Meet the Improved Thermal and Mechanical Properties Required in High Performance Electronic Systems*, Actas do 12th International Electronic Manufacturing Technology Symposium, IEEE/ISHM, Mainz, Alemanha, pp. 221–228, Abril de 1992.
- [Sima *et al.* 1997] D. Sima, T. Fountain e P. Kacsuk. *Advanced Computer Architectures: A Design Space Approach*, Addison-Wesley Longman Publishing Company, Inc., Harlow, Reino Unido, Julho de 1997.
- [Simo e Hughes 1998] J.C. Simo e T.J.R. Hughes. *Computational Inelasticity*, Interdisciplinary Applied Mathematics — Mechanics and Materials, Vol. 7, Springer-Verlag, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1998.
- [Simo e Taylor 1985] J.C. Simo e R.L. Taylor. Consistent Tangent Operators for Rate-Independent Elastoplasticity, *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering* **48**(1):101–118, 1985.
- [Skillicorn 1988] D.B. Skillicorn. A Taxonomy for Computer Architectures, *IEEE Computer* **21**(11):46–57, Novembro de 1988.
- [Skjellum e Leung 1990] A. Skjellum e A.P. Leung. *Zipcode: A Portable Multicomputer Communication Library Atop the Reactive Kernel*, Actas da Fifth Distributed Memory Computing Conference, IEEE Computer Society Press, Charleston, Carolina do Sul, Estados Unidos da América, Vol. II — Architectures, Software Tools and Other General Issues, pp. 767–776, Abril de 1990.
- [Skjellum *et al.* 1994] A. Skjellum, S.G. Smith, N.E. Doss, A.P. Leung e M. Morari. The Design and Evolution of Zipcode, *Parallel Computing* **20**(4):565–596, 1994.
- [Smith *et al.* 1996] B.F. Smith, P.E. Bjørstad e W.D. Gropp. *Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.
- [Snir *et al.* 1998] M. Snir, S. Otto, S. Huss-Lederman, D. Walker e J. Dongarra. *MPI — The Complete Reference — The MPI Core*, Vol. 1, 2.^a edição, Scientific and Engineering Computation Series, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1998.
- [Snyder 1988] L. Snyder. *A Taxonomy of Synchronous Parallel Machines*, Actas da International Conference on Parallel Processing — ICCP '88, Vol. 1: Architecture, The Pennsylvania State University, Pensilvânia, Estados Unidos da América, pp. 281–285, Agosto de 1988.
- [Snyder e Wilkerson 1987] H.H. Snyder e R.W. Wilkerson. *A Symbolic Computation Method of Analytic Solution of the Mixed Dirichlet-Neumann-Robin Problem for Laplace's Equation*, Actas da 15th ACM Annual Conference on Computer Science, St. Louis, Missouri, Estados Unidos da América, pp. 108–113, 1987.
-

- [Song e Youn 2006] Y.S. Song e J.R. Youn. Modeling of Effective Elastic Properties for Polymer Based Carbon Nanotube Composites, *Polymer* **47**(5):1741–1748, 2006.
- [Spanolo 1968] S. Spagnolo. Sulla Convergenza di Soluzioni di Equazioni Paraboliche ed Ellittiche, *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa* **22**(3):571–597, 1968.
- [Stathis 2004] P.T. Stathis. *Sparse Matrix Vector Processing Formats*, Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia de Computadores, Universidade Técnica de Delft, Delft, Países Baixos, 2004.
- [Sterling *et al.* 1995] T. Sterling, D.J. Becker, D. Savarese, J.E. Dorband, U.A. Ranawake e C.V. Packer. *Beowulf: A Parallel Workstation for Scientific Computation*, Actas da 1995 International Conference on Parallel Processing — ICPP, Vol. 1 — Architecture, P. Banerjee (editor), Urbana-Champaign, Illinois, Estados Unidos da América, pp. 11–14, 1995.
- [Sterling *et al.* 1999] T.L. Sterling, J. Salmon, D.J. Becker e D.F. Savarese. *How to Build a Beowulf: A Guide to the Implementation and Application of PC Clusters*, The MIT Press series in Scientific and Engineering Computation, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1999.
- [Stone 1993] H.S. Stone. *High-Performance Computer Architecture*, 3.^a edição, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusetts, Estados Unidos da América, 1993.
- [Stoughton 2002] T.B. Stoughton. A Non-Associated Flow Rule for Sheet Metal Forming, *International Journal of Plasticity* **18**(5):687–714, 2002.
- [Stowell 1950] E.Z. Stowell. *Stress and Strain Concentration at a Circular Hole in an Infinite Plate*, Technical Note 2073, NACA — National Advisory Committee for Aeronautics, Langley Aeronautical Laboratory, Langley Field, Virgínia, Estados Unidos da América, Abril de 1950.
- [Stroustrup 1984] B. Stroustrup. *The C++ Reference Manual*, Computer Science Technical Report n.º 108, AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, Nova Jérсия, Estados Unidos da América, 1984.
- [Sun e Chen 1991] C.T. Sun e J.L. Chen. A Micromechanical Model for Plastic Behavior of Fibrous Composites, *Composites Science and Technology* **40**(2):115–129, 1991, *apud* [Sun e Vaidya 1996].
- [Sun e Inal 1996] Q. Sun e O.T. Inal. Fabrication and Characterization of Diamond/Copper Composites for Thermal Management Substrate Applications, *Materials Science and Engineering B — Solid-State Materials for Advanced Technology* **41**(2):261–266, 1996.
- [Sun e Vaidya 1996] C.T. Sun e R.S. Vaidya. Prediction of Composite Properties from a Representative Volume Element, *Composites Science and Technology* **56**(2):171–179, 1996.
- [Sunderam 1990] V.S. Sunderam. PVM: A Framework for Parallel Distributed Computing, *Concurrency: Practice and Experience* **2**(4):315–339, 1990.
- [Suquet 1987] P.M. Suquet. *Elements of Homogenization Theory for Inelastic Solid Mechanics*, Homogenization Techniques for Composite Media, Lectures Notes in Physics, Vol. 272, E. Sanchez-Palencia e A. Zaoui (editores), Springer-Verlag, Berlim, Alemanha, pp. 193–278, 1987.
- [Tabak 1990] D. Tabak. *Multiprocessors*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérсия, Estados Unidos da América, 1990.
- [Tanenbaum 2003] A.S. Tanenbaum. *Computer Networks*, 4.^a edição, Prentice Hall PTR, Indiana, Estados Unidos da América, 2003.

-
- [Tartar 1978] L. Tartar. *Quelques Remarques sur l'Homogénéisation*, Functional Analysis and Numerical Analysis, Actas do Japan-France Seminar 1976, Japan Society for the Promotion of Science, pp. 469–482, 1978.
- [Teixeira-Dias 1999] F. Teixeira-Dias. *Tensões Residuais de Origem Térmica em Materiais Compósitos de Matriz Metálica — Modelações Matemática e Estudos Numéricos*, Dissertação de Tese de Doutoramento, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 1999.
- [Teixeira-Dias e Menezes 2001a] F. Teixeira-Dias e L.F. Menezes. Numerical Aspects of Finite Element Simulations of Residual Stresses in Metal Matrix Composites, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **50**(3):629–644, 2001.
- [Terada 1996] K. Terada. *Global-Local Modeling for Composites by the Homogenization Method*, Dissertação de Tese de Doutoramento, Universidade do Michigan, Estados Unidos da América, 1996.
- [Terada *et al.* 1998] K. Terada, T. Ito e N. Kikuchi. Characterization of the Mechanical Behaviors of Solid-Fluid Mixture by the Homogenization Method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **153**(3–4):223–257, 1998.
- [Tessier-Doyen 2003] N. Tessier-Doyen. *Étude Expérimentale et Numérique du Comportement Thermomécanique de Matériaux Réfractaires Modèles*, Dissertação de Tese de Doutoramento, École Doctorale Science-Technologie-Santé, Universidade de Limoges, Limoges, França, 2003.
- [Thurber e Wald 1975] J.K. Thurber e L.D. Wald. Associative and Parallel Processors, *ACM Computing Surveys* **7**(4):215–255, 1975.
- [Torvalds e Diamond 2001] L. Torvalds e D. Diamond. *Just for Fun — The Story of an Accidental Revolutionary*, HarperCollins Publishers, Inc., Nova Iorque, Estados Unidos da América, 2001.
- [Trautwein 2005] F.T. Trautwein. *Numerical Validation and Application of the Neuber-Formula in FEA-Analysis*, Actas do 10th International NAFEMS World Congress — Engineering Simulation: Best Practices and Visions of the Future, St. Julians, Malta, Maio de 2005.
- [Treleaven e Mole 1980] P.C. Treleaven e G.F. Mole. *A Multi-Processor Reduction Machine for User-Defined Reduction Languages*, Actas do 7th Annual International Symposium on Computer Architecture, pp. 121–130, La Baule, França, Maio de 1980.
- [Treleaven *et al.* 1982] P.C. Treleaven, D.R. Brownbridge e R.P. Hopkins. Data-Driven and Demand-Driven Computer Architecture, *ACM Computing Surveys* **14**(1):93–143, 1982.
- [Tsai 1964] S.W. Tsai. *Structural Behavior of Composite Materials*, National Aeronautics and Space Administration Contractor Report — NASA-CR-71, NASA Center for AeroSpace Information — CASI, Washington D.C. (District of Columbia), Estados Unidos da América, 1964.
- [Tsai e Hahn 1980] S.W. Tsai e H.T. Hahn. *Introduction to Composite Materials*, Technomic Publishing Co., Inc., Lancaster, Pensilvânia, Estados Unidos da América, 1980, *apud* [Shan e Chou 1995].
- [Turing 1948] A.M. Turing. Rounding-Off Errors in Matrix Processes, *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* **1**(1):287–308, 1948.
- [van der Sluis 1969] A. van der Sluis. Condition Numbers and Equilibration of Matrices, *Numerische Mathematik* **14**(1):14–23, 1969.
-

-
- [van der Vorst 1992] H.A. van der Vorst. Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* **13**(2):631–644, 1992.
- [van der Vorst 2003] H.A. van der Vorst. *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Vol. 13, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2003.
- [Varga *et al.* 1980] R.S. Varga, E.B. Saff e V. Mehrmann. Incomplete Factorizations of Matrices and Connections with H-Matrices, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **17**(6):787–793, 1980.
- [Vasconcelos 1998] P.J.A.B. Vasconcelos. *Paralelização de Algoritmos de Álgebra Linear Numérica com Aplicação a Mecânica de Fluidos Computacional*, Dissertação de Tese de Doutorado em Ciências da Engenharia, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, Porto, Portugal, 1998.
- [Voigt 1889] W. Voigt. Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper, *Annalen der Physik und Chemie (Leipzig)* **38**:573–587, 1889.
- [von Mises 1913] R. von Mises. Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand, *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen — Mathematisch-Physikalische Klasse*, **1913**(4):582–592, 1913.
- [Waksman 1968] A. Waksman. A Permutation Network, *Journal of the ACM* **15**(1):159–163, 1968.
- [Ware 1972] W.H. Ware. The Ultimate Computer, *IEEE Spectrum* **9**(3):84–91, 1972.
- [Watson 1972] W.J. Watson. *The TI ASC, A Highly Modular and Flexible Super Computer Architecture*, Actas da 1972 AFIPS Fall Joint Computer Conference, Vol. 41, pp. 221–228, AFIPS Press, Montvale, Nova Jérσία, Estados Unidos da América, Dezembro de 1972.
- [Watson e Gurd 1982] I. Watson e J.R. Gurd. A Practical Data Flow Computer, *IEEE Computer* **15**(2):51–57, 1982.
- [Whitney e Riley 1966] J.M. Whitney e M.B. Riley. Elastic Properties of Fiber Reinforced Composite Materials, *AIAA (American Institute of Aeronautics and Astronautics) Journal* **4**(9):1537–1542, 1966, *apud* [Sun e Vaidya 1996, Liu 1997].
- [Wilkins 1964] M.L. Wilkins. *Calculation of Elastic-Plastic Flow*, Methods of Computational Physics, Vol. 3, B. Alder, S. Fernback e M. Rotenberg (editores), Academic Press, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1964.
- [Xia *et al.* 2003] Z. Xia, Y. Zhang e F. Ellyin. A Unified Periodical Boundary Conditions for Representative Volume Elements of Composites and Applications, *International Journal of Solids and Structures* **40**(8):1907–1921, 2003.
- [Yau e Fung 1977] S.S. Yau e H.S. Fung. Associative Processor Architecture — A Survey, *ACM Computing Surveys* **9**(1):3–27, 1977.
- [Yi *et al.* 1998] Y.-M. Yi, S.-H. Park e S.-K. Youn. Asymptotic Homogenization of Viscoelastic Composites with Periodic Microstructures, *International Journal of Solids and Structures* **35**(17):2039–2055, 1998.
- [Yoshida e Morigami 2004] K. Yoshida e H. Morigami. Thermal Properties of Diamond/Copper Composite Material, *Microelectronics Reliability* **44**(2):303–308, 2004.
- [Young 1971] D.M. Young. *Iterative Solution of Large Linear Systems*, Academic Press, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1971.
-

- [Young 1989] W.C. Young. *Roark's Formulas for Stress & Strain*, 6.^a edição, McGraw-Hill, Nova Iorque, Estados Unidos da América, 1989.
- [Zienkiewicz 1981] O.C. Zienkiewicz. *Finite Element Methods in Thermal Problems*, Numerical Methods in Heat Transfer, R.W. Lewis, K. Morgan e O.C. Zienkiewicz (editores), John Wiley & Sons, pp. 1–25, Chichester, Reino Unido, 1981.
- [Zienkiewicz e Taylor 1997] O.C. Zienkiewicz e R.L. Taylor. *The Finite Element Method — Basic Formulation and Linear Problems*, 4.^a edição, McGraw-Hill, Berkshire, Reino Unido, Vol. 1, 1997.
- [Zienkiewicz e Taylor 1998] O.C. Zienkiewicz e R.L. Taylor. *The Finite Element Method — Solid and Fluid Mechanics Dynamics and Non-Linearity*, 4.^a edição, McGraw-Hill, Berkshire, Reino Unido, Vol. 2, 1998.
- [Zimmerman 1992] R.W. Zimmerman. Hashin-Shtrikman Bounds on the Poisson Ratio of a Composite Material, *Mechanics Research Communications* **19**(6):563–569, 1992.