

Editado por

Eliana X.L. de Andrade

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

Rubens Sampaio

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro -

Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Geraldo N. Silva

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.7)**, as figuras em eps e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página
<http://www.sbmac.org.br/notas.php>



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

2012

MODELAGEM MULTIESCALA EM MATERIAIS E ESTRUTURAS

Fernando Rochinha - UFRJ
faro@serv.com.ufrj.br

Alexandre L. Madureira - LNCC
alm@lncc.br



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil
2012

Coordenação Editorial: Véra Lucia da Rocha Lopes

Coordenação Editorial da Série: Geraldo Nunes Silva

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2012 by Fernando Rochinha e Alexandre Madureira. Direitos reservados, 2012 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP
Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner

Rochinha, Fernando.

Modelagem Multiescala em Materiais e Estruturas
- São Carlos, SP : SBMAC, 2012, 53 p., 20.5 cm
- (Notas em Matemática Aplicada; v. 12)

e-ISBN 978-85-86883-79-8

1. Multiescala. 2. Materiais Avançados. 3. Elementos Finitos.
4. Homogeneização. 5. Modelos Matemáticos.
I. Rochinha, Fernando. II. Madureira, Alexandre.
III. Título. IV. Série

CDD - 51

Esta é uma republicação em formato de e-book do livro original do mesmo título publicado em 2004 nesta mesma série pela SBMAC.

Prefácio

Este texto foi preparado objetivando dar suporte ao Minicurso "Modelagem Multiescala em Materiais e Estruturas", apresentado pelos autores durante o XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) em Porto Alegre - RS em 2004.

O Minicurso faz parte de um esforço em que os autores estão envolvidos com o intuito de consolidar a área de modelagem multiescala, com particular ênfase na área de materiais avançados, no Brasil. Tal esforço tem se alicerçado na organização de eventos que congreguem especialistas e interessados. Este foi o caso de uma sessão temática no ERMAC de 2004 no Rio de Janeiro e de três eventos (<http://www.ce.uiuc.edu/paulino/workshop2004>) conjuntos com pesquisadores americanos nos últimos três anos com grande apoio da National Science Foundation (NSF).

O texto não tem a pretensão de esgotar o assunto mas tem como objetivo central despertar o interesse na área. Desta forma os autores colocam-se à disposição para serem contatados, seja para ouvir críticas que visem o aperfeiçoamento deste trabalho como para expor com mais profundidade suas experiências e visões sobre o tema.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à Diretoria da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional (SBMAC) e à Comissão Organizadora do XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) pela oportunidade de apresentar o presente minicurso com o qual esperam ajudar a despertar, com particular ênfase nos jovens pesquisadores, o interesse pela área de modelagem multiescala.

Conteúdo

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 2 | Introdução à Mecânica dos Corpos Deformáveis | 6 |
| 2.1 | Tensões e Equilíbrio | 7 |
| 2.2 | Deformações | 11 |
| 2.3 | Comportamento Material | 13 |
| 2.3.1 | Comportamento Elástico dos Materiais | 13 |
| 3 | Modelagem Multiescala : Homogeneização e Médias | 15 |
| 3.1 | Micromecânica e Homogeneização | 16 |
| 4 | Homogeneização de equações elíticas em uma dimensão | 21 |
| 4.1 | Um modelo | 21 |
| 4.2 | Solução homogeneizada | 24 |
| 4.3 | Aproximação por Elementos Finitos | 28 |
| 4.3.1 | Discretização por Elementos Finitos | 28 |
| 4.3.2 | O que dá errado? | 30 |
| 4.4 | Elementos Finitos Multiescala | 36 |
| 4.4.1 | Análise de erro | 39 |
| 4.4.2 | Outros Comentários | 44 |
| 4.5 | Uma dificuldade extra | 44 |
| 4.6 | Observações Finais | 46 |
| | Bibliografia | 50 |

Capítulo 1

Introdução

Nas últimas décadas as indústrias mecânica, aeronáutica, aeroespacial, naval, nuclear e até mesmo a construção civil, além de exporem os materiais convencionais a condições de trabalho cada vez mais rigorosas, iniciaram a fabricação de componentes empregando novos materiais, onde incluem-se polímeros, cerâmicas, e compostos em geral. Estas questões levam à necessidade do estabelecimento de modelos matemáticos para os materiais capazes de representar o seu comportamento quando submetidos a todo tipo de solicitações, tais como: cargas permanentes, cargas dinâmicas, cargas cíclicas, solicitações térmicas, e suficientemente gerais para incluir efeitos de fluência, envelhecimento, endurecimento/amolecimento por deformação e/ou tempo, e deterioração do comportamento devido a fenômenos de dano provocados por micro-fissuração e outros. Por outro lado, o desenvolvimento de novos materiais e de novas tecnologias em componentes mecânicos e em estruturas têm sido responsáveis por inúmeros avanços e melhoria de desempenho em vários sistemas de engenharia. Um exemplo significativo disto são os assim chamados MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) que têm permitido através da conjugação de técnicas de fabricação de micro-circuitos integrados em eletrônica e de micro-usinagem com funcionalidades estruturais atingir objetivos como monitoração e manipulação de objetos de escala muito reduzida. Outros exemplos são facilmente encontrados em estruturas inteligentes, proteção térmica utilizando materiais funcionais e robótica. Em todas essas situações, um aspecto marcante é a combinação de características específicas dos materiais que constituem os componentes mecânicos e a funcionalidade desejada. Esse tipo de integração que envolve o conhecimento e desenvolvimento de materiais, muito freqüentemente no nível da micro-estrutura, com técnicas de análise e projeto, quase sempre praticadas na macro-escala, requer um grande esforço em termos de pesquisa científica e desenvolvimento tecnológico. É fato que muito já se tem feito nesse terreno, o que gerou novos segmentos do conhecimento como a Nanomecânica.

Quando se pensa em materiais avançados e nas condições rigorosas de serviço a que estão submetidos, a elaboração dos modelos computacionais é fundamental para que seja possível projetar e fabricar qualquer tipo de componente dentro de

padrões de qualidade, segurança, durabilidade e confiabilidade existentes. Aqui, é importante ressaltar que o simples conhecimento físico-químico-metalúrgico das características termomecânicas de cada constituinte não é suficiente para a predição do comportamento global do componente ou de uma estrutura. O rápido crescimento de novos materiais bem como a necessidade de um entendimento mais profundo do comportamento dos materiais básicos têm posto em evidência a importância dos mecanismos micro-estruturais do material. Nos últimos 25 ou 30 anos a mecânica computacional tem se tornado um componente que desempenha um papel fundamental na área da ciência dos materiais ([16] e [4]). Estudos baseados em modelos computacionais envolvendo inelasticidade em materiais policristalinos, instabilidade material e mecânica da fratura tornaram-se exemplos da importância da articulação entre as duas áreas.

Apesar do sucesso obtido até o presente momento, restam, ainda, grandes desafios a serem vencidos. Uma das questões centrais reside na presença de diferentes escalas nos modelos. Estas estão associadas, por exemplo, aos efeitos no nível das estruturas atômicas bem como a fraturas detectáveis por inspeção a olho nu. Tal diversidade engendra obstáculos que vão desde o mau condicionamento dos problemas matemáticos resultantes até a necessidade de articulação de grupos envolvendo especialistas de diferentes disciplinas. Adota-se usualmente o agrupamento de tais escalas em três segmentos: micro-escala, meso-escala e macro-escala. A perspectiva associada à descrição da danificação de um material é adotada com o intuito de se buscar uma melhor compreensão desta divisão. Genericamente falando, um processo de danificação refere-se a degradação ou ruptura de materiais. Ele pode ter várias origens como oxidação, corrosão e acidentes entre outros. Nesse contexto, a micro-escala está associada a vazios atômicos ou discordâncias correspondendo a dimensões tipicamente expressas em nanômetros, enquanto fraturas de fácil detecção são consideradas efeitos de macro-escala.

Em grande parte dos aqui chamados materiais avançados, o nível micro é caracterizado por uma grande heterogeneidade. A meso-escala constitui um elo de ligação entre as outras duas, através do qual torna-se possível a utilização da mecânica do contínuo ([7]) sendo que os efeitos localizados são levados em conta através de alguma forma de média, como o que acontece em processos de homogeneização [15] a partir de uma ótica micro-estrutural. Por vezes, uma filosofia diferente é adotada na qual um modelo fenomenológico permite a inclusão dos eventos microscópicos. Ele utiliza para esse propósito as assim denominadas variáveis internas. Este tipo de abordagem é usualmente chamado de mecânica do dano contínuo, no qual o material é tratado como homogêneo e o papel das heterogeneidades é contemplado através dessas novas variáveis. A conexão com o mundo da micro-escala é dada a partir de um elemento de volume representativo, no qual através de efeitos médios as realizações discretas do dano são incorporadas. Em algumas situações são adotadas formulações que estabelecem equações acopladas com variáveis nas duas escalas, ou mesmo nas três [24]. Normalmente estas utilizam o método dos elementos finitos e requerem a utilização de estratégias numéricas da computação de alto desempenho.

Ao longo de sua vida útil, as estruturas, ou componentes mecânicos, podem falhar por diferentes processos de dano. Nas estruturas constituídas de laminados

compostos, os principais mecanismos de falhas são oriundos de trincas na matriz, descolamento entre a fibra e a matriz, fratura das fibras e delaminação. Todos estes defeitos causam perda de integridade do laminado, resultando em perda de rigidez e resistência. Assim, para determinar a capacidade de carga e a vida útil de uma estrutura composta é fundamental que se estude o início e a evolução desses processos de dano. Na última década, consideráveis progressos têm sido alcançados no entendimento da iniciação e evolução de vários modos de dano. Mas este entendimento tem sido limitado a condições geométricas e de carregamento bastantes simples. Além disso, a maioria das pesquisas buscam apenas o entendimento de um módulo de falha isolado, tais como, o efeito das trincas da matriz ou da delaminação na rigidez, na resistência ou vida de um laminado. Muitas questões permanecem em aberto quanto à interação entre os diversos mecanismos de falha e a integridade estrutural, principalmente em situações complexas de carga e geometria, em materiais não homogêneos e anisotrópicos como costumam ser os laminados compostos. A principal dificuldade em um modelo matemático do dano é a diferença de escala que está envolvida no processo de iniciação e progressão do dano. No nível microscópico o foco está na fibra e na matriz e na interface fibra-matriz, mas no nível macroscópico, o interesse reside na resposta global da estrutura. A primeira falha sempre se inicia em um nível micro, mas os mecanismos de dano envolvem defeitos macroscópicos.

O efeito da delaminação na rigidez e na resistência não é tão bem compreendida como o efeito do das microtrincas que ocorrem na matriz. A maioria do esforço na área da delaminação é direcionado na predição da iniciação e no crescimento do processo de delaminação, mas pouco se estudou sobre a relação entre a delaminação e os outros modos de falha, como as trincas da matriz ou o rompimento das fibras. A maior parte dos estudos desenvolvidos é baseada em modelos de bidimensionais de tensão ou deformação. Entretanto, o dano em laminados compostos é governado por um estado tridimensional de tensão e por uma interação complexa entre os vários mecanismos de dano. As técnicas atuais de análise ainda não conseguem lidar eficientemente com os efeitos combinados dos vários modos de dano agindo simultaneamente uma estrutura composta, com configuração complexa, sujeita a condições combinadas de carregamento. Esta tarefa torna-se bem mais complicada quando se consideram as tensões residuais induzidas pelo processo de fabricação, por cargas térmicas e por fenômenos higroscópicos. Todos esses efeitos, muitas vezes irrelevantes em materiais convencionais como os metais, são fundamentais na determinação na integridade dos compostos. Estes fatores tornam o estudo da integridade estrutural de compostos um tema difícil, mas desafiador e crucial para o desenvolvimento tecnológico, tendo vista a crescente utilização dos materiais compostos em todas as áreas de aplicação.

A utilização intensiva de modelos matemáticos e computacionais em aplicações envolvendo materiais avançados e estruturas requer a validação através de experimentos apropriados ([23],[2],[22], [25] e [1]). Estes deverão ser capazes de verificar, em cada uma das escalas envolvidas, a acurácia das previsões obtidas a partir de tais modelos. Essa validação só é possível dado o atual estágio de áreas como imageamento e microscopia eletrônica. Tais aspectos fogem ao escopo deste texto mas,

de forma alguma, podem ser esquecidos por aqueles que desejam trabalhar na área de materiais avançados.

Em uma nova concepção de projeto, advinda a partir da utilização crescente de novos materiais, o conceito de especificação de material está cada dia mais distante. Incorpora-se a idéia de projeto do material como parte integrante do projeto do equipamento ou da estrutura. Os materiais são projetados com as propriedades e características físicas exigidas pelas especificações de funcionamento dos equipamentos [28]. Tal prática de projeto deve alicerçar-se fortemente na modelagem multiescala. A figura 1.1 apresenta, de forma esquemática, uma possível abordagem para essa nova concepção de projeto. Nesta figura destacam-se claramente as diferentes escalas, seja no espaço seja no tempo.

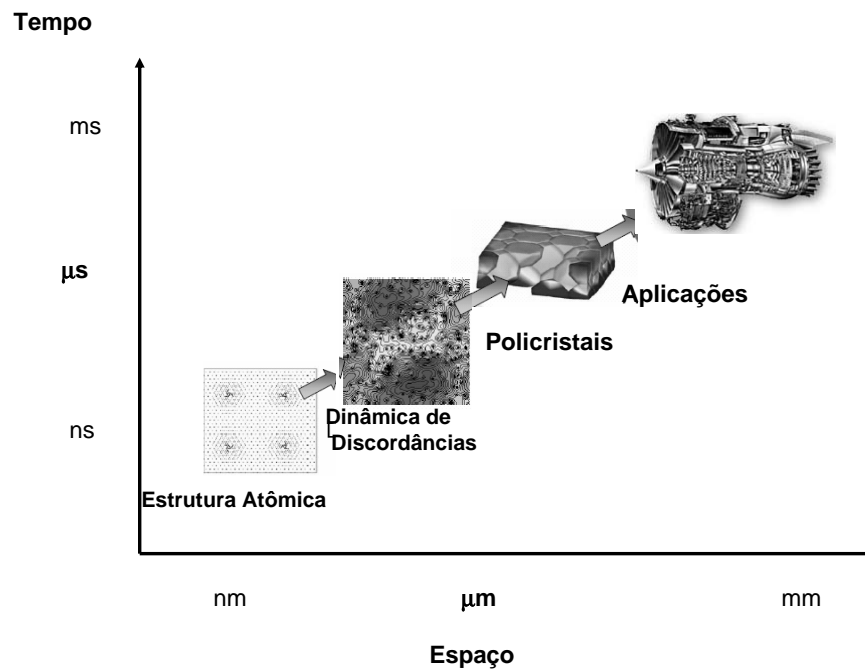


Figura 1.1: Ilustração de Abordagem Multiescala para Aplicações

Torna-se, neste ponto, importante destacar que o presente texto não tem a pretensão de esgotar um tema complexo e desafiante como a modelagem multiescala. Esta apresentação tem como objetivo despertar o interesse no leitor pela área e, principalmente, destacar o papel central da modelagem multiescala no mundo dos materiais avançados e suas aplicações. O restante do texto se divide da se-

guinte maneira: capítulo 2 é dedicado a uma apresentação sucinta da Mecânica dos Corpos Deformáveis; os capítulos 3 e 4 apresentam uma introdução a técnicas de modelagem multi-escala, seja do ponto de vista da formulação de modelos seja pela perspectiva da utilização de métodos numéricos para solução dos problemas matemáticos resultantes. Por fim, no capítulo 5, apresenta-se algumas observações finais.

Capítulo 2

Introdução à Mecânica dos Corpos Deformáveis

Neste capítulo apresenta-se uma breve introdução à Mecânica dos Corpos Deformáveis, na qual não se pretende fazer uma exposição detalhada ou esgotar todos os aspectos básicos. Para tanto os leitores são convidados a utilizar as referências que são citadas ao longo do texto. O objetivo deste capítulo é estabelecer idéias e conceitos básicos a partir de uma apresentação, mais intuitiva do que rigorosa, dos princípios básicos da Mecânica do Contínuo [7].

Qualquer corpo, independentemente do material que é constituído, deforma-se ao ser solicitado por forças ou outros estímulos (calor por exemplo) externos. Por deformação entende-se uma mudança da forma geométrica ocupada pelo corpo espontaneamente.

Tal deformação depende do material do qual o corpo é feito e, desta forma, está diretamente relacionada às propriedades mecânicas deste material. Estas propriedades são o objeto da Mecânica dos Materiais que terá grande destaque nessas notas.

Existem, essencialmente, três regimes de deformação, sendo estes correspondentes às propriedades dos materiais que de forma sucinta são apresentadas abaixo:

- Propriedades Elásticas dos Materiais: estas governam as chamadas deformações elásticas que se caracterizam por, uma vez retiradas as forças que as causaram, o corpo retornar a sua forma geométrica original.
- Plasticidade: trata das deformações plásticas nas quais o corpo não retorna a forma original depois da remoção das causas da deformação. Existem deformações permanentes.
- Resistência à Fratura: trata da possibilidade da separação do material em duas ou mais partes, perdendo o contato entre elas. Consiste em um aspecto central em qualquer projeto em engenharia, uma vez que pode estar diretamente relacionada a perda de funcionalidade, ou mesmo falha grave.

Neste ponto é importante ressaltar que as propriedades mencionadas acima foram descritas a partir de uma visão macroscópica e são, freqüentemente, caracterizadas através de ensaios experimentais que levam a uma descrição fenomenológica. No entanto, essas mesmas propriedades são diretamente governadas pela microestrutura dos materiais e, portanto, podem ser entendidas a partir desse nível de observação, gerando, assim, uma abordagem multi-escala o que é o objeto central deste curso e será explorada nos próximos capítulos.

2.1 Tensões e Equilíbrio

Como dito anteriormente, as idéias são introduzidos de forma intuitiva, explorando, essencialmente, conceitos básicos de Física e Matemática. Formalizações rigorosas podem ser encontrada em vasta literatura (ver [7] e referências desse livro).

O primeiro conceito a ser introduzido é o de tensão e, para tanto, usa-se uma situação simples esquematizada na figura 1. Nesta figura, apresenta-se um trecho de uma barra longa (o termo barra é utilizado aqui para designar um sólido que possui uma dimensão muito maior do que as outras duas) que está submetida a um par de forças de magnitude F em ambas as suas extremidades, este alinhado com a direção dessa barra. Este corpo está em equilíbrio (o somatório das forças é 0) e, portanto, qualquer porção deste também estará, conforme o representado na figura 1.

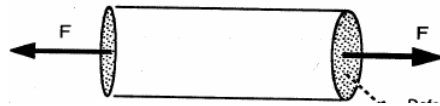


Figura 2.1: Uma barra solicitada por um par de forças em sua direção principal

A tensão (uniaxial neste caso), expressão do estado interno do corpo, é definida, então, como :

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (2.1)$$

onde A é a área da seção transversal. Considerando que as deformações sofridas pelo corpo possam ser consideradas "pequenas", confunde-se A com seu valor não deformado. Portanto, dada uma força conhecida pode-se, para a situação apresentada, computar facilmente o estado de tensão ao qual o corpo está submetido. Esta tarefa é significativamente mais complicada em uma situação mais geral envolvendo um corpo e carregamento sem particularidades geométricas como a apresentada na figura 2.

Para computar o estado de tensões em um ponto O , corta-se o corpo em duas partes (aqui se emprega linguagem figurada para se referir a uma ação conceitual abstrata) segundo um plano de normal \mathbf{n} , o que é apresentado esquematicamente na figura 3. Nessa figura destaca-se a presença de forças internas, resultado da ação

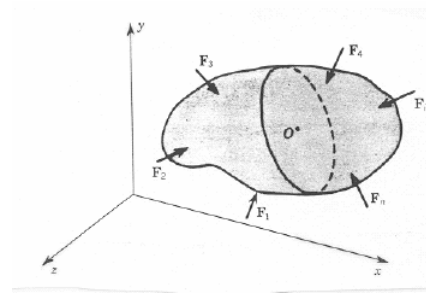


Figura 2.2: Introduzindo o conceito de forças internas em um corpo 3-D

da outra porção sobre àquela mostrada na figura. Estas forças são necessárias para garantir que o corpo permaneça em equilíbrio e são uma consequência da tendência dos materiais de se manterem íntegros.

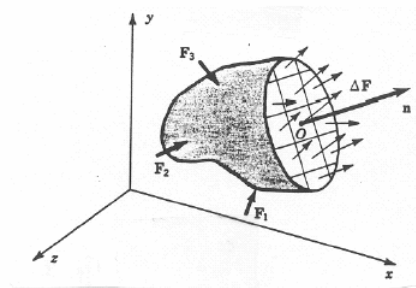


Figura 2.3: Introduzindo o conceito de tensão em uma situação 3-D

De forma similar a linha de raciocínio seguida para o caso 1-D, introduz-se o vetor tração \mathbf{t}_n

$$\mathbf{t}_n = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta A} \quad (2.2)$$

O vetor introduzido acima pode ser expresso através de seus componentes em uma base cartesiana fixa $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$, ou seja

$$\mathbf{t}_n = t_{nx}\mathbf{e}_x + t_{ny}\mathbf{e}_y + t_{nz}\mathbf{e}_z$$

O estado de tensão fica então determinado caso seja possível conhecer o vetor tração para qualquer direção de corte \mathbf{n} . Em verdade basta apenas conhecer o que acontece em relação a três direções mutuamente ortogonais e introduzindo-se o tensor das tensões σ expresso na forma de uma matriz abaixo:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

onde os σ_{ij} introduzidos na matriz acima são os componentes dos vetores tração definidos a partir de normais coincidentes com as direções x, y, z nessas mesmas direções. O significado de tais componentes é melhor compreendido na figura 2.4, na qual o ponto O em que está se computando o estado de tensões tem sua vizinhança representada por um cubo infinitesimal, cujas arestas são paralelas as direções coordenadas.

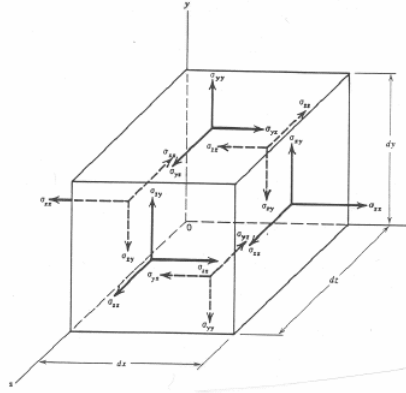


Figura 2.4: Componentes do tensor das tensões nas direções coordenadas

Os componentes são considerados positivos quando estão no mesmo sentido da normal que define o plano de corte. Os escalares σ_{xx}, σ_{yy} e σ_{zz} são chamados componentes de tensão normal. Os demais são os componentes de tensão cisalhante.

Ao examinar todos as possibilidades no que diz respeito à escolha de coordenadas (o que na prática traduz-se em girar o cubo infinitesimal em torno de O), chega-se a conclusão que há uma tríade de direções que corresponde as máximas tensões normais (pode-se provar sem grande dificuldade que essas direções correspondem aos autovetores da matriz σ , sendo os autovalores as máximas tensões normais [7]). Normalmente essas direções são denotadas pelos números 1, 2 e 3.

Como já dito anteriormente, as forças internas, expressas através do tensor das tensões, são diretamente ligadas ao equilíbrio no corpo. Isso pode ser melhor entendido a partir da obtenção das equações de equilíbrio que serão desenvolvidas abaixo em um contexto bi-dimensional unicamente para facilitar a compreensão. O ponto de partida é a figura 2.5 na qual se considera um quadrilátero infinitesimal de lados dx e dy (a versão bi-dimensional do cubo). Admite-se que os componentes de tensão variam de forma suave no interior desse quadrilátero de forma que os valores assumidos nas faces podem ser aproximados a partir de uma série de Taylor, conforme ilustrado na figura 2.5.

Utilizando mais uma vez o conceito básico de equilíbrio e lembrando que cada componente de tensão expressa a distribuição de forças internas sobre uma área, tem-se que o somatório de forças na direção x é dado por

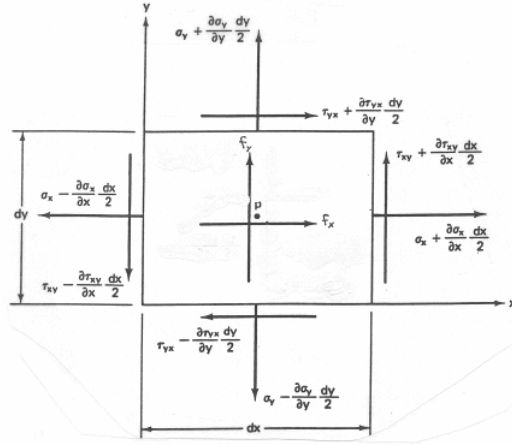


Figura 2.5: Equilíbrio em um elemento infinitesimal

$$\sum F_x = \left(\sigma_{xx} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \frac{dx}{2}\right) + \left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{dy}{2}\right) - \left(\sigma_{xx} - \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \frac{dx}{2}\right) \quad (2.4)$$

$$- \left(\tau_{yx} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{dy}{2}\right) + f_x dx dy = 0 \quad (2.5)$$

onde f_x denota a componente das forças distribuídas externas na direção x . Rearrmando os termos em 2.5, obtém-se a seguinte equação diferencial de equilíbrio:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + f_x = 0 \quad (2.6)$$

De forma análoga ao explorar-se o equilíbrio de forças na direção y obtém-se

$$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + f_y = 0 \quad (2.7)$$

Tendo em vista que em um corpo em equilíbrio o balanço de momentos é nulo em relação a qualquer ponto, conclui-se que, ao tomar esse ponto como o centro do elemento quadrilátero, a matriz σ é simétrica. Isto significa dizer que os componentes cisalhantes σ_{ij} são iguais aos σ_{ji} .

As equações acima foram desenvolvidas para um ponto qualquer do corpo e portanto são válidas em qualquer ponto deste. Podem ser expressas em uma forma mais compacta dada por :

$$\text{div } \sigma + \mathbf{f} = 0 \quad \sigma = \sigma^T \quad (2.8)$$

onde div denota o operador divergente .

2.2 Deformações

Mais uma vez, lança-se mão de uma situação particular (corpo unidimensional) com o intuito de introduzir um novo conceito. Na figura 2.6 apresenta-se uma barra (aqui o termo barra tem o mesmo sentido daquele empregado anteriormente) cujo comprimento inicial (antes da deformação) é l_0 . Em ambas as situações mostradas na figura, a barra tem sua geometria inicial modificada, portanto sofrendo uma deformação causada por solicitações externas. Tendo em vista as características particulares da barra, esta deformação uniaxial pode ser expressa de forma simples através da alteração de l_0 . Assim, define-se como deformação $e = \frac{\Delta l}{l_0}$, onde $\Delta l = l - l_0$ (l o comprimento final da barra seja em tração ou em compressão, situações mostradas na figura 2.6 a esquerda e a direita, respectivamente)

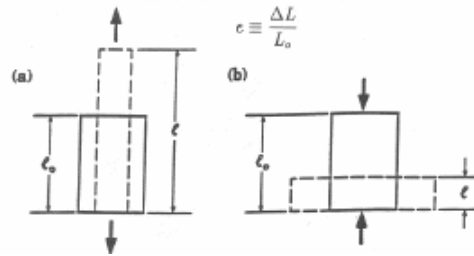


Figura 2.6: Deformação uniaxial de uma barra: tração (esquerda) e compressão (direita)

A situação tratada inicialmente leva a uma deformação dita normal, já que trata da alteração de uma característica geométrica (o comprimento de um segmento) em sua própria direção. O outro modo básico de deformação é o que diz respeito a mudanças entre direções coordenadas, ou seja alterações angulares como a mostrada na figura 2.7. Para pequenas deformações, a deformação angular (ou cisalhante pela sua ligação direta com a tensão cisalhante sugerida na figura) pode ser expressa através de $\gamma = \frac{a}{b}$.

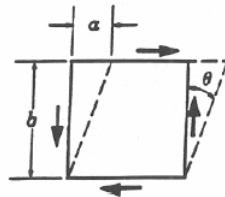


Figura 2.7: Deformação angular

Ambos os modos básicos de deformação, normal (extensão) e angular (cisalhante), só podem ser expressos da maneira que foram anteriormente quando as

deformações são consideradas pequenas de modo que as configurações assumidas pelo corpo inicial (indeformada) e final (deformada) possam ser "confundidas". Dito de outra maneira as relações geométricas são simples e geram relações lineares (ex.: ângulos e suas tangentes são próximos). Esse tipo de hipótese conduz a simplificações bastante significativas na solução de problemas. Felizmente em uma grande parcela dos problemas em engenharia essas hipóteses são verificáveis.

A posição espacial ocupada pela configuração deformada é, normalmente, mapeada através do vetor deslocamento \mathbf{u} . Este é definido pela diferença entre a posição final e a inicial de cada ponto do corpo. Obviamente, o vetor deslocamento define a geometria da configuração deformada e, portanto, é relacionado as medidas de deformações sugeridas anteriormente. Esta relação passa a ser explorada em uma situação bi-dimensional apresentada na figura 2.8. Nesta aparecem as configurações inicial (quadrilátero infinitesimal OCDE linha cheia) e final (linha pontilhada).

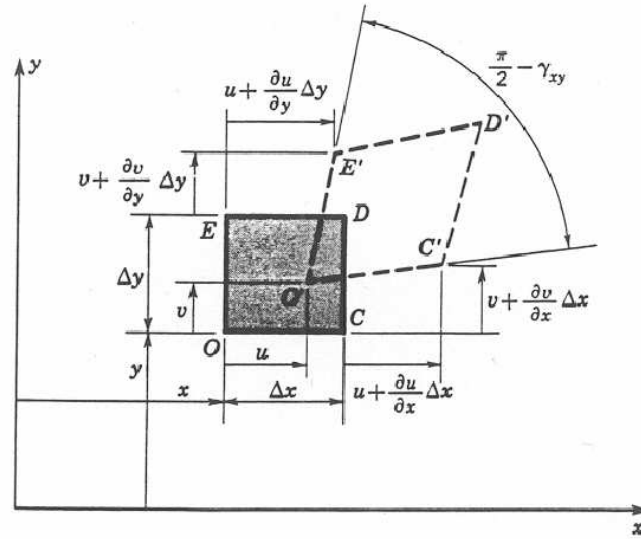


Figura 2.8: Deformação Plana

Aplicando as definições introduzidas anteriormente temos os seguintes componentes de deformação

$$e_{xx} = \lim_{OC \rightarrow 0} \frac{O'C' - OC}{OC} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta x + \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x - \Delta x}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.9)$$

$$e_{yy} = \lim_{OE \rightarrow 0} \frac{O'E' - OE}{OE} = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{\Delta y + \frac{\partial v}{\partial y} \Delta y - \Delta y}{\Delta y} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.10)$$

onde u e v são, respectivamente os componentes horizontal e vertical do vetor deslocamento. Seguindo uma linha semelhante para as deformações angulares tem-se

$$\gamma_{xy} = \gamma_{yx} = \lim_{\Delta x, \Delta y \rightarrow 0} \left(\frac{\pi}{2} - \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\frac{\partial v}{\partial x} \Delta x}{\Delta x} - \frac{\frac{\partial u}{\partial y} \Delta y}{\Delta y} \right] \right) = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \quad (2.11)$$

A partir das equações obtidas acima, introduz-se o tensor de deformações para um corpo tridimensional como

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

O tensor de deformação pode ser expresso em uma forma mais compacta que aquela de (2.12) através de

$$\epsilon = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \quad (2.13)$$

onde ∇ é o operador gradiente.

2.3 Comportamento Material

Até agora, tensão e deformação foram tratados de forma independente, sem que fosse estabelecido qualquer vínculo entre eles. Ambos fazem parte da resposta de um corpo deformável quando solicitado por ações externas. Na verdade, tensão e deformação são diretamente relacionados por uma relação constitutiva que representa o comportamento do material nos termos descritos no começo deste capítulo. Esta relação é escrita sob a abordagem macroscópica. A obtenção dessa relação segue potencialmente dois caminhos. O primeiro consiste na realização de ensaios e a proposição de formas da relação. Os parâmetros são, então, determinados a partir das medições realizadas durante esses ensaios. Esta é essencialmente uma abordagem macroscópica. O segundo caminho consiste na observação da microestrutura, o que requer o uso intensivo de microscopia, e no estabelecimento de relações entre esta e o comportamento macroscópico. Este último item é um dos focos do presente curso.

2.3.1 Comportamento Elástico dos Materiais

Essencialmente, o comportamento elástico é aquele onde o corpo retorna a sua configuração original tão logo as ações que promoveram uma determinada deformação cessem.

Quando o corpo é submetido a pequenas deformações, o comportamento observado é geralmente elástico e a relação constitutiva a ele associado (tensão como função da deformação) é linear, ou seja

$$\sigma = \mathbb{D} \epsilon \quad (2.14)$$

onde \mathbb{D} é um tensor de quarta ordem cujos componentes são os parâmetros que governam a resposta elástica do material. Considerando que o material é isotrópico, ou seja, sua resposta é a mesma qualquer que seja a direção da solitação, \mathbb{D} é definido por apenas dois parâmetros materiais: o módulo de Elasticidade E e o coeficiente de poisson ν . Nesse caso a equação constitutiva (2.14) resume-se a

$$\begin{aligned}e_{xx} &= \frac{1}{E}[\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})] \\e_{yy} &= \frac{1}{E}[\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})] \\e_{zz} &= \frac{1}{E}[\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{xx})] \\ \gamma_{xy} &= \frac{\tau_{xy}}{G} \\ \gamma_{xz} &= \frac{\tau_{xz}}{G} \\ \gamma_{yz} &= \frac{\tau_{yz}}{G}\end{aligned}$$

onde $G = \frac{E}{(1+2\nu)}$ é o módulo de cisalhamento .

Capítulo 3

Modelagem Multiescala : Homogeneização e Médias

O termo multiescala vem sendo empregado com diferentes significados em diferentes contextos. Em termos gerais, o que certamente abrange muitas dessas conotações, multiescala, no contexto de modelagem, é uma designação genérica para a construção de modelos, bem como a solução dos problemas matemáticos dali originados, que sejam capazes de conter importantes características e fenômenos físicos ou químicos que ocorrem em escalas (sejam elas espaciais ou temporais) menores do que aquelas em que o problema é usualmente tratado. Diversas são as situações onde esse tipo de abordagem se faz necessária, indo desde a análise de escoamentos em meios porosos [24] até a concepção de novos materiais [18], projetados especificamente para atender requisitos de funcionamento.

Nos últimos anos, materiais compósitos [19], em que o corpo é constituído de pelo menos dois componentes (frequentemente dispostos na forma de matriz e fibras que reforçam a resistência do corpo em uma direção previamente escolhida) tem sido cada vez mais empregados em aplicações em engenharia onde se deseja obter um aumento do desempenho de sistemas estruturais. Isto se deve a pelo menos duas razões. A primeira reside na relação resistência mecânica - peso, muito maior que a de materiais mais tradicionais. O segundo elemento tem haver com o fato que esses materiais podem ser projetados para atender demandas específicas através da escolha dos componentes e da orientação geométrica relativa das lâminas (conjunto formado por matriz e fibras), o que é apresentado de forma esquemática na figura 3.2. Situação semelhante desperta interesse na utilização de vários outros materiais levando a uma nova concepção conhecida como "projeto de materiais" [28] e [5], que utiliza de forma sistemática conceitos e técnicas multi-escala.

Nesta apresentação introdutória os exemplos acima são utilizados tão somente como motivação e ilustração. O propósito do presente texto é apresentar aspectos centrais da modelagem multi-escala com ênfase em materiais avançados. Este é o objeto deste e do próximo capítulo, sendo que neste apresenta-se uma abordagem

para obtenção de modelos baseados na micro-estrutura . No capítulo seguinte são apresentadas formulações e técnicas computacionais .

3.1 Micromecânica e Homogeneização

A Micromecânica, tema da presente seção, será apresentada buscando-se explorar, mais uma vez, os aspectos mais conceituais de uma forma não extremamente rigorosa. A idéia básica é que um material microscopicamente heterogêneo (repare que todos os materiais são heterogêneos dependendo da escala em que são observados) possa ser representado em termos macroscópicos como homogêneo mas que isso não seja feito através da obtenção dos parâmetros constitutivos (veja capítulo anterior) através de experimentos (ou pelo menos não só através destes). O material possuirá parâmetros efetivos que serão obtidos através de técnicas de homogeneização [15]. Como primeiro passo nesse sentido introduz-se o conceito de volume elementar representativo (VER) [9] e [8]. Um VER associado a um ponto do corpo é um volume material que é estatisticamente representativo da vizinhança desse ponto. Este ponto material é denominado, usualmente, macro-elemento, enquanto os microconstituintes do VER são chamados de micro-elementos. De maneira a atingir a equivalência estatística citada anteriormente , o VER deve conter um número muito grande de micro-elementos , portanto suas dimensões são muito maiores do que as heterogeneidades e, ao mesmo tempo, deve ser muito menor que o corpo que está sendo analisado. A figura 3.1 ilustra, de forma esquemática, o conceito do VER. Nesta figura, a vizinhança de um ponto material típico, designado por P, que poderá servir de VER é apresentada de forma ampliada, dando-se realce a sua microestrutura complexa que contém vazios, grãos, trincas e inclusões.

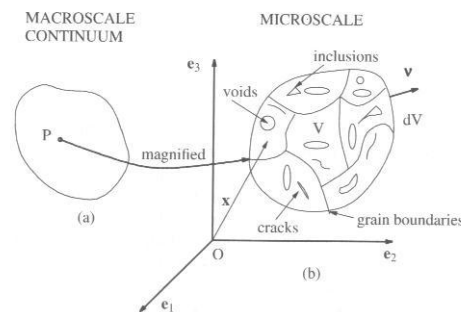


Figura 3.1: Um VRE construído em torno do ponto material P

A escolha do VER desempenha um papel fundamental na fidelidade com que a modelagem multiescala venha a reproduzir o comportamento real de um determinado material, uma vez provê as condições objetivas para a ligação entre os mundos microscópico e macroscópico. Em muitos casos a utilização de um determinado VER

não atende os requisitos estatísticos brevemente citados anteriormente conduzindo a uma aproximação que necessita ter sua validade avaliada através de metodologias sofisticadas, combinando modelagem adaptativa [26] e experimentos [20].

No entanto, no caso de materiais periódicos, como os compósitos citados anteriormente, uma célula unitária que possa gerar a configuração exata da microestrutura através de sua translação, constitui um VER de simples concepção ao mesmo tempo que atende os requisitos estatísticos para o processo de homogeneização. A figura 3.2 descreve esquematicamente esta idéia.

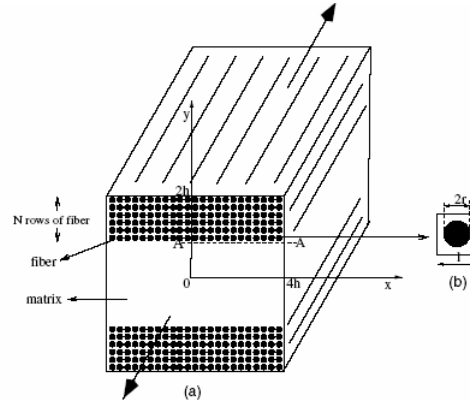


Figura 3.2: Material Periódico: (a) Compósito reforçado por fibras longitudinais. (b) Célula unitária (VER)

No caso de meios periódicos a técnica de homogeneização através de expansão assintótica [13] tem se mostrado de grande efetividade na obtenção das propriedades efetivas, mesmo quando são tratadas configurações complexas. Para melhor compreender o funcionamento e as potencialidades desta técnica, passa-se a apresentar, em um contexto simples, um exemplo. Trata-se do problema de elasticidade introduzido no capítulo anterior em que um corpo esbelto (uma das suas dimensões é significativamente superior as outras duas) está submetido a um carregamento cuja direção coincide com a direção geométrica principal do corpo. Neste caso o problema assume um caráter unidimensional descrito pela combinação das equações de balanço de momento linear 2.8 e de compatibilidade geométrica 2.13. Além disso admite-se que o material comporta-se de forma linear e elástica

$$-\frac{d}{dx} \left(a \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{du^\varepsilon}{dx} \right) = f(x) \quad x \in (0, 1) \quad (3.1)$$

$$u^\varepsilon(0) = u^\varepsilon(1) = 0$$

onde ε é um parâmetro que define a razão entre as diferentes escalas presentes no problema. Isto é melhor compreendido a partir da figura 3.3 que apresenta uma função genérica onde intuitivamente percebe-se duas escalas: uma mais "lenta" e

outra mais "rápida". Frequentemente, na literatura especializada, diz-se que esta função possui um componente de "baixa" frequência e um de "alta". Tal referência vai ao encontro da decomposição sugerida na figura 3.3, na qual a função apresentada pode ser vista como a soma de duas outras funções, sendo a segunda altamente oscilatória e parcialmente apresentada no "zoom". Nesse caso, $\varepsilon \ll 1$, o que significa que a razão entre as dimensões associadas às escalas "rápida" e "lenta" é bastante significativa.

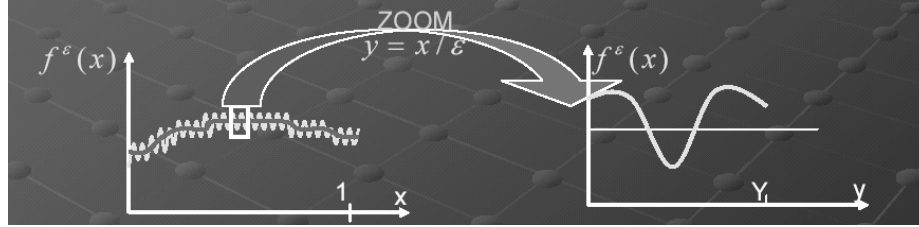


Figura 3.3: Decomposição em múltiplas escalas

Em 3.1, $a(x)$ desempenha o papel do módulo de elasticidade enquanto o campo desejado $u(x)$ é o deslocamento longitudinal.

A partir da visão apresentada na figura 3.3 introduz-se uma nova coordenada de forma que as funções passam a ser pensadas de forma diferente, $f^\varepsilon(x) = f(x, y(x))$, onde :

- coordenada macroscópica : x
- coordenada microscópica : $y = \frac{x}{\varepsilon}$

desta forma utilizando-se a regra da cadeia

$$\frac{d}{dx} f(x, y) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial f}{\partial y}$$

Admite-se, também, que as funções envolvidas na equação 3.1 são periódicas, o que significa dizer que

$$f(x, y) = f(x, y + Y) \quad \text{onde } Y \text{ representa o período}$$

onde Y representa o período

Nessas condições, é possível encontrar a solução analítica que será apresentada no próximo capítulo. O material que constitui o corpo que ora é analisado é periódico.

Introduz-se, então, a seguinte expansão assintótica para a solução do problema

$$u(x, y) = u^0(x, y) + \varepsilon u^1(x, y) + \varepsilon^2 u^2(x, y) + \dots \quad (3.2)$$

Tendo em vista a aplicação da regra cadeia introduzida anteriormente, a equação básica do problema 3.1 é reescrita como

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial y} \right) \left[a \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + f = 0 \quad (3.3)$$

levando a

$$\varepsilon^{-2} \frac{\partial}{\partial y} \left[a \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[a \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[a \frac{\partial u}{\partial x} \right] \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f = 0 \quad (3.4)$$

Substituindo a expansão assintótica 3.2 (truncada nos termos de segunda ordem) em 3.4 e reunindo os termos de mesma ordem, obtém-se

Termos de ordem ε^{-2} :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[a \frac{\partial u^0}{\partial y} \right] = 0$$

Multiplicando a equação acima por u^0 e integrando no VER (neste caso ditado por uma célula elementar dada por um segmento do tamanho do período Y), tem-se

$$\int_0^Y u^0 \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial u^0}{\partial y} \right) dy = 0 \Rightarrow \underbrace{u^0 a \frac{\partial u^0}{\partial y} \Big|_0^Y}_{=0(\text{periodicidade})} - \int_0^Y \frac{\partial u^0}{\partial y} a \frac{\partial u^0}{\partial y} dy = 0 \quad (3.5)$$

Admitindo que o coeficiente a é positivo

$$\frac{\partial u^0}{\partial y} = 0 \Rightarrow u^0(x)$$

ou seja u^0 depende apenas da coordenada macroscópica x o que significa dizer que o termo de mais alta ordem na expansão assintótica é constante ao longo do VER.

Termos de ordem ε^{-1} :

$$\left[\frac{\partial}{\partial y} a \left(\frac{\partial u^1}{\partial y} + \frac{\partial u^0}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (3.6)$$

Uma vez conhecido o valor de u^0 na equação acima no ponto x associado ao VER, a equação acima passa a ter como incógnita o termo $u^1(y)$. Pode-se então resolver esta equação utilizando-se métodos numéricos (estes não são detalhados no presente capítulo), lembrando que a equação resultante difere significativamente da original na medida em que será definida apenas no VER e o termo não conhecido deve atender condições de contorno periódicas.

Prosseguindo nas linhas delineadas nos parágrafos anteriores é possível construir um esquema de solução para a equação 3.1 que possui uma solução que, potencialmente, possui componentes de escalas bastantes diferentes o que, como comentado anteriormente, traz substanciais dificuldades para as metodologias mais tradicionais de solução. Embora consistente e lógica, a metodologia que daí surgiria

(típicamente um "método multi-escala") ainda levaria a uma demanda de recursos computacionais pouco razoável no contexto de aplicações. É precisamente neste ponto do desenvolvimento que se muda de direção e se estabelece a base para a homogeneização (ou seja busca-se uma nova equação que visa capturar com certa precisão o comportamento das "escalas mais rápidas" ao mesmo tempo que requer custos computacionais mais aceitáveis para o universo das aplicações). Para tanto introduz-se uma função auxiliar $H(y)$, periódica no VER e que satisfaz $u^1(x, y) = H \frac{\partial u^0}{\partial x}$. Substituindo a relação que acaba de ser introduzida em 3.6, obtém-se uma equação diferencial de segunda ordem homogêna cuja incógnita é H e esta pode ser resolvida por métodos tradicionais.

Termos de ordem ε^0 :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[a \left(\frac{\partial u^2}{\partial y} + \frac{\partial u^1}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial^2 u^0}{\partial x^2} a \left(\frac{\partial H}{\partial y} + 1 \right) + f = 0 \quad (3.7)$$

Integrando a equação acima no VER e explorando a periodicidade, chega-se a

$$\frac{\partial^2 u^0}{\partial x^2} \int_0^Y a(y) \left(\frac{\partial H(y)}{\partial y} + 1 \right) dy + \int_0^Y f dy = 0$$

Reinterpretando a equação acima chega-se a forma homogeneizada de 3.1 dada por

$$\tilde{a} \frac{\partial^2 u^0}{\partial x^2} + \tilde{f} = 0 \quad (3.8)$$

onde \tilde{a} (o termo mais importante neste desenvolvimento !) representa a homogeneização do parâmetro oscilatório do problema dado por

$$\frac{1}{Y} \int_0^Y a(y) \left(\frac{\partial H}{\partial y} + 1 \right) dy$$

além disso $\tilde{f} = \frac{1}{Y} \int_0^Y f dy$ (o valor médio do termo fonte sobre o VER).

Neste ponto é importante ressaltar que o procedimento acima leva a uma aproximação da solução de 3.1 que leva em conta as "escalas mais rápidas" inerentes ao problema e que pode ser obtida através de métodos numéricos tradicionais. Isso em termos de aplicações conduz a ganhos significativos uma vez que agora a equação 3.1 pode ser resolvida diversas vezes para diferentes condições de contorno e fontes f (pense, por exemplo, na da equação do calor, diversos problemas de condução representando diferentes situações do sistema podem ser resolvidos utilizando-se 3.8). Também é importante notar que o procedimento acima não se reduz a aplicação de médias em 3.1, o que leva, freqüentemente, a aproximações pouco precisas da solução desejada (as "escalas mais rápidas" não são capturadas de forma adequada). Maiores detalhes sobre homogeneização e suas aplicações podem ser encontradas em [13].

Capítulo 4

Homogeneização de equações elíticas em uma dimensão

Neste capítulo, investigamos o processo de homogeneização em uma dimensão, enfatizando aspectos teóricos e numéricos. Apresentamos na Seção 4.1 uma equação simples mas que carrega em si várias das dificuldades presentes em problemas mais sofisticados. A seguir discutimos três alternativas de modelagem para a equação em discussão: homogeneização, elementos finitos clássicos, e elementos finitos multiescala. Procuramos nestas seções mostrar as vantagens e desvantagens de cada técnica e apresentamos vários exemplos numéricos. Finalmente concluímos mostrando uma outra dificuldade presente quando o problema “perde coercividade”.

4.1 Um modelo

Para descrever as propriedades qualitativas e dificuldades relacionadas com problemas que apresentam caráter oscilatório, consideramos o seguinte modelo unidimensional:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left(a(x/\epsilon)\frac{du^\epsilon}{dx}(x)\right) &= f(x) \quad \text{em } (0, 1), \\ u^\epsilon(0) &= u^\epsilon(1) = 0. \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde $a(\cdot)$ é suave e periódica com período 1, e $\beta \geq a(x) \geq \alpha > 0$, para α, β reais. Estamos interessados somente no caso em que $\epsilon \leq 1$, portanto assumiremos também esta desigualdade.

Neste caso unidimensional, é fácil obter uma solução analítica para (4.1):

$$u^\epsilon(x) = -\int_0^x \left(\frac{1}{a(\xi/\epsilon)} \int_0^\xi f(t) dt + c_0 \right) d\xi, \quad c_0 = \frac{1}{\int_0^1 a(\xi/\epsilon) d\xi} \int_0^1 \left(\frac{1}{a(\xi/\epsilon)} \int_0^\xi f(t) dt \right) d\xi.$$

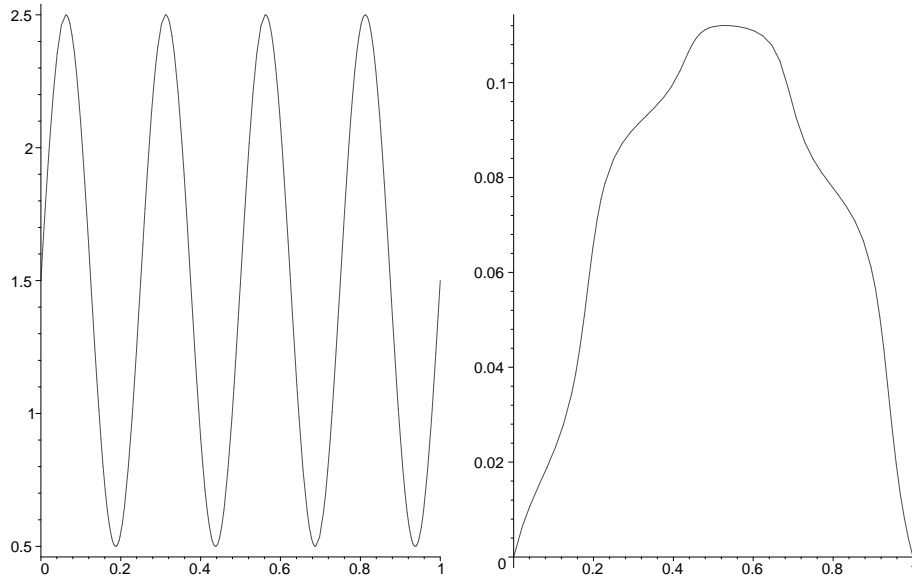


Fig. 4.1: Gráficos de $a(\cdot/\epsilon)$ e da solução exata para $\epsilon = 1/4$.

Nos nossos exemplos, consideraremos

$$f(x) = 1, \quad a(x) = \frac{1}{2}(\beta - \alpha)(1 + \sin(2\pi x)) + \alpha, \quad \alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{5}{2}. \quad (4.2)$$

Seja a seguinte sequência de problemas, onde $\epsilon = 1/4$, $\epsilon = 1/8$, e $\epsilon = 1/16$, e veja as figuras 4.1, 4.2 e 4.3. É fácil notar neste exemplo que crescem as oscilações de $a(\cdot/\epsilon)$ quando $\epsilon \rightarrow 0$.

Em dimensões maiores, é extremamente difícil obter soluções analíticas. Motivados por esta dificuldade, investigaremos agora como encontrar soluções aproximadas para (4.1).

Uma possibilidade explorada na Seção 4.2 é o uso de *técnicas de homogeneização*. Como vimos, a idéia básica apoia-se no fato de que, quando $\epsilon \rightarrow 0$, a solução exata converge para uma função chamada de *solução homogeneizada*. Espera-se então que para valores de ϵ pequenos, a aproximação pela solução homogeneizada seja boa o suficiente.

Outra possibilidade é o discretizar o problema usando *elementos finitos*. Esta escolha de método numérico deve-se tanto à aplicabilidade do método em diversos problemas de interesse, como também a facilidade em desenvolver uma análise de erro que ressalte eventuais dificuldades numéricas. Estas questões são analisadas na Seção 4.3.

Uma outra opção baseada em pesquisa recente [10, 11] é o uso de *elementos finitos multiescala*. Nesta técnica, descrita na Seção 4.4, funções de base que resolvem o problema *localmente* são utilizadas para gerar um espaço de elementos finitos, e

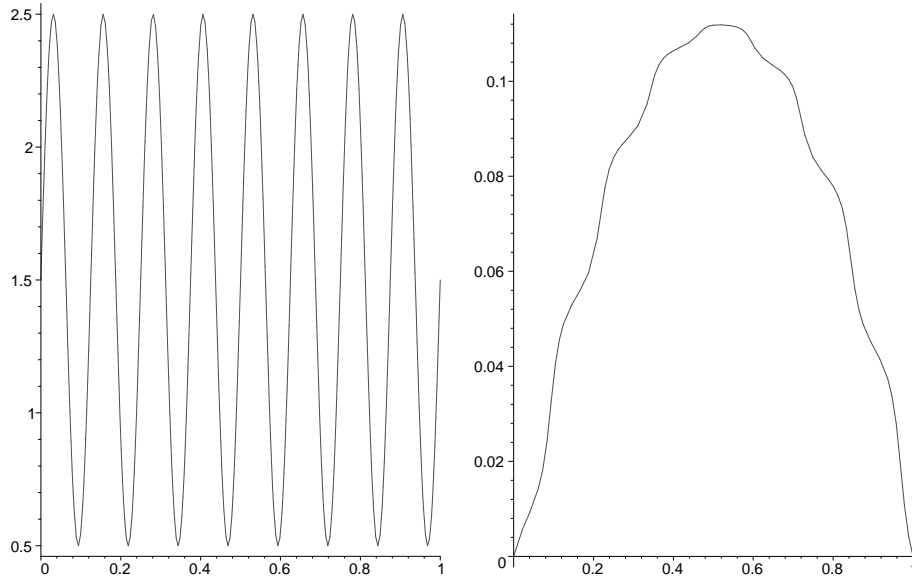


Fig. 4.2: Gráficos de $a(\cdot/\epsilon)$ e da solução exata para $\epsilon = 1/8$.

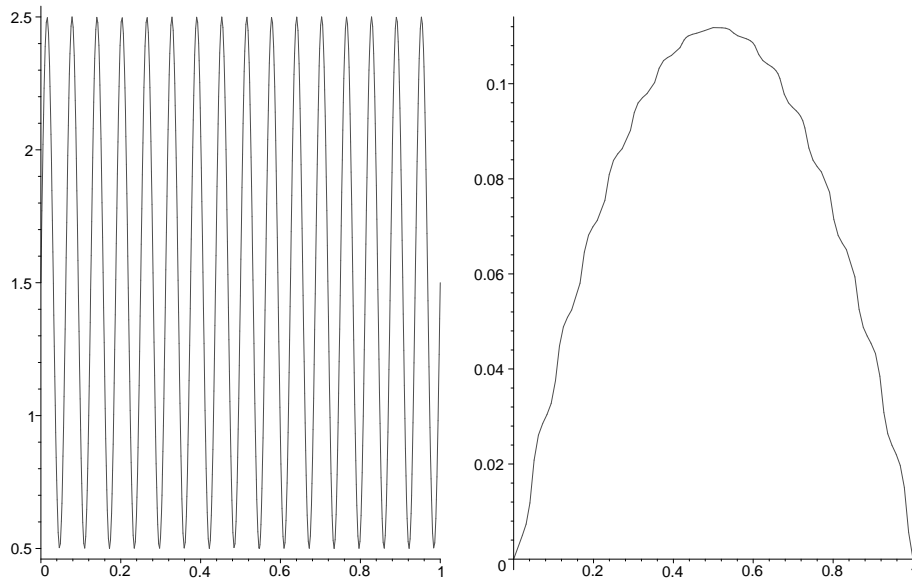


Fig. 4.3: Gráficos de $a(\cdot/\epsilon)$ e da solução exata para $\epsilon = 1/16$.

automaticamente levam informações da pequena escala para a grande escala, num processo de *homogeneização numérica*.

4.2 Solução homogeneizada

Seja u^ϵ solução de (4.1). É possível então mostrar que u^ϵ converge para u^0 , onde

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\mathcal{M}(1/a)} \frac{d^2}{dx^2} u^0 &= f(x) \quad \text{em } (0, 1), \\ u^0(0) &= u^0(1) = 0, \end{aligned} \quad (4.3)$$

e

$$\mathcal{M}(1/a) = \int_0^1 \frac{1}{a(x)} dx.$$

Em uma dimensão, é fácil calcular u^0 analiticamente:

$$u^0(x) = \mathcal{M}(1/a) \left[-\int_0^x \int_0^\xi f(t) dt d\xi + x \int_0^1 \int_0^\xi f(t) dt d\xi \right].$$

A convergência ocorre usando norma do espaço $L^2(0, 1)$. Este espaço é composto por funções $v : (0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$ “quadrado integráveis”, i.e.,

$$L^2(0, 1) = \{v : v \text{ é função real definida em } (0, 1) \text{ e } v^2 \text{ é integrável}\}.$$

Neste espaço definimos a norma

$$\|v\|_{L^2(0,1)} = \left(\int_0^1 [v(x)]^2 dx \right)^{1/2}.$$

Observação 1 *Acima, e no restante deste texto, o adjetivo “integrável” quer dizer na verdade integrável no sentido de Lebesgue, uma idéia um pouco mais abrangente que a de integração no sentido de Riemann. Entretanto, é suficiente neste texto ter a intuição de funções integráveis como sendo Riemann integráveis.*

O seguinte resultado de convergência justifica o uso da solução homogeneizada [14].

Teorema 4.2.1 *Seja $f \in L^2(0, 1)$, e seja u^ϵ solução de (4.1). Então existe uma constante c independente de $\epsilon, f, \alpha, \beta$ tal que*

$$\|u^\epsilon - u^0\|_{L^2(0,1)} \leq c \frac{\epsilon}{\alpha} \|f\|_{L^2(0,1)}.$$

Comparamos agora como a solução homogeneizada se comporta, assumindo (4.2). Considere a seguinte sequência de exemplos, onde $\epsilon = 1/4$, $\epsilon = 1/8$, e $\epsilon = 1/16$, e veja as Figuras 4.4, 4.5 e 4.6. Pode-se notar que quando $\epsilon \rightarrow 0$, a solução homogeneizada u^0 torna-se uma boa aproximação para a solução exata u^ϵ .

Apesar de serem extremamente úteis em várias aplicações, as técnicas de homogeneização apresentam algumas limitações. Por exemplo, sua aplicabilidade está limitada a valores de ϵ pequenos, como fica aparente na figura 4.4. Outras dificuldades surgem em casos mais gerais, por exemplo quando $a(\cdot)$ é não periódico.

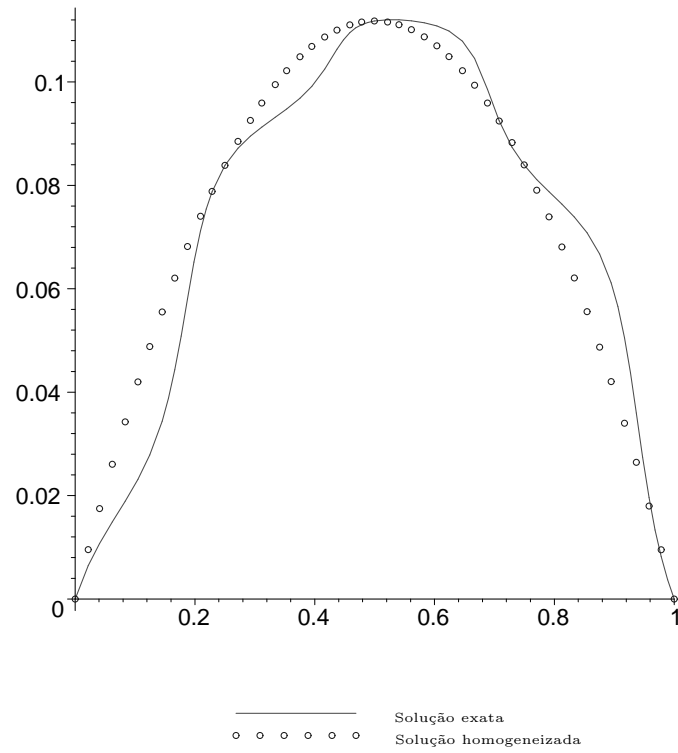


Fig. 4.4: Comparação entre as soluções exatas e homogeneizada para $\epsilon = 1/4$.

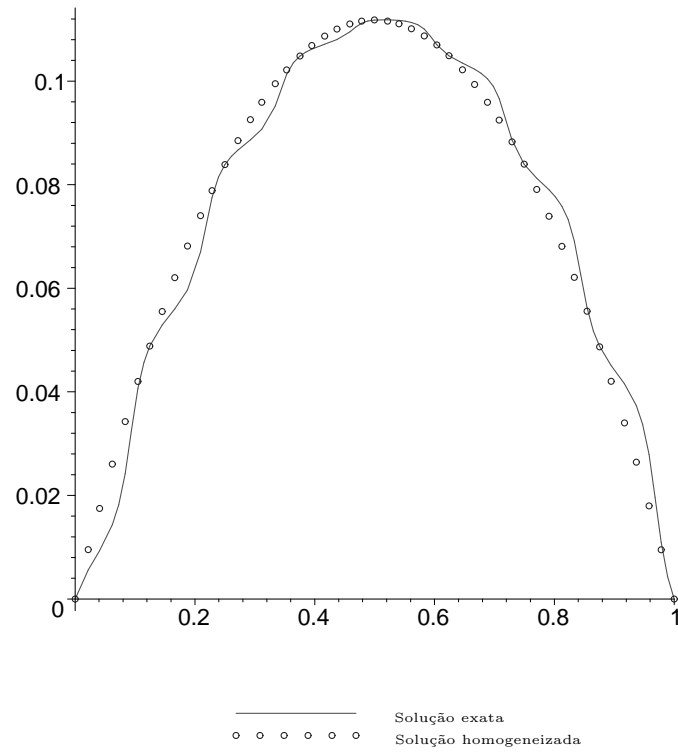


Fig. 4.5: Comparação entre as soluções exatas e homogeneizada para $\epsilon = 1/8$.

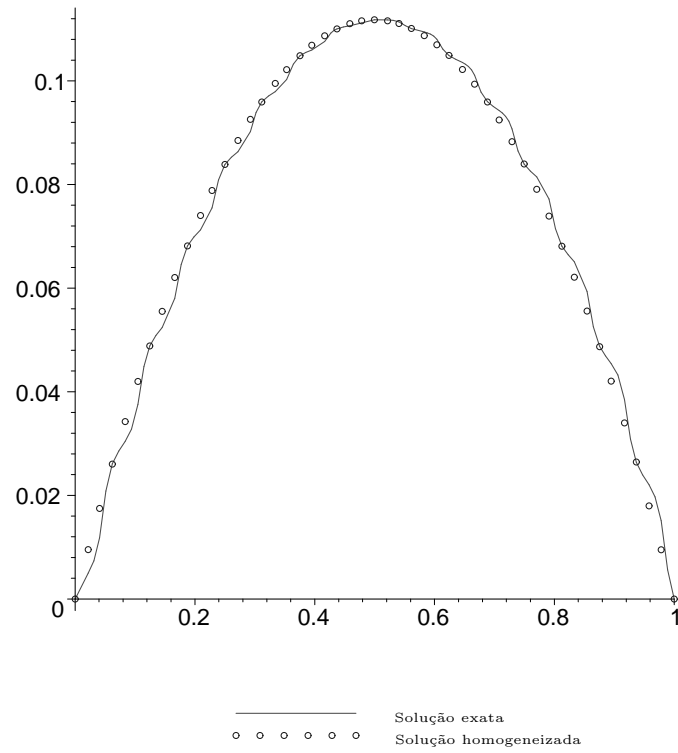


Fig. 4.6: Comparação entre as soluções exatas e homogeneizada para $\epsilon = 1/16$.

4.3 Aproximação por Elementos Finitos

O primeiro passo para apresentar o método é reescrever (4.1) na sua *forma fraca*. Se multiplicarmos a equação por uma função v suficientemente suave e que se anule em $x = 0$ e $x = 1$ e integrarmos por partes, temos que

$$\int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{du^\epsilon}{dx}(x) \frac{dv}{dx}(x) \right) dx = \int_0^1 f(x)v(x) dx. \quad (4.4)$$

Note que se u^ϵ é solução de (4.1), então a identidade acima vale para todo v suficientemente suave.

É possível também inverter a ordem desse raciocínio, i.e., gostaríamos de buscar uma função u^ϵ que satisfizesse (4.4) para toda v suficientemente suave, e depois poderíamos mostrar que também resolve (4.1). Para tal, buscaremos a solução num espaço de funções que sejam contínuas, que tenham derivadas (no sentido fraco), e que se anulem em $x = 0$ e $x = 1$. Além disso, exigiremos que essas funções e suas derivadas sejam quadrado integráveis, i.e., podemos integrar tanto v^2 como $(v')^2$. Chamaremos esse espaço de

$$H_0^1(0, 1) = \{v \in C[0, 1] : v(0) = v(1) = 0; \quad v^2 \text{ e } (v')^2 \text{ são integráveis}\},$$

e introduzimos a norma

$$\|v\|_{H^1(0,1)} = \left(\int_0^1 \left\{ [v(x)]^2 + \left[\frac{dv}{dx}(x) \right]^2 \right\} dx \right)^{1/2}.$$

Como exemplo de funções que estão em $H_0^1(0, 1)$, temos a importante classe de funções suaves por partes, como por exemplo a função mostrada na figura 4.7. Note que a função v^h lá representada é contínua, se anula em $x = 0$ e $x = 1$, e além disso só deixa de ser suave num número finito de pontos.

O importante no momento é que é possível provar que existe uma função $u^\epsilon \in H_0^1(0, 1)$ satisfazendo (4.4) para todo $v \in H_0^1(0, 1)$. Além disso, no caso de f ser suave, esta solução também resolve (4.1). Ou seja, essas duas formulações são equivalentes.

4.3.1 Discretização por Elementos Finitos

A idéia do método de elementos finitos é escolher um subespaço de $H_0^1(0, 1)$ e buscar funções que satisfaçam (4.4) dentro desse subespaço. Nós primeiro discretizamos o domínio $(0, 1)$ em elementos finitos definindo os nós $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N+1} = 1$, onde $x_j = jh$, e $h = 1/(N + 1)$ é o parâmetro de malha. A seguir, definimos o espaço de dimensão finita $V_0^h \subset H_0^1(0, 1)$, onde

$$V_0^h = \{v^h \in H_0^1(0, 1) : v^h \text{ é linear em } (x_{j-1}, x_j) \text{ for } j = 1, \dots, N + 1\}.$$

Chamamos V_0^h de espaço de funções lineares por partes. Uma função de V_0^h típica é representada na figura 4.7. A aproximação por elementos finitos de u^ϵ é $u^h \in V_0^h$

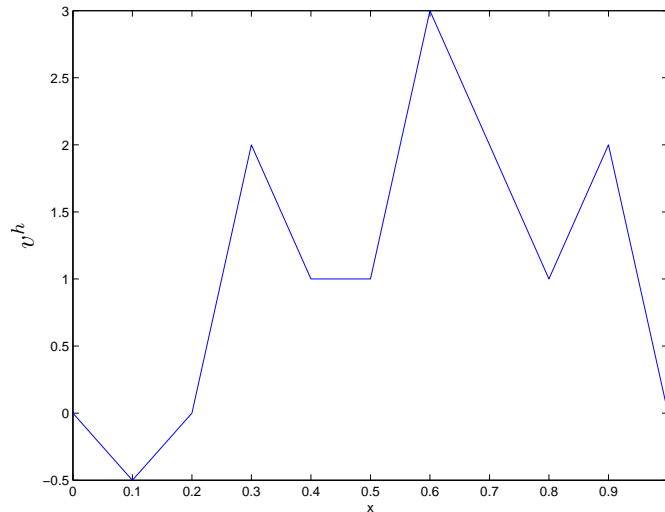


Fig. 4.7: Exemplo de função linear por partes

tal que

$$\int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{du^h}{dx}(x) \frac{dv^h}{dx}(x) \right) dx = \int_0^1 f(x) v^h(x) dx \quad \text{para todo } v^h \in V_0^h. \quad (4.5)$$

Observação 2 Note que u^h também depende de ϵ , apesar desta dependência não estar explicitada na notação.

Observe que uma função em V_0^h pode ser caracterizada de forma única pelos valores que assume nos nós x_1, x_2 , etc. Em vista disto, podemos introduzir uma base no espaço V_0^h . Seja $\phi_i \in V_0^h$ tal que

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{se } i \neq j, \end{cases}$$

para $j = 1, \dots, N$. Uma função de base típica está representada na figura 4.8. Temos então $V_0^h = \text{span} \{ \phi_1, \dots, \phi_N \}$.

Finalmente, se $u^h(x) = \sum_{i=1}^N u_i \phi_i(x)$, então reescrevemos (4.5) como

$$\sum_{i=1}^N u_i \int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{d\phi_i}{dx}(x) \frac{d\phi_j}{dx}(x) \right) dx = \int_0^1 f(x) \phi_j(x) dx \quad \text{para } j = 1, \dots, N. \quad (4.6)$$

Note que $u_j = u^h(x_j)$ é o valor de u^h no nó x_j .

O método de elementos finitos para (4.1) consiste então em achar $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_N)^T \in \mathbb{R}^N$ tal que

$$\mathbf{M}\mathbf{u} = \mathbf{f},$$

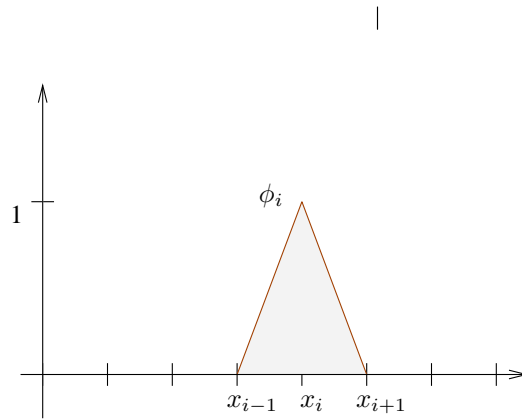


Fig. 4.8: Uma função da base do espaço de elementos finitos

onde a matriz $\mathbf{M} = (M_{i,j}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e o vetor $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_N)^T \in \mathbb{R}^N$ são dados por

$$M_{i,j} = \int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{d\phi_i}{dx}(x) \frac{d\phi_j}{dx}(x) \right) dx, \quad f_j = \int_0^1 f(x) \phi_j(x) dx.$$

As aproximações numéricas para (4.1), onde a é dada por (4.2) apresentam resultados variados. Para $\epsilon = 1/4$ e $h = 1/32$, o método de elementos finitos aproxima razoavelmente bem a solução exata, como mostra a figura 4.9. Entretanto, a aproximação se deteriora quando ϵ se torna menor. Veja os gráficos para $h = 1/32$, mas $\epsilon = 1/8$ na figura 4.10, e $\epsilon = 1/16$ na figura 4.11.

A aproximação melhora se refinarmos a malha. Por exemplo, tomando o caso $\epsilon = 1/8$, mas com $h = 1/64$, temos uma melhoria na aproximação, como mostra a figura 4.12.

O ponto que queremos ressaltar é que o método de elementos finitos converge, mas a *taxa de convergência depende de ϵ* . Isto pode ser um problema em dimensões maiores, quando o uso de malhas refinadas torna-se caro computacionalmente.

4.3.2 O que dá errado?

A fim de entender melhor porque o método de elementos finitos clássico não funciona bem, desenvolvemos uma análise de erro para esse problema. Aqui e no restante deste capítulo, c denota uma constante universal, independente de ϵ , h , f , α e β . Quando queremos indicar uma constante que pode depender de α ou β , mas não de ϵ , h ou f , utilizamos a letra maiúscula C .

Para facilitar a notação, definimos as formas bilineares

$$b(u, v) = \int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{du^\epsilon}{dx}(x) \frac{dv}{dx}(x) \right) dx, \quad (f, v) = \int_0^1 f(x)v(x) dx.$$

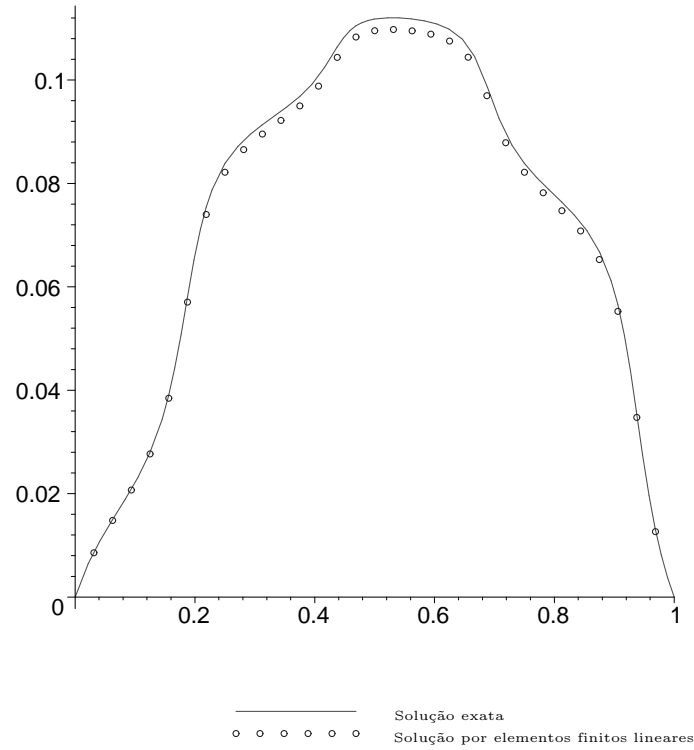


Fig. 4.9: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos, com $\epsilon = 1/4$ e $h = 1/32$.

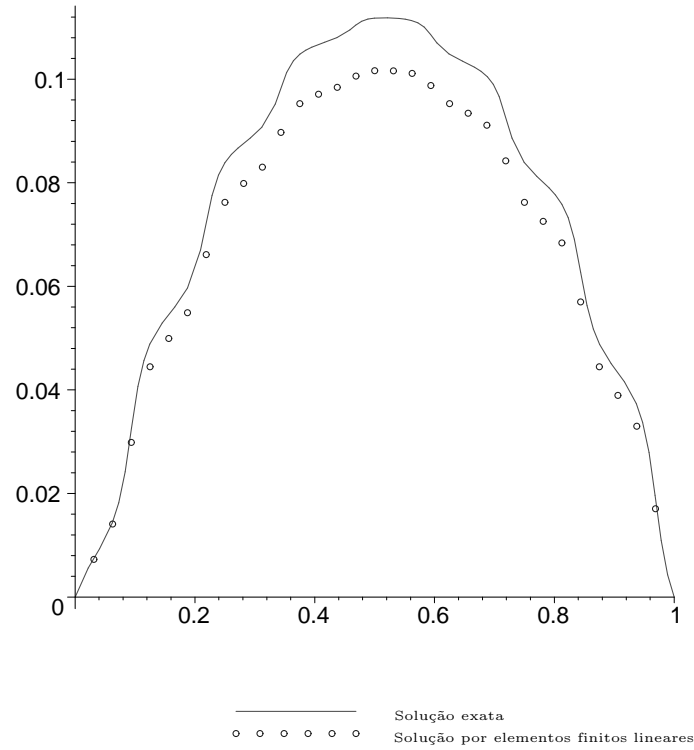


Fig. 4.10: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos, com $\epsilon = 1/8$ e $h = 1/32$.

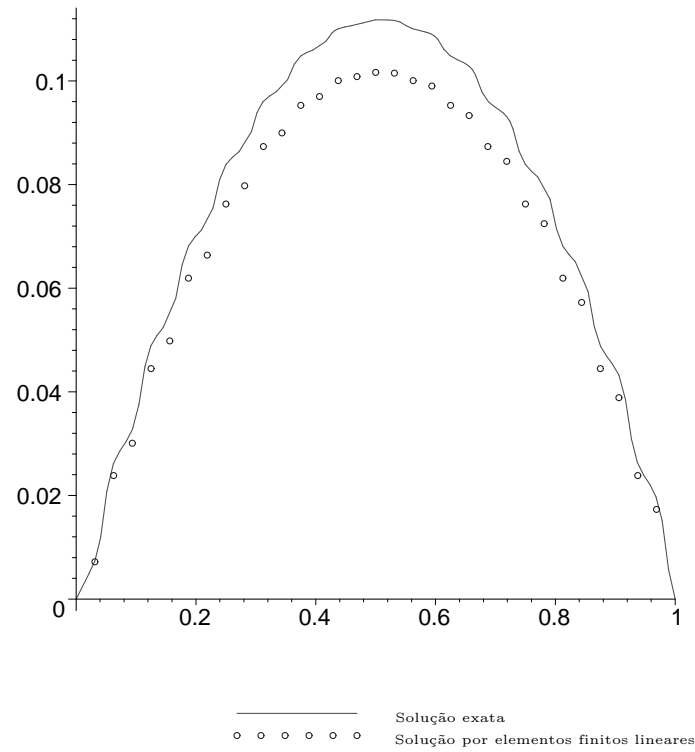


Fig. 4.11: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos, com $\epsilon = 1/16$ e $h = 1/32$.

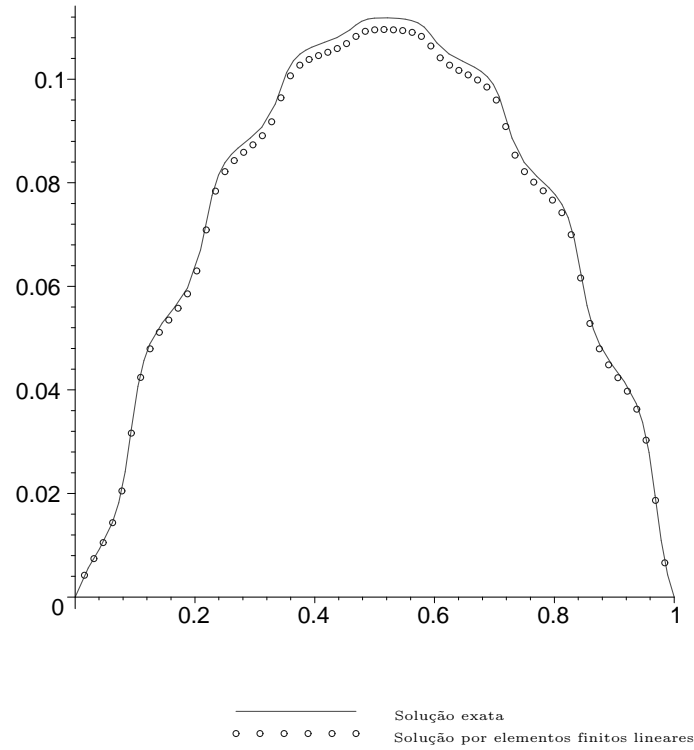


Fig. 4.12: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos, com $\epsilon = 1/8$ e $h = 1/64$.

Temos então que a solução exata $u^\epsilon \in H_0^1(0,1)$ e sua aproximação por elementos finitos $u^h \in V_0^h$ satisfazem

$$b(u^\epsilon, v) = (f, v) \quad \text{para todo } v \in H_0^1(0,1), \quad b(u^h, v^h) = (f, v^h) \quad \text{para todo } v^h \in V_0^h.$$

Logo

$$b(u^\epsilon - u^h, v^h) = 0 \quad \text{para todo } v^h \in V_0^h.$$

Na nossa análise, usamos o fato que $\beta \geq a(x) \geq \alpha > 0$. Começamos a investigar a continuidade da forma bilinear $b(\cdot, \cdot)$. Segue-se de sua definição que

$$b(u, v) \leq \beta \|u\|_{H^1(0,1)} \|v\|_{H^1(0,1)} \quad \text{para todo } u, v \in H_0^1(0,1). \quad (4.7)$$

A seguir, estimamos a coercividade:

$$b(v, v) \geq \alpha \int_0^1 \left(\frac{dv}{dx} \right)^2 dx \geq c\alpha \|v\|_{H^1(0,1)}^2 \quad \text{para todo } v \in H_0^1(0,1), \quad (4.8)$$

onde usamos a desigualdade de Poincaré

$$\int_0^1 \left(\frac{dv}{dx}(x) \right)^2 dx \geq c \int_0^1 \left[(v(x))^2 + \left(\frac{dv}{dx}(x) \right)^2 \right] dx$$

no último passo.

Podemos agora obter estimativas de erro. Usando (4.8), e depois (4.7), concluimos que

$$\begin{aligned} \|u^\epsilon - u^h\|_{H^1(0,1)}^2 &\leq \frac{c}{\alpha} b(u^\epsilon - u^h, u^\epsilon - u^h) = \frac{c}{\alpha} b(u^\epsilon - u^h, u^\epsilon - v^h) \\ &\leq c \frac{\beta}{\alpha} \|u^\epsilon - u^h\|_{H^1(0,1)} \|u^\epsilon - v^h\|_{H^1(0,1)} \quad \text{para todo } v^h \in V_0^h. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Mostramos assim o Lema de Cea.

Lema 4.3.1 (Lema de Cea) *Sejam u^ϵ e u^h soluções de (4.1) e (4.5). Então existe uma constante universal c tal que*

$$\|u^\epsilon - u^h\|_{H^1(0,1)} \leq c \frac{\beta}{\alpha} \|u^\epsilon - v^h\|_{H^1(0,1)} \quad \text{para todo } v^h \in V_0^h.$$

A seguir, usando estimativas clássicas de interpolação, temos que

$$\|u^\epsilon - I^h u^\epsilon\|_{H^1(0,1)} \leq ch |u^\epsilon|_{H^2(0,1)}, \quad (4.10)$$

onde $I^h u^\epsilon = \sum_{j=1}^N u^\epsilon(x_j) \phi_j$ é o interpolador de u^ϵ em V_0^h , e

$$|v|_{H^2(0,1)} = \left(\int_0^1 \left[\frac{d^2 v}{dx^2}(x) \right]^2 dx \right)^{1/2}.$$

Fazendo $v^h = I^h u^\epsilon$ em (4.9), concluímos que

$$\|u^\epsilon - u^h\|_{H^1(0,1)} \leq c \frac{\beta}{\alpha} h |u^\epsilon|_{H^2(0,1)}.$$

Obtemos finalmente o teorema a seguir usando a estimativa de regularidade

$$|u^\epsilon|_{H^2(0,1)} \leq \frac{c\beta}{\alpha^2 \epsilon} \|f\|_{L^2(0,1)}, \quad (4.11)$$

onde assumimos $|a'(x)| \leq c\beta$.

Teorema 4.3.2 *Seja $f \in L^2(0,1)$, e seja u^ϵ solução de (4.1). Então existe uma constante c independente de $\epsilon, f, \alpha, \beta$ tal que*

$$\|u^\epsilon - u^h\|_{H^1(0,1)} \leq c \frac{\beta^2}{\alpha^3} \frac{h}{\epsilon} \|f\|_{L^2(0,1)}. \quad (4.12)$$

Paramos por um momento agora para interpretar a estimativa obtida. Antes de mais nada, o método converge quando $h \rightarrow 0$. De fato, para ϵ fixo, o erro vai a zero que o tamanho da malha vai a zero. O problema é que a convergência em h não é uniforme em ϵ .

Logo, para ϵ pequeno, a menos que a malha seja muito refinada ($h \ll \epsilon$), a estimativa (4.12) indica que o erro na norma $H^1(0,1)$ é grande. Isto faz com que o método de elementos finitos tradicional sejam quase inúteis para este tipo de problema, e explica os maus resultados das figuras 4.10 e 4.11.

4.4 Elementos Finitos Multiescala

Mais recentemente, Tom Hou e seus colaboradores [10, 11] propuseram uma nova forma de aproximação numérica para EDPs em duas dimensões com coeficientes oscilatórios. A idéia básica é mudar as funções de base do espaço de elementos finitos. Ao invés de usar funções lineares por partes, a técnica de *elementos finitos multiescala* usa funções que resolvem localmente (em cada elemento) a equação em questão.

Apresentamos aqui as idéias no caso unidimensional. Em quase todos os aspectos, incluindo a análise de erro, a extensão para duas dimensões é natural. Comentamos ao fim desta seção alguns pontos onde esta generalização não é trivial.

Nós começamos a definir o método construindo as funções de base. Seja ψ_i tal que

$$-\frac{d}{dx} \left(a(x/\epsilon) \frac{d\psi_i}{dx}(x) \right) = 0 \quad \text{em } \cup_{j=1}^{N+1} (x_{j-1}, x_j), \quad \psi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{se } i \neq j, \end{cases} \quad (4.13)$$

para $i = 1, \dots, N$. Definimos então o espaço de elementos finitos multiescala como sendo

$$V_0^{h,\epsilon} = \text{span} \{\psi_1, \dots, \psi_N\}.$$

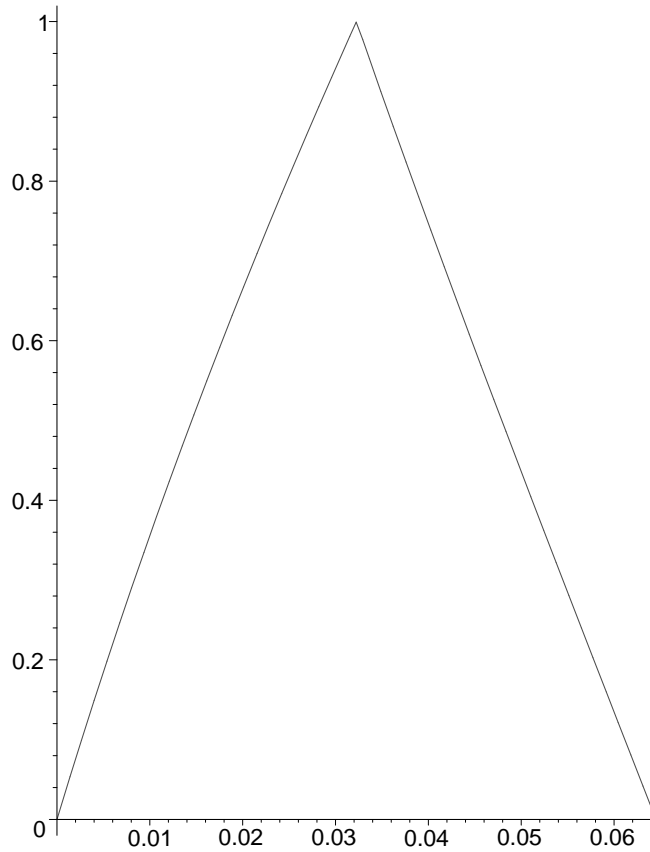


Fig. 4.13: Gráficos de ψ_1 com $\epsilon = 1/4$ e $h = 1/32$.

Uma função de base típica é apresentada na figura 4.13 para $\epsilon = 1/4$ e $h = 1/32$. Note que a função se parece muito com a função de base do método de elementos finitos usual. Isto se explica pois neste caso o parâmetro de malha h é bem menor do que ϵ , e a função de base tradicional ainda funciona bem, vide figura 4.9. No caso oposto, quando ϵ é bem menor que h , temos que a função de base tem caráter oscilatório, como é mostrado na figura 4.14, para $\epsilon = 1/128$ e $h = 1/32$.

Usando o espaço acima definido, o método de elementos finitos multiescala busca $u^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}$ tal que

$$\int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{du^{h,\epsilon}}{dx}(x) \frac{dv^{h,\epsilon}}{dx}(x) \right) dx = \int_0^1 f(x) v^{h,\epsilon}(x) dx \quad \text{para todo } v^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}. \quad (4.14)$$

Matricialmente, temos que se $u^{h,\epsilon}(x) = \sum_{i=1}^N u_i^\epsilon \psi_i(x)$, então $\mathbf{u}^\epsilon = (u_1^\epsilon, \dots, u_N^\epsilon)^T \in \mathbb{R}^N$ é tal que

$$\mathbf{M}^\epsilon \mathbf{u}^\epsilon = \mathbf{f}^\epsilon,$$

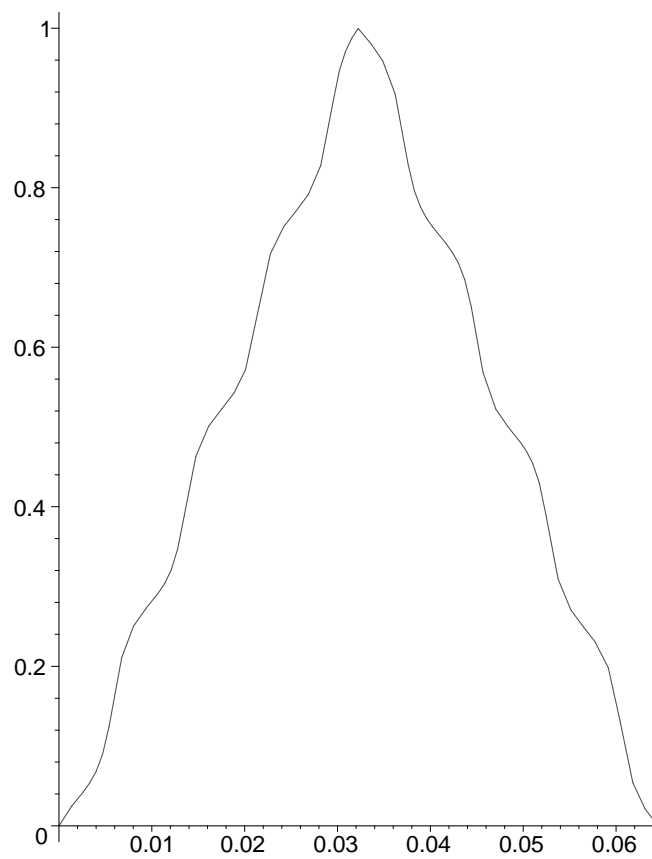


Fig. 4.14: Gráficos de ψ_1 com $\epsilon = 1/128$ e $h = 1/32$.

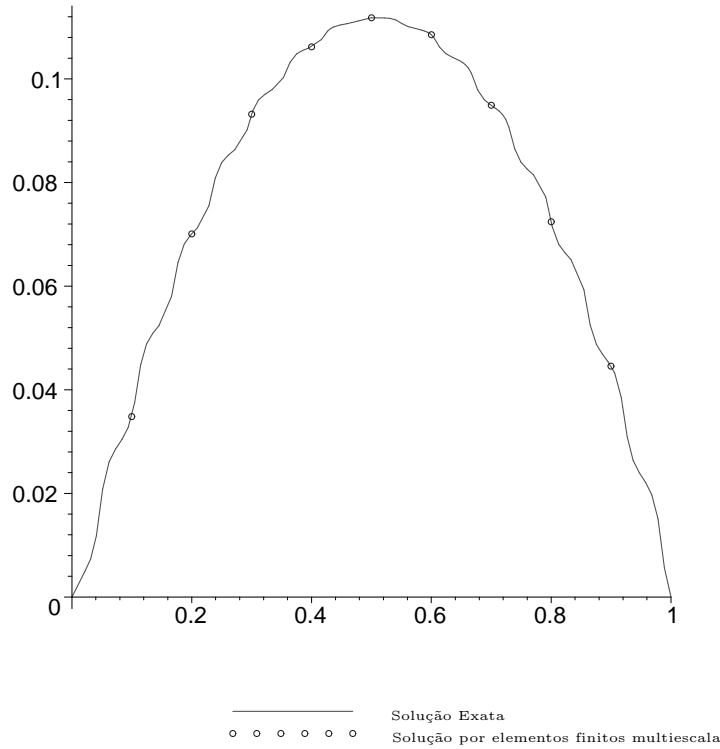


Fig. 4.15: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos multiescala, com $\epsilon = 1/16$ e $h = 1/10$.

onde a matriz $\mathbf{M}^\epsilon = (M_{i,j}^\epsilon) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e o vetor $\mathbf{f}^\epsilon = (f_1^\epsilon, \dots, f_N^\epsilon)^T \in \mathbb{R}^N$ são dados por

$$M_{i,j}^\epsilon = \int_0^1 \left(a(x/\epsilon) \frac{d\psi_i}{dx}(x) \frac{d\psi_j}{dx}(x) \right) dx, \quad f_j^\epsilon = \int_0^1 f(x) \psi_j(x) dx.$$

Testando então a aproximação para $\epsilon = 1/16$ e $h = 1/10$, vemos na figura 4.15 que a solução aproximada pelo método de elementos finitos multiescala interpola a solução exata nos nós. Isto não é uma coincidência, é apenas uma característica em uma dimensão de métodos de elementos finitos que utilizam funções que são soluções locais da própria EDP que estão aproximando. Em dimensões maiores essa propriedade é (infelizmente) perdida.

4.4.1 Análise de erro

A análise de erro desenvolvida em [11] baseia-se no Lema de Cea, como feito na subseção 4.3.2.

Lema 4.4.1 (Lema de Cea) *Sejam u^ϵ e $u^{h,\epsilon}$ soluções de (4.1) e (4.14). Então existe uma constante universal c tal que*

$$\|u^\epsilon - u^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \leq c \frac{\beta}{\alpha} \|u^\epsilon - v^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \quad \text{para todo } v^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}.$$

No método de elementos finitos clássico, encontramos uma função em V_0^h que “aproximasse bem” u^ϵ e estimamos o erro de aproximação. No caso, a função em V_0^h era o interpolador de u^ϵ . Utilizando o Lema de Cea (Lema 4.3.1) obtivemos a estimativa final.

Similarmente, o desafio agora é achar uma aproximação para u^ϵ no espaço multiescala $V_0^{h,\epsilon}$. A análise divide-se em dois casos distintos, dependendo se a malha é refinada o suficiente ou não, em relação a ϵ .

Caso I: $h \ll \epsilon$. Neste caso em que assumimos a malha suficientemente refinada, obtemos a seguinte resultado de convergência, que, a menos de constantes, é o mesmo que o do Teorema 4.3.2. Ou seja, para malhas refinadas, o método multiescala funciona tão bem quanto o método tradicional.

Teorema 4.4.2 *Seja $f \in L^2(0,1)$, e seja u^ϵ solução de (4.1). Então existe uma constante c independente de ϵ , f, α, β tal que*

$$\|u^\epsilon - u^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \leq c \frac{\beta^3 h}{\alpha^4 \epsilon} \|f\|_{L^2(0,1)}.$$

O teorema acima segue facilmente do Lema de Cea (Lema 4.4.1) e do seguinte resultado de interpolação [11].

Lema 4.4.3 *Seja u^ϵ solução de (4.1), e seja $I^{h,\epsilon}u^\epsilon = \sum_{j=1}^N u^\epsilon(x_j)\psi_j$ interpolador de u^ϵ em $V_0^{h,\epsilon}$. Então existe uma constante c tal que*

$$\|u^\epsilon - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{H^1(0,1)} \leq c \frac{\beta^2 h}{\alpha^3 \epsilon} \|f\|_{L^2(0,1)}^2.$$

A constante C pode depender de α e β , mas é independente de ϵ e f .

Seja $u_l = I^h u^\epsilon$ interpolador de u^ϵ em V_0^h . Então a teoria clássica de interpolação nos diz que

$$\|u^\epsilon - u_l\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)} \leq ch |u^\epsilon|_{H^2(x_{j-1}, x_j)}. \quad (4.15)$$

Como a desigualdade triangular nos dá

$$\|u^\epsilon - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)} \leq \|u^\epsilon - u_l\|_{H^1(0,1)} + \|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{H^1(0,1)}, \quad (4.16)$$

temos então “somente” que estimar $\|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{H^1(0,1)}$. Note que

$$\begin{aligned}
\alpha|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon|_{H^1(x_{j-1},x_j)}^2 &\leq \int_{x_{j-1}}^{x_j} \frac{d}{dx}(u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)a(x/\epsilon)\frac{d}{dx}(u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon) dx \\
&= - \int_{x_{j-1}}^{x_j} (u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)\frac{d}{dx}\left[a(x/\epsilon)\frac{d}{dx}(u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)\right] dx \\
&= - \int_{x_{j-1}}^{x_j} (u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)\frac{d}{dx}\left[a(x/\epsilon)\frac{d}{dx}u_l\right] dx \\
&= - \int_{x_{j-1}}^{x_j} (u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)\left\{\frac{d}{dx}\left[a(x/\epsilon)\frac{d}{dx}(u_l - u^\epsilon)\right] - f\right\} dx \\
&= \int_{x_{j-1}}^{x_j} \frac{d}{dx}(u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)a(x/\epsilon)\frac{d}{dx}(u_l - u^\epsilon) dx + \int_{x_{j-1}}^{x_j} (u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon)f dx \\
&\leq \beta|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon|_{H^1(x_{j-1},x_j)}|u_l - u^\epsilon|_{H^1(x_{j-1},x_j)} + \|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{L^2(x_{j-1},x_j)}\|f\|_{L^2(x_{j-1},x_j)}.
\end{aligned}$$

Mas a desigualdade de Poincaré nos dá que $\|v\|_{L^2(x_{j-1},x_j)} \leq ch|v|_{H^1(x_{j-1},x_j)}$ para todo $v \in H_0^1(x_{j-1},x_j)$, e então

$$\alpha|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon|_{H^1(x_{j-1},x_j)}^2 \leq ch|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon|_{H^1(x_{j-1},x_j)}(\beta|u^\epsilon|_{H^2(x_{j-1},x_j)} + \|f\|_{L^2(x_{j-1},x_j)}).$$

Logo,

$$|u_l - I^{h,\epsilon}u^\epsilon|_{H^1(x_{j-1},x_j)} \leq c\frac{h}{\alpha}(\beta|u^\epsilon|_{H^2(x_{j-1},x_j)} + \|f\|_{L^2(x_{j-1},x_j)}).$$

De (4.16) e (4.15) temos

$$\|u^\epsilon - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{H^1(x_{j-1},x_j)} \leq ch\left(1 + \frac{\beta}{\alpha}\right)|u^\epsilon|_{H^2(x_{j-1},x_j)} + c\frac{h}{\alpha}\|f\|_{L^2(x_{j-1},x_j)}.$$

Para encontrar uma estimativa global, basta somar a desigualdade acima em todos os elementos:

$$\begin{aligned}
\|u^\epsilon - I^{h,\epsilon}u^\epsilon\|_{H^1(0,1)}^2 &\leq ch^2 \sum_{j=1}^N \left[\left(1 + \frac{\beta}{\alpha}\right)^2 |u^\epsilon|_{H^2(x_{j-1},x_j)}^2 + \frac{1}{\alpha^2} \|f\|_{L^2(x_{j-1},x_j)}^2 \right] \\
&= ch^2 \left[\left(1 + \frac{\beta}{\alpha}\right)^2 |u^\epsilon|_{H^2(0,1)}^2 + \frac{1}{\alpha^2} \|f\|_{L^2(0,1)}^2 \right] \leq c\frac{\beta^4}{\alpha^6} \frac{h^2}{\epsilon^2} \|f\|_{L^2(0,1)}^2,
\end{aligned}$$

onde usamos a estimativa de regularidade (4.11), e c é uma constante universal. Tirando raízes dos dois lados da equação obtemos o resultado.

□

Caso II: $\epsilon \ll h$. Mesmo quando ϵ é pequeno em relação à malha, e o método de elementos finitos lineares não funciona a contento, os elementos finitos multiescala aproximam bem a solução exata. Abaixo apresentamos uma estimativa de erro.

Teorema 4.4.4 *Seja $f \in L^2(0,1)$, e seja u^ϵ solução de (4.1). Então existe uma constante C independente de ϵ e f tal que*

$$\|u^\epsilon - u^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \leq C(\epsilon h^{-1/2} + h)\|f\|_{L^2(0,1)}.$$

Para estimar o erro de aproximação do presente método, temos que encontrar uma função em $V_0^{h,\epsilon}$ que aproxime u^ϵ para então aplicar o Lema de Cea (Lema 4.4.1). Nosso candidato é u_I , interpolador de u^0 em $V_0^{h,\epsilon}$. Note que no **Caso I** (quando $h \ll \epsilon$), tomamos como candidato o interpolador de u^ϵ , diferentemente do que fazemos agora.

Para entender porque este o método multiescala funciona bem quando $\epsilon \ll h$, é necessário usar uma melhor aproximação assintótica (inclusive com estimativas de erro) de u^ϵ . Isto é possível se calcularmos os primeiros termos da expansão assintótica. De fato, seja u^0 como acima e H solução de

$$-\frac{d}{dy} \left(a(y) \frac{dH}{dy}(y) \right) = \frac{da}{dy}(y) \quad \text{em } (0,1),$$

$$H \text{ periódica com período } 1, \quad \int_0^1 H(y) dy = 0.$$

Além disso, seja

$$u^1(x) = -H(x/\epsilon) \frac{du^0}{dx}(x). \quad (4.17)$$

e θ tal que

$$-\frac{d}{dx} \left(a(x/\epsilon) \frac{d\theta}{dx}(x) \right) = 0 \quad \text{em } (0,1), \quad (4.18)$$

$$\theta(0) = u^1(0), \quad \theta(1) = u^1(1).$$

Temos então o seguinte resultado [14].

Teorema 4.4.5 *Assuma que $f \in L^2(0,1)$, e seja u^ϵ solução de (4.1). Sejam u^0 , u^1 e θ definidos por (4.3), (4.17) e (4.18) respectivamente. Então existe uma constante C independente de f e de ϵ tal que*

$$\|u^\epsilon - u^0 - \epsilon u^1 + \epsilon \theta\|_{H^1(0,1)} \leq C\epsilon \|u^0\|_{H^2(0,1)}.$$

Hou et al. [11] notaram que a expansão acima vale tanto para a solução exata como para os elementos da base de elementos finitos multiescala. Logo, para $i = 1, \dots, N$ a função ψ_i pode ser aproximada por

$$\psi_i^0 + \epsilon \psi_i^1 - \epsilon \theta_i,$$

onde

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_i^0 = 0 \quad \text{em } \cup_{j=1}^{N+1} (x_{j-1}, x_j), \quad \psi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{se } i \neq j, \end{cases}$$

e $\psi_i^1 = H(x/\epsilon) d\psi_i^0/dx$. Finalmente

$$-\frac{d}{dx} \left(a(x/\epsilon) \frac{d\theta_i}{dx}(x) \right) = 0 \quad \text{em } \cup_{j=1}^{N+1} (x_{j-1}, x_j), \quad \theta_i(x_j) = \psi_i^1(x_j).$$

Observação 3 Note que no caso unidimensional, ψ_i^0 nada mais é que a função de base linear por partes ϕ_i .

Como acima, u_I pode ser aproximado por $u_I^0 + \epsilon u_I^1 - \epsilon \theta_I$, onde $u_I^0 = \sum_{i=1}^N u^0(x_i) \psi_i^0$, e $u_I^1 = H(x/\epsilon) du_I^0/dx$. Além disso,

$$-\frac{d}{dx} \left(a(x/\epsilon) \frac{d\theta_I}{dx}(x) \right) = 0 \quad \text{em } \cup_{j=1}^{N+1} (x_{j-1}, x_j), \quad \theta_I(x_j) = u_I^1(x_j).$$

Temos então que

$$\begin{aligned} \|u^\epsilon - u_I\|_{H^1(0,1)} &\leq \|u^\epsilon - u^0 - \epsilon u^1 + \epsilon \theta\|_{H^1(0,1)} + \|u^0 - u_I^0\|_{H^1(0,1)} + \epsilon \|u^1 - u_I^1\|_{H^1(0,1)} \\ &\quad + \epsilon \|\theta\|_{H^1(0,1)} + \epsilon \|\theta_I\|_{H^1(0,1)} + \|u_I - u_I^0 - \epsilon u_I^1 + \epsilon \theta_I\|_{H^1(0,1)} \end{aligned} \quad (4.19)$$

A desigualdade

$$\|u^\epsilon - u^0 - u^1 + \epsilon \theta\|_{H^1(0,1)} \leq C\epsilon \|u^0\|_{H^2(0,1)} \quad (4.20)$$

é apresentada no Teorema 4.4.5. Já

$$\|u_I - u_I^0 - u_I^1 + \epsilon \theta_I\|_{H^1(0,1)} \leq C\epsilon \|u^0\|_{H^2(0,1)} \quad (4.21)$$

baseia-se no Teorema 4.4.5 e na estimativa $\|u_I^0\|_{H^2(x_{j-1}, x_j)} \leq C \|u^0\|_{H^2(x_{j-1}, x_j)}$ (ver os detalhes em [11]). Para obter

$$\|u^0 - u_I^0\|_{H^1(0,1)} \leq Ch \|u^0\|_{H^2(0,1)}, \quad (4.22)$$

basta observar que u_I^0 é a interpolação de u^0 por funções lineares por partes.

A seguir, usamos

$$\begin{aligned} \|u^1 - u_I^1\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)} &= \left\| H(\cdot/\epsilon) \frac{d(u^0 - u_I^0)}{dx} \right\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)} \leq \epsilon^{-1} \left\| \frac{dH}{dx} \right\|_{L^\infty(0,1)} \|u^0 - u_I^0\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)} \\ &+ \|H\|_{L^\infty(0,1)} \|u^0 - u_I^0\|_{H^2(x_{j-1}, x_j)} \leq C\epsilon^{-1} \|u^0 - u_I^0\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)} + C \|u^0\|_{H^2(x_{j-1}, x_j)}. \end{aligned}$$

Somando o quadrado da desigualdade acima entre $j = 1$ e $j = N + 1$ temos

$$\|u^1 - u_I^1\|_{H^1(0,1)} \leq C(\epsilon^{-1}h + 1) \|u^0\|_{H^2(0,1)}. \quad (4.23)$$

Finalmente temos

$$\|\theta\|_{H^1(0,1)} \leq C(|u^1(0)| + |u^1(1)|) \leq C \|H\|_{L^\infty(0,1)} \left(\left| \frac{du^0}{dx}(0) \right| + \left| \frac{du^0}{dx}(1) \right| \right) \leq C \|u^0\|_{H^2(0,1)}, \quad (4.24)$$

e

$$\begin{aligned} \|\theta_I\|_{H^1(x_{j-1}, x_j)}^2 &\leq Ch^{-1} (|u_I^1(x_{j-1})| + |u_I^1(x_j)|)^2 \leq Ch^{-1} \|H\|_{L^\infty(0,1)}^2 \left(\left| \frac{du_I^0}{dx}(x_{j-1}) \right| + \left| \frac{du_I^0}{dx}(x_j) \right| \right)^2 \\ &\leq Ch^{-1} \|u^0\|_{H^2(x_{j-1}, x_j)}^2. \end{aligned}$$

Somando a desigualdade acima entre $j = 1$ e $j = N + 1$, concluímos que

$$\|\theta_I\|_{H^1(0,1)} \leq Ch^{-1/2}\|u^0\|_{H^2(0,1)}. \quad (4.25)$$

(do Teorema 4.4.4) Para obtermos a estimativa, basta juntar o resultado do Lema 4.4.1 e as desigualdades (4.19)–(4.25), e o resultado de regularidade (4.11). \square

Observação 4 *O resultado do Teorema 4.4.4 é melhor que o demonstrado em [14], onde a taxa de convergência alegada é*

$$\|u^\epsilon - u^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \leq C_1 h \|f\|_{L^2(0,1)} + C_2 (\epsilon/h)^{1/2}.$$

A diferença aparece nas estimativas de θ e θ_I , que é diferente em uma ou duas dimensões.

4.4.2 Outros Comentários

Uma importante diferença entre uma e duas dimensões na técnica de elementos multiescala é que no caso bidimensional não é claro que condições de contorno deve-se impor nas arestas na definição das funções de base ψ_i , ver equação (4.13). Em uma dimensão este problema não existe, já que não existe aresta.

Uma primeira idéia no caso de elementos poligonais seria impor ψ_i linear nas arestas. Nos artigos [10, 11] surge a interessante proposta de que as funções de base também deveriam satisfazer uma “restrição unidimensional” do operador diferencial que define a EDP, ao longo das arestas. Esta proposta é *ad hoc*, assim como a definição do que é uma restrição unidimensional de um operador bidimensional, mas parece funcionar bem numericamente. A demonstração de convergência em [11] foi feita assumindo que as funções de base são lineares nas arestas.

Ainda mais recentemente, Giancarlo Sangalli aplicou a idéia de *Residual Free Bubbles* em problemas com coeficientes oscilatórios também com excelentes resultados [21]. A idéia básica de Sangalli é também fazer com que o método numérico automaticamente leve em conta as oscilações presentes no problema, e guarda forte similaridades com o método presente neste capítulo. Ver [12] onde o método de Residual Free Bubbles é brevemente descrito.

4.5 Uma dificuldade extra

Um outro problema que pode surgir quando tratamos de modelagem de meio heterogêneos, é a perda de coercividade. De fato, se α é muito pequeno em (4.1), o problema torna-se mais difícil de ser tratado. Consideramos aqui o exemplo dado por (4.2) mas com $\alpha = 0.01$, e $\epsilon = 1/8$. Na figura 4.16 mostramos o gráfico de $a(\cdot/\epsilon)$ e u^ϵ .

Mesmo para ϵ pequeno a aproximação pela solução homogeneizada já não é satisfatória. Comparando-se as figuras 4.5 e 4.17, percebe-se a deterioração da aproximação no último caso, como já era previsto pelo Teorema 4.2.1.

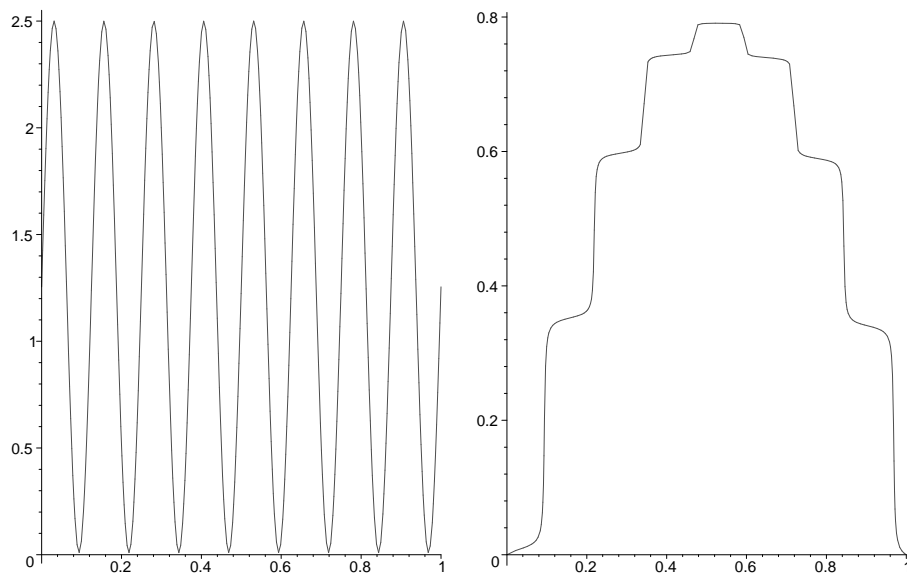


Fig. 4.16: Gráficos de $a(\cdot/\epsilon)$ e da solução exata para $\epsilon = 1/8$.

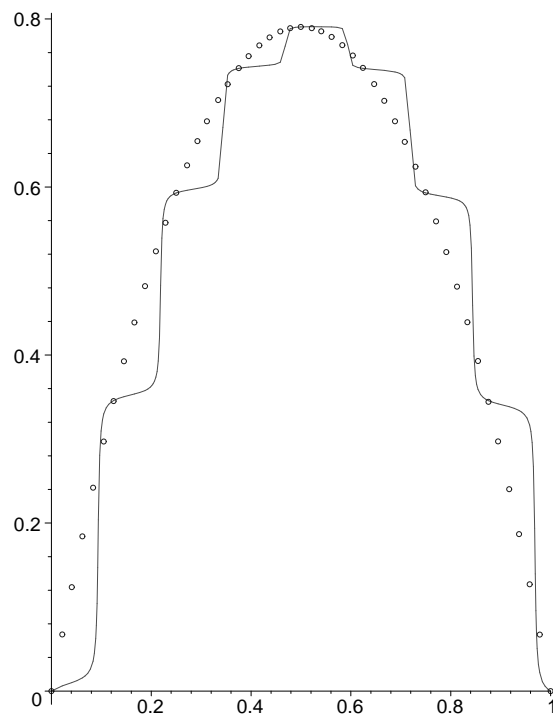


Fig. 4.17: Comparação entre as soluções exatas e homogeneizadas para $\epsilon = 1/8$.

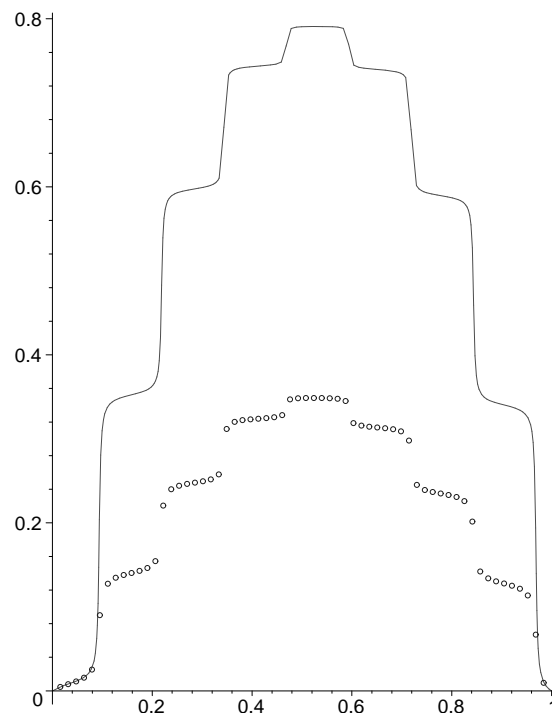


Fig. 4.18: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos, com $\epsilon = 1/8$ e $h = 1/64$.

Esta deterioração é ainda mais aparente se utilizarmos elementos finitos lineares, como mostram as figuras 4.12 e 4.18. Note que, desta vez, a origem da dificuldade não é a magnitude de ϵ , mas sim a de α . De fato, mesmo para ϵ relativamente grande, a aproximação por elementos finitos falha. Na figura 4.19 apresentamos um exemplo numérico para $\epsilon = 1/2$ e $h = 1/64$. Mais uma vez esta piora era indicada por estimativas de erro. No Teorema 4.3.2, a constante é proporcional a α^{-3} .

Finalmente, por manter a característica de interpolar a solução exata em uma dimensão, o método de elementos finitos multiescala não se degrada mesmo com α pequeno, como pode ser visto na figura 4.20.

4.6 Observações Finais

Como dito no capítulo introdutório e aqui reafirmado, o presente texto não tem a pretensão de prover uma visão aprofundada nem muito menos que esgote o tema. As referências citadas ao longo do texto (e aquelas citadas no interior destes) podem servir de ponto de partida para aqueles que desejarem uma visão mais detalhada desta desafiante área da modelagem multiescala.

Os autores esperam com o presente texto e sua aplicação na forma de um mini-

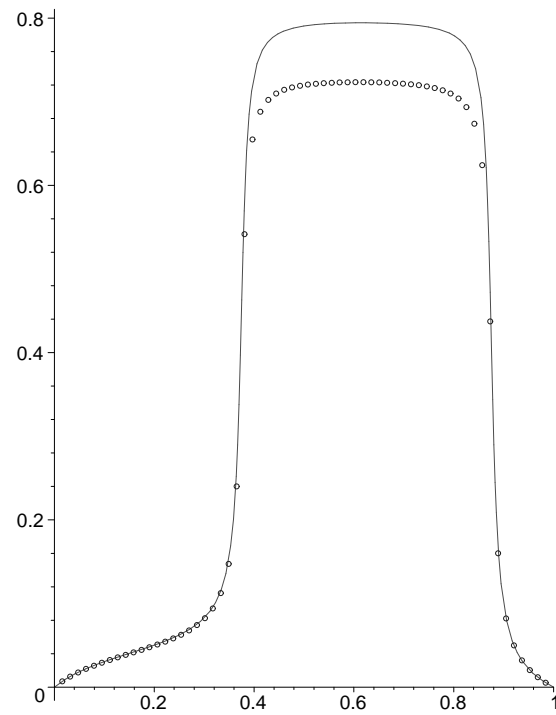


Fig. 4.19: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos, com $\epsilon = 1/2$ e $h = 1/64$.

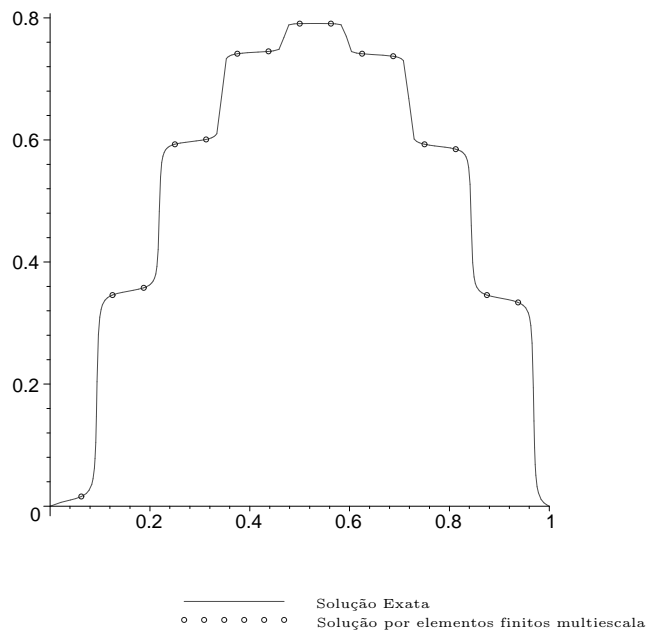


Fig. 4.20: Gráficos de u^ϵ e de sua aproximação por elementos finitos multiescala, com $\epsilon = 1/8$ e $h = 1/16$.

curso despertar o interesse para a área de modelagem multiescala voltada para aplicações que envolvem novos materiais aplicados a sistemas de engenharia. O que deve ter ficado claro ao longo desta exposição é que se está diante de uma área onde a multidisciplinaridade se faz importante a cada passo. Em particular, face ao contexto em que este texto vem sendo explorado, torna-se fundamental destacar a importância da participação da matemática aplicada. O capítulo 4, no qual técnicas são detalhadas, deixa isso muito claro.

Desta forma os autores esperam estar dando sua contribuição no sentido de motivar a formação de núcleos e grupos multidisciplinares para atuar na área que, sem sombra de dúvida, jogará um papel cada vez mais importante no mundo da alta tecnologia contemporânea.

Bibliografia

- [1] Bastos, S. F., Borges, L. M. S. A., Rochinha, F. A., Numerical and Experimental approach for Identifying Elastic Parameters in Sandwich Plates, *Shock And Vibration*, Amsterdam, **9**, 4-5, p. 193-201, 2002
- [2] Castello, D. A., Stutz, L. T., Rochinha, F. A., A Structural Defect Identification Approach Based on a Continuum Damage Model. *Computers & Structures*, **80**, p. 417-436, 2002.
- [3] Cioranescu, D. and Donato, P., An introduction to Homogenization, Oxford Lecture Series in mathematics and its Applications, Vol. 17 1999
- [4] Dawson, P.R., Computational Crystal Plasticity, *International Journal of Solid and Structures*, **37** (200), 115-130.
- [5] Ganapathysubramanian, S. and Zabarar, N., Deformation process design for control of microstructure in the presence of dynamic recrystallization and grain growth mechanisms, *Int. Journal for Solids and Structures*, **41**, **7**, 2011-2037, 2004.
- [6] Ghoniem, N.M., Busso, E.P., Kioussis, N., Huang, H., Multiscale Modelling of Nanomechanics and Micromechanics: an overview, *Philosophical Magazine*, **83** (2003), 3475-3528.
- [7] Gurtin, M. E., *An Introduction to Continuum Mechanics*, Academic Press, London, 1981.
- [8] Hashin, Z. and Shtrikman, S., A variational Approach to the theory of the Elastic Behavior of Multiphase Materials, *J. Mech. Phys. Solids*, **11**, 127-140, 1963
- [9] Hill, R., Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles, *J. Mech. Phys. Solids*, **11**, 357-372, 1963.
- [10] Hou, T.Y. and Wu, X.H., A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media, *JCP*, 134:169-189, 1997

- [11] Hou, T.Y., Wu,X.H. and Cai,Z., Convergence of a multiscale finite element method for elliptic problems with rapidly oscillating coefficients, *Math. Comp.*, Vol. 68, 227:913–943, 1999
- [12] Hou,T., Numerical Aproximation to Multiscale Solutions in PDEs, *Frontiers in numerical analysis : Durham 2002*, (James F. Blowey, Alan W. Craig, Tony Shardlow, eds.), Springer, 241–302, 2003
- [13] Michel, J.C., Moulinec, H. and Suquet, P., Effective Properties of Composite Materials with Periodic Microstructure: a Computational Approach, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **172**, 109 - 143, 1999.
- [14] Moskow,S. and Vogelius,M. First order corrections to the homogenized eigenvalues of a periodic composite medium. A convergence proof, *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, 127A:1263–1299, 1997
- [15] Nemat-Nasser, S. and Hori, M., *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, North-Holland, Amsterdam, 1999.
- [16] Phillips, R., Multiscale Modeling in the Mechanics of Materials, *Current Opinion in Solid State & Materials Science*, **3**, 6, 526-532, 1998.
- [17] Phillips, R., *Crystals, Defects and Microstructures - Modeling Across Scales*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [18] Raghavan, P. and Ghosh, S., Concurrent multi-scale analysis of elastic composites by a multi-level computational model, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, **193**, 497-538, 2004.
- [19] Reddy, J.N., *Mechanics of Laminated Plates and Shells: Theory and Analysis*, 2nd ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 2004.
- [20] Rochinha, F.A., Model Validation on Composites: Constitutive Parameters Identification, Seminar at the Workshop in Advanced Materials, Rio de Janeiro, Junho de 2003.
- [21] Sangalli,G., Capturing small scales in elliptic problems using a Residual-Free Bubbles Finite Element Method, *Multiscale Modeling and Simulation: A SIAM Interdisciplinary Journal*, Vol. 1, No. 3:485-503, 2003.
- [22] Segmueller, A. and Murakami ,M., X-ray diffraction analysis of strains and stresses in thin films, *Treatise on Material Science and Engineering*,**27**, p.23, Academic Press, New York, 1988.
- [23] Silva, M.; Borges, L. M. S. A.; Rochinha, F. A.; Carvalho, L. A. V., A Genetic Algorithm Applied to Composite Elastic Parameters Identification. *Inverse Problems In Science Engineering*, **12**, **1**, p. 17-28, 2004.

-
- [24] Terada, K., Ito, B. and Kikuchi, N., Characterization of the Mechanical behaviors of solid-fluid mixture by the homogenization method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, **153**, 223-257, 1998.
- [25] Wu, T., Lee, C.K. and Wang, R., Micro-impact Technique and its Application, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **308**, p.133, 1993.
- [26] Vemaganti, K.S., Oden, J.T., Estimation of local modeling error and goal-oriented adaptive modeling of heterogeneous materials. Part II: a computational environment for adaptive modeling of heterogeneous elastic solids, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, **190**, 6089-6124, 2001.
- [27] Zabarar, N., Course Notes of MAE212 (Mechanical Properties, Microstructures and Materials Processes, Cornell University, (2001).
- [28] Zabarar, N., Materials-by-design: A multi-length scale approach, Invited seminar at COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Março de 2004. (<http://www.mae.cornell.edu/zabarar/Publications/Publications.html>)

Índice

- Coercividade 35
- Continuidade 35
- Deformações 11,13
- Desigualdade de Poincaré 35
- Espaços de Funções
 - L^2 24
 - H^1 28
- Elástico 13
- Elementos Finitos 28–46
 - Elementos Finitos Lineares 28–36, 44–46
 - Elementos Finitos Multiescala 36–44, 46
 - Malha 28
- Equilíbrio 7
- Estimativas
 - de regularidade 36
 - de erro de modelagem por homogeneização 24
 - de erro de modelagem por elementos finitos lineares 36
 - de erro de modelagem por elementos finitos multiescala 40, 42
- Formas Fraca 28
- Formas Bilineares 30
- Funções Lineares por Partes 28
- Homogeneização 24, 24, 42, 43
- Lema de Cea 35, 39, 40 42
- Multiescala 15, 22, 36
- Modelo Unidimensional 21
- Residual Free Bubbles 44