Trabalho apresentado no XXXIX CNMAC, Uberlândia - MG, 2019.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Solução de problemas anisotrópicos escalares estacionários através do Método dos Elementos de Contorno

Hercules de Melo Barcelos¹ Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PPGEM/UFES, Vitória, ES Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia, Inmetro, Xerém, RJ Carlos Friedrich Loeffler² Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PPGEM/UFES, Vitória, ES João Paulo Barbosa³ Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PPGEM/UFES, Vitória, ES Instituto Federal do Espírito Santo, IFES, São Mateus, ES

Resumo. Este trabalho apresenta uma formulação do Método dos Elementos de Contorno desenvolvida para aplicação em problemas anisotrópicos escalares bidimensionais. Posto que o valor das propriedades constitutivas varia de acordo com a direção coordenada, para a obtenção de uma equação integral na forma inversa faz-se uma transformação adequada de variáveis, com a qual o modelo matemático se torna mais simples, expressando-se como se fosse um problema isotrópico. Neste espaço transformado pode-se deduzir e utilizar uma solução fundamental onde o laplaciano é nulo. A validação dos resultados será feita utilizando o Método dos Elementos Finitos (MEF) como referência.

Palavras-chave. Método dos Elementos de Contorno, Interpolação Linear, Problemas Anisotrópicos.

1 Introdução

Em muitas aplicações mecânicas as propriedades do material utilizado não são consideradas isotrópicas. Os exemplos mais comuns ocorrem em substâncias não cristalinas, tais como a madeira e as rochas sedimentares. Enquadram-se nesta classe os materiais compósitos e os materiais ditos funcionais, que resultam numa estrutura constituída de dois ou mais materiais. Também há perda de isotropia resistiva nos materiais metálicos que se sujeitam a processos de conformação plástica profunda, muito comuns na engenharia.

Matematicamente, o modelo aplicável a esses casos se enquadra no contexto da Equação de Campo Escalar Generalizada segundo Loeffler [9]. Tal como ocorre nos problemas térmicos, usam-se modelos matemáticos de difusividade hidráulica baseados na Equação de Darcy, segundo Caputo [4], para a simulação do escoamento. Na ausência de métodos

¹engercules@gmail.com

²carlosloeffler@bol.com.br

³jpbarbosa@ifes.edu.br

analíticos capazes de resolver tais problemas, o uso de técnicas numéricas tem sido a ferramenta imediata de solução. O Método dos Elementos de Contorno (MEC) é uma dessas técnicas, cuja retrospectiva é bem-sucedida em muitas aplicações pertinentes à teoria de campo escalar segundo Brebbia et al [1].

Diversas formulações baseadas nos fundamentos do MEC já foram desenvolvidas para resolver casos fisicamente não homogêneos, como exemplo tem-se o trabalho de Wang et al [12]. Curiosamente, ainda não foram feitos os mesmos esforços com o MEC no contexto dos modelos anisotrópicos. Algumas exceções dizem respeito ao trabalho de Zhou et al [13] e certas técnicas em que a equação de governo anisotrópica é transformada num modelo isotrópico, escrito com uma Equação de Poisson ou como uma Equação de Helmholtz conforme Partridge [10]. No entanto, essas transformações requerem a solução de integrais de domínio por técnicas de aproximação, que comumente usam funções de base radial, como descritas por Buhmann [2], e a abordagem da Dupla Reciprocidade conforme Partridge et al [10]. Surpreendentemente, há ausência de bibliografia mais recente nessa linha de pesquisa usando o MEC.

Visando futuras aplicações em engenharia de reservatórios, este trabalho apresenta a modelagem matemática e a aplicação do MEC em problemas anisotrópicos bidimensionais utilizando uma formulação que resolve o problema num espaço matemático transformado, onde se pode utilizar uma solução fundamental isotrópica correlata. Para avaliação da qualidade dos resultados obtidos utiliza-se como referência uma solução obtida com um método de elementos finitos.

2 Equação de governo em problemas escalares anisotrópicos

O fluxo estacionário $\mathbf{v}(x_1, x_2)$ expresso em duas dimensões e de grandezas como as energias térmica, elétrica ou representando um escoamento de fluidos através de regiões porosas é dado pela seguinte equação (1)

$$\mathbf{v} = -\mathbf{K}\nabla u(\mathbf{X}),\tag{1}$$

onde **K** é um diádico ou tensor de segunda ordem, representativo das propriedades constitutivas do meio e $u(\mathbf{X})$ é um potencial escalar. Nos casos em que o domínio é homogêneo, **K** não depende da posição no interior do domínio $\Omega(\mathbf{X})$ representado no sistemas de coordenadas $\mathbf{X} = X(x_1, x_2)$, mas sua composição depende da orientação das propriedades no sistema fundamental como, por exemplo, o cristal no caso de materiais sólidos. No caso de problemas térmicos a relação dada pela equação (1) é chamada de Lei de Fourier; em meios porosos é denominada de Lei de Darcy; em casos de dispersão é chamada Lei de Fick. Explicitamente, a equação (1) pode ser escrita em sua forma matricial conforme a equação (2)

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u(\mathbf{X})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u(\mathbf{X})}{\partial x_2} \end{bmatrix}, \qquad (2)$$

em que o tensor \mathbf{K} está numa forma geral, onde a sua composição é feita por diferentes coeficientes, cujo valor depende da constituição cristalina do material da direção crista-

lográfica. Segundo Callister [3], esta orientação nas propriedades é conhecida por anisotropia, sendo associada à diferença do espaçamento atômico ou iônico em função da direção cristalográfica. A extensão e a magnitude dos efeitos da anisotropia em materiais cristalinos são funções da simetria da estrutura cristalina.

A diagonalização do tensor \mathbf{K} , ou seja, o encontro de suas possíveis direções preferenciais depende não apenas do sistema cristalino, mas também da relação deste com o sistema de coordenadas utilizado. É possível diagonalizar diádicos não simétricos, desde que certas condições matemáticas sejam obedecidas conforme Friedberg et al [6], que envolvem propriedades do polinômio mínimo associado ao tensor \mathbf{K} , relativamente fáceis de aplicar aos casos em que o tensor esteja em duas ou três dimensões conforme Hofmann et al [7]. Em termos físicos, tal operação consiste em encontrar uma orientação estratégica para os eixos coordenados. Admitindo-se que o tensor \mathbf{K} seja simétrico, a diagonalização será sempre possível e para fazer isto, deve-se escrever o problema de autovalor associado dado pela equação (3)

$$\mathbf{K}\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x},\tag{3}$$

3

sendo **x** um vetor que determina as direções correspondentes que formarão as coordenadas do sistema, coincidindo com os eixos coordenados principais, onde o tensor **K** fica diagonal sendo agora representado por $\overline{\mathbf{K}}$. As raízes λ constituem as propriedades nas direções espaciais particulares em que o diádico constitutivo fica diagonal e a Figura 1 apresenta o modelo correspondente.



Figura 1: Problema bidimensional anisotrópico definido no domínio $\Omega(\mathbf{X})$ com condições do tipo Dirichlet $\Gamma_u(\mathbf{X})$ e Neumann $\Gamma_q(\mathbf{X})$.

Devido a formulação variacional do MEC, a fronteira da Figura 1 pode ser dividida em $\Gamma_u(\mathbf{X}) \in \Gamma_q(\mathbf{X})$ onde a primeira contém a condição de contorno de Dirichlet $u(\mathbf{X})$, e a segunda compreende a condição de contorno de Neumann $q(\mathbf{X})$ com relação à direção normal externa unitária $n(\mathbf{X})$ nesta fronteira. As constantes $\overline{K}_{11} \in \overline{K}_{22}$ expressam a difusividade nas direções de ortotropia.

Considerando-se também as propriedades homogêneas, a condição de estado estacionário e a ausência de fontes ou sorvedouros, ao se aplicar a equação da continuidade ou outra equação equivalente na equação (1) o problema proposto resulta em

$$\nabla \cdot [\overline{\mathbf{K}} \nabla u(\mathbf{X})] = 0, \tag{4}$$

4

tomado em seguinda o sistema coordenado em coincidência com as direções cristalográficas principais, simplifica-se a equação (4) expressando-a pela equação (5)

$$\overline{K}_{11}\frac{\partial^2 u(\mathbf{X})}{\partial x_1^2} + \overline{K}_{22}\frac{\partial^2 u(\mathbf{X})}{\partial x_2^2} = \nabla_{\overline{\mathbf{K}}}^2[u(\mathbf{X})] = 0.$$
(5)

3 Desenvolvimento do modelo matemático do MEC

O MEC se baseia na adoção de uma solução fundamental $u^*(\xi; \mathbf{X})$ correlata à equação (5), que envolve a presença de uma fonte concentrada num ponto ξ no domínio bidimensional $\Omega(\mathbf{X})$, fonte essa expressa pela função Delta de Dirac $\Delta(\xi; \mathbf{X})$ no lado direito da equação (6)

$$\overline{K}_{11}\frac{\partial^2 u^*(\xi; \mathbf{X})}{\partial x_1^2} + \overline{K}_{22}\frac{\partial^2 u^*(\xi; \mathbf{X})}{\partial x_2^2} = -\Delta(\xi; x_1)\Delta(\xi; x_2).$$
(6)

A equação (6) não apresenta uma solução adequada para $u^*(\xi; \mathbf{X})$ neste sistema de coordenadas; contudo, considerando outro sistema de coordenadas, dito $\mathbf{Z} = Z(z_1, z_2)$, em que $z_i = x_i / \sqrt{\overline{K_{ii}}}$, a fonte concentrada dada pelo Delta de Dirac pode ser expressa pela equação (7)

$$\frac{\partial^2 U^*(\xi; \mathbf{Z})}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2 U^*(\xi; \mathbf{Z})}{\partial z_2^2} = -\Delta(\xi; z_1 \sqrt{\overline{K}_{11}}) \Delta(\xi; z_2 \sqrt{\overline{K}_{22}}), \tag{7}$$

sendo similar ao problema fundamental de Laplace, mas representa o problema correlato anisotrópico num outro sistema de coordenadas ou , mais formalmente, representa uma transformação linear isomórfica segundo Domingues et al [5]. Neste espaço transformado tem-se pela equação (8) que

$$U^{*}(\xi; \mathbf{Z}) = \frac{1}{2\pi(\sqrt{\overline{K}_{11}\overline{K}_{22}})ln[\sqrt{(z_{1}^{2}+z_{2}^{2})}]}; Q^{*}(\xi; \mathbf{Z}) = -\frac{z_{1}n_{1}(\mathbf{Z}) + z_{2}n_{2}(\mathbf{Z})}{2\pi(\sqrt{\overline{K}_{11}\overline{K}_{22}})(z_{1}^{2}+z_{2}^{2})}, \quad (8)$$

onde $U^*(\xi; \mathbf{Z})$ representa a solução fundamental correlata à equação (7) e $Q^*(\xi; \mathbf{Z})$ a sua derivada normal no sistema \mathbf{Z} de coordenadas, obtidas pelo desenvolvimento do MEC segundo Brebia et al [1].

A equação (5) não apresenta o operador laplaciano, usual no contexto do MEC; contudo, é importante utilizar um problema fundamental isotrópico. Assim, é necessário reescrever o potencial $u(\mathbf{X})$ e o operador $\nabla^2_{\overline{\mathbf{K}}}()$ para um outro grupo que seja imagem do domínio real e nele esteja atuando o operador laplaciano, desta forma pode-se demostrar pela equação (9) que

$$\nabla_{\overline{\mathbf{K}}}^2 u(\mathbf{X}) = \nabla^2 U(\mathbf{Z}),\tag{9}$$

mantendo, contudo, as seguintes relações conforme a equação (10) e pela regra da cadeia segundo a equação (11)

$$\frac{\partial z_1}{\partial x_1} = \frac{1}{\sqrt{\overline{K}_{11}}}; \frac{\partial z_2}{\partial x_2} = \frac{1}{\sqrt{\overline{K}_{22}}},\tag{10}$$

5

$$\frac{\partial U(\mathbf{Z})}{\partial z_1} = \sqrt{\overline{K}_{11}} \frac{\partial u(\mathbf{X})}{\partial x_1}; \frac{\partial U(\mathbf{Z})}{\partial z_2} = \sqrt{\overline{K}_{22}} \frac{\partial u(\mathbf{X})}{\partial x_2}.$$
 (11)

O problema fundamental proposto pela equação (9), em conjunto com a sua solução fundamental $U^*(\xi; \mathbf{Z})$ e sua derivada $Q^*(\xi; \mathbf{Z})$, pode ser associado à forma integral inversa sobre o domínio isotrópico $\Omega(\mathbf{Z})$, conforme mostrado pela equação (12)

$$\int_{\Gamma(\mathbf{Z})} Q(\mathbf{Z}) U^*(\xi; \mathbf{Z}) d\Gamma(\mathbf{Z}) - \int_{\Gamma(\mathbf{Z})} U(\mathbf{Z}) Q^*(\xi; \mathbf{Z}) d\Gamma(\mathbf{Z}) + \int_{\Omega(\mathbf{Z})} U(\mathbf{Z}) \nabla^2 U^*(\xi; \mathbf{Z}) d\Omega(\mathbf{Z}) = 0.$$
(12)

Nesta última equação, $U(\mathbf{Z}) \in Q(\mathbf{Z})$ correspondem aos valores de potencial e derivada, podendo conter condições conhecidas ou não. Segundo Kythe [8], tem-se neste novo sistema uma solução para a última integral de domínio presente na equação (12) conforme a equação (13) onde

$$-\int_{\Omega(\mathbf{Z})} U(\mathbf{Z})\Delta(\xi; z_1\sqrt{\overline{K}_{11}})\Delta(\xi; z_2\sqrt{\overline{K}_{22}})d\Omega(\mathbf{Z}) = -\frac{1}{\sqrt{\overline{K}_{22}\overline{K}_{22}}}C(\xi)U(\xi).$$
(13)

Na equação (13) o coeficiente $C(\xi)$ advém da aplicação das condições de Holder para análise do potencial em pontos fonte limítrofes ao contorno, sendo relacionado à suavidade deste conforme Brebbia et al [1]. Após aplicar o processo clássico de discretização do MEC segundo Brebbia et al [1] sobre o domínio $\Omega(\mathbf{Z})$, utilizando as equações (12) e (13) obtêm-se o seguinte sistema matricial para m pontos de discretização expresso pela equação (14)

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{1m} \\ H_{m1} & H_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{1m} \\ G_{m1} & G_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_m \end{bmatrix},$$
 (14)

onde os coeficientes H e G estão relacionados à integração dos núcleos das integrais dadas nas equações (12) e (13). Ressalta-se que os valores relativos a $Q(\mathbf{Z})$ devem ser reescritos para o sistema de coordenadas original obedecendo a regra da cadeia apresentada na equação (11).

4 Exemplo de simulação

A Figura 2 deste exemplo apresenta as devidas condições de contorno do problema, sendo constituído de uma chapa anisotrópica quadrada, com $\overline{K}_{11} = 12$ e $\overline{K}_{22} = 3$, engastada em $x_1 = 0$ com fluxo prescrito em $x_1 = L$. Na simulação com o MEC são utilizadas malhas com 40, 80, 160, 320 e 640 elementos lineares de contorno com nós duplos nos cantos geométricos do domínio. Para avaliação da precisão da resposta foi utilizada uma malha estruturada do Método dos Elementos Finitos compreendendo 4096 elementos triangulares e 2113 pontos nodais, dos quais, 128 pontos estarão sobre o contorno. Os pontos analisados no contorno para a medição do erro relativo percentual dos potenciais $u(\mathbf{X})$ são aqueles onde x > 0; já para a derivada $q(\mathbf{X})$ e o seu fluxo $\overline{K}_{11}q(\mathbf{X})$ os pontos analisados estão sobre x = 0. A Figura 3 apresenta a curva de erro relativo percentual ou derivada entre os métodos, dividindo esta média pelo maior valor MEF calculado.

 $\mathbf{6}$



Figura 2: Problema bidimensional anisotrópico para o exemplo com condições de contorno tipo Dirichlet $\Gamma_u(\mathbf{X})$ e Neumann $\Gamma_q(\mathbf{X})$.



Figura 3: Curvas de erro relativo percentual para o potencial, derivada e fluxo do caso anisotrópico.

5 Conclusões

A transformação do modelo anisotrópico num modelo isotrópico através da escolha de um novo sistema de variáveis conduziu à simplificação do operador diferencial e na obtenção de uma solução fundamental correlata. Tais alterações revelaram-se imprescindíveis para o MEC pudesse gerar soluções numéricas simples e relativamente eficientes, como mostrou a comparação com o MEF, para os problemas anisotrópicos escalares. Em síntese, a ideia de solucionar problemas anisotrópicos através da obtenção do seu operador equivalente isotrópico, evidenciou-se bastante adequada. Com relação aos resultados, há uma excelente concordância entre o MEC com MEF. Naturalmente, como acontece praticamente com todos os métodos numéricos, os valores dos fluxos apresentaram maiores discrepâncias (vide Figura 3), pois além de serem mais sensíveis, são calculados com precisão menor pelos métodos típicos de domínio, como o MEF e o Método das Diferenças Finitas, pois são obtidos por aproximações feitas a partir do potencial calculado. No MEC, por ser um método misto, as derivadas parciais no contorno são calculadas simultanea-

7

mente com os potenciais como visto no sistema matricial apresentado na equação (14), contudo estas devem ser transferidas para o sistema de coordenadas \mathbf{X} através da regra da cadeia apresentada na equação (11).

Referências

- [1] C. A. Brebbia, J. C. F. Telles and L. C. Wrobel. *Boundary Element Techniques, Theory and Applications in Engeniering*, Springe-Verlag, Berlin, 1984.
- [2] M. D. Buhmann. Radial Basis Function: Theory and Implementations, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [3] W. D. Callister. *Materials Science and Engineering: An Introduction*, Jonh Wiley and Sons Ltd Press, 7th edition, New Jersey, 2007.
- [4] H. P. Caputo. Mecânica dos solos e suas aplicações, Editora LTC, 6^a Edição, Rio de Janeiro, 1988.
- [5] H. H. Domingues e G. Iezzi. Álgebra Moderna. Editora Saraiva S.A, 4^a Edição, São Paulo, 2003.
- [6] S. H. Friedberg, A. J. Insel and L. E. Spencer. *Linear Algebra*, prentice hall, New Jersey, 1979.
- [7] K. Hoffmann and R. Kunze. Algebra Linear, Livros técnicos e científicos, Rio de janairo, 1976.
- [8] P. C. Kythe. Introduction to Boundary Element Methods, CRC Press, 1st edition, Florida, 1995.
- [9] C. F. Loeffler. Modelos Mecânicos Derivados da Equação de Campo Escalar Generalizada, Revista Militar de Ciência e Tecnolongia, Biblioteca do Exército, 4:24–38, 1992.
- [10] P.W. Partridge. Convective Problems using the Boundary Element Dual Reciprocity Method with and without Transform Techniques, it In: CILAMCE XX, São Paulo, 1999.
- [11] M. M. Perez and L. C. Wrobel. A general integral equation formulatin for homogeneous orthotropic potential problems, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 10:323–332, 1992.
- [12] H. Wang, Q. H. Qin and Y. L. Kang. A new meshless method for steady state heat conduction problems in anisotropic and inhomogeneous media, Archive of Applied Mechanics, 74:563–579, 2005.
- [13] H. L. Zhou, Y. Tian, B. Yu and Z. R. Niu. The natural boundary integral equation of the orthotropic potential problem, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 62:186–192, 2015.