

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
ESCOLA DE ENGENHARIA
MESTRADO PROFISSIONAL EM MONTAGEM INDUSTRIAL

VICTOR WRIEDT SAPUCAIA

**FORMULAÇÃO DE ELEMENTOS DE CONTORNO BASEADA EM PIXELS PARA
DETERMINAÇÃO DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MATERIAIS
HETEROGÊNEOS**

Niterói, RJ

2021

VICTOR WRIEDT SAPUCAIA

**FORMULAÇÃO DE ELEMENTOS DE CONTORNO BASEADA EM PIXELS PARA
DETERMINAÇÃO DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MATERIAIS
HETEROGÊNEOS**

Dissertação apresentada ao Mestrado Profissional em Montagem Industrial da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Montagem Industrial. Área de Concentração: Montagem Industrial.

Orientador:
Prof. Dr. techn. André Maués Brabo Pereira
Coorientador:
Prof. Dr. Ricardo Leiderman

Niterói, RJ
2021

Ficha catalográfica automática - SDC/BEE
Gerada com informações fornecidas pelo autor

S241f Sapucaia, Victor Wriedt
FORMULAÇÃO DE ELEMENTOS DE CONTORNO BASEADA EM PIXELS PARA
DETERMINAÇÃO DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MATERIAIS
HETEROGÊNEOS / Victor Wriedt Sapucaia ; André Maués Brabo
Pereira, orientador ; Ricardo Leiderman, coorientador.
Niterói, 2021.
49 f.

Dissertação (mestrado profissional)-Universidade Federal
Fluminense, Niterói, 2021.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PMI.2021.mp.14065044758>

1. Homogeneização Numérica. 2. Condutividade Térmica
Efetiva. 3. Método dos Elementos de Contorno. 4.
Decomposição do Domínio. 5. Produção intelectual. I.
Pereira, André Maués Brabo, orientador. II. Leiderman,
Ricardo, coorientador. III. Universidade Federal Fluminense.
Escola de Engenharia. IV. Título.

CDD -

VICTOR WRIEDT SAPUCAIA

**FORMULAÇÃO DE ELEMENTOS DE CONTORNO BASEADA EM PIXELS PARA
DETERMINAÇÃO DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA EFETIVA DE MATERIAIS
HETEROGÊNEOS**

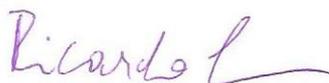
Dissertação apresentada ao Mestrado Profissional em Montagem Industrial da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Montagem Industrial. Área de Concentração: Montagem Industrial.

Aprovada em 26 de fevereiro de 2021.

BANCA EXAMINADORA



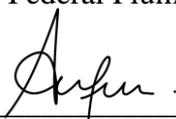
Prof. Dr. techn. André Maués Brabo Pereira - Orientador
Universidade Federal Fluminense (UFF)



Prof. Dr. Ricardo Leiderman - Coorientador
Universidade Federal Fluminense (UFF)



Prof.^a. Dr.^a. Janine Domingos Vieira
Universidade Federal Fluminense (UFF)



Prof. Dr. Anderson Pereira
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio)

Niterói, RJ
2021

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por ter me dado forças para concluir este projeto, sem Ele nada seria possível.

À minha esposa, Stephanie, pelo companheirismo, incentivo, apoio, e paciência em todas as realizações dos meus sonhos. Essa conquista também é sua, meu amor.

Agradeço ao meu pai Helio e minha mãe Mirna por todo amor e cuidados no passado para que hoje eu possa ter uma trajetória repleta de oportunidades. Vocês os pilares da minha formação como ser humano. Dedico também aos meus avós, irmãos, padrasto e madrasta.

Sou grato ao professor e amigo André pelo incentivo durante todo o projeto. Sua motivação tem sido fundamental no meu desenvolvimento. Você esteve sempre disponível a compartilhar todo o seu vasto conhecimento.

Agradeço também ao meu professor e coorientador, Ricardo, pelas correções e ensinamentos neste projeto.

Agradeço a esta universidade e todo o corpo de docentes do Curso de Mestrado Profissional em Montagem Industrial pela dedicação e cooperação.

Agradeço aos colegas do antigo Laboratório de Simulações Computacionais, em especial ao Hugo Bastos, por trabalhado comigo no início deste projeto. Agradeço também aos novos colegas de trabalho do Laboratório de Computação Científica, foi uma grata surpresa conhecê-los, espero ainda muitas parcerias em trabalhos futuros.

*A frase mais perigosa é:
“Nós sempre fizemos assim.”
(Grace Hopper)*

RESUMO

Essa dissertação tem como objetivo desenvolver uma formulação do Método dos Elementos de Contorno Simétrico de Galerkin (MEC) baseada em *Pixels* para calcular a condutividade térmica efetiva de materiais heterogêneos. Esta formulação utiliza a técnica de Decomposição de Domínio para subdividir a imagem do material em diversos subdomínios, sendo o tamanho máximo de cada subdomínio o tamanho de um *Pixel*. Como o MEC fornece uma matriz simétrica positiva definida são utilizadas as técnicas de Elemento-por-Elemento (EPE) e o Método do Gradiente Conjugado Precondicionado (GCP) para resolver de forma eficiente o sistema de equações lineares. Também como forma de aumentar a convergência da condutividade térmica efetiva é empregada a técnica de Condições de Contorno Periódicas. De forma a validar a formulação proposta, utiliza-se uma comparação com um método tradicional como o Métodos dos Elementos Finitos (MEF) para três modelos distintos: placa com inclusões circulares periódicas (modelo sintético com solução analítica), placa com inclusões quadradas periódicas (modelo sintético) e uma amostra de ferro fundido nodular. Os resultados adquiridos para os três exemplos indicam que, para o mesmo nível de discretização, o MEC foi mais preciso do que o MEF.

Palavras-chave: Homogeneização Numérica, Condutividade Térmica Efetiva, Método dos Elementos de Contorno, Decomposição do Domínio, Gradiente Conjugado Precondicionado, Modelagem Baseada em Imagens.

ABSTRACT

This dissertation aims to develop information about the Symmetric Galerkin Boundary Element Method (BEM) based on pixels to calculate the effective thermal conductivity of heterogeneous materials. This formulation used the Domain Decomposition technique to subdivide the image of the material in several subdomains, the maximum size of each subdomain being the size of a pixel. As the BEM offers a symmetric positive definite matrix, it uses the Element-by-Element (EbE) and the Preconditioned Conjugate Gradient Method (PCG) techniques to efficiently solve the system of linear equations. Also as a way to increase the convergence of effective thermal conductivity, the technique of Periodic Boundary Conditions is employed. In order to validate the proposed approach, a comparison with a traditional method such as the Finite Element Method (FEM) is used for three different models: plate with periodic circular inclusions (synthetic model with analytical solution), a plate with periodic square inclusions (synthetic model), and a nodular cast iron sample. The results obtained for the three examples indicate that, for the same level of discretization, the BEM was more accurate than the FEM.

Keywords: Numerical Homogenization, Effective Thermal Conductivity, Boundary Element Method, Domain Decomposition, Preconditioner Conjugate Gradient Method, Image-based Modelling.

SUMÁRIO

FOLHA DE ROSTO, p. 1

FOLHA DE APROVAÇÃO, p.4

AGRADECIMENTOS, p.5

EPÍGRAFE, p.6

RESUMO, p.7

ABSTRACT, p.8

SUMÁRIO, p.9

LISTA DE ILUSTRAÇÕES, p.11

LISTA DE TABELAS, p.13

LISTA DE ALGORITMOS, p. 14

1. INTRODUÇÃO, p.15

1.1. MOTIVAÇÃO, p.16

1.2. OBJETIVOS, p.17

1.3. ORGANIZAÇÃO DO TEXTO, p.17

2. REVISÃO DA LITERATURA, p.19

2.1. MATERIAL HETEROGÊNEO E HOMOGENEIZAÇÃO, p. 19

2.2. AQUISIÇÃO DE IMAGENS, PROCESSAMENTO E SEGMENTAÇÃO, p. 21

2.3. MODELO NUMÉRICO BASEADO EM PIXELS, p. 23

2.4. HOMOGENEIZAÇÃO NUMÉRICA DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA, p. 25

3. MODELAGENS MATEMÁTICA E NUMÉRICA, p.26

3.1. DECOMPOSIÇÃO DE DOMÍNIO, p. 26

3.2. HOMOGENEIZAÇÃO NUMÉRICA DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA, p. 29

3.3. MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTOURNO SIMÉTRICO DE GALERKIN, p. 30

3.4. ESTRATÉGIAS COMPUTACIONAIS, p. 33

4. RESULTADO, p. 36

4.1 PLACA COM INCLUSÃO CIRCULAR PERIÓDICA, p.37

4.2 PLACA COM INCLUSÃO QUADRADA PERIÓDICA, p.39

4.3 FERRO FUNDIDO GGG40, p.41

5. CONCLUSÃO, p. 45

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS, p. 46

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1 Homogeneização de condutividade térmica de material heterogêneo, f. 15
- Figura 2 Convergência de propriedades efetivas (a) diferentes tamanhos de volume de interesse; e (b) convergência de propriedades efetivas de acordo com as condições de contorno, f. 20
- Figura 3 Passos para numeração dos nós dos subdomínios considerando condições de contorno periódicas: (a) numeração de cima para baixo da esquerda para direita, ignorando nós das arestas inferior e da direita; (b) em seguida, a aresta inferior é numerada da mesma forma que a aresta superior; e (c) finalmente, a aresta da direita é numerada da mesma forma que a aresta da esquerda. Fonte: Vianna *et al.* (2020), f. 21
- Figura 4 Composição de imagem com três etapas de tratamento de imagem: (a) reconstrução de tomografia; (b) normalização do histograma; e (c) aplicação de filtro. Fonte: Darbon *et al.* (2008), f. 22
- Figura 5 Representação esquemática de um workflow completo de tratamento de imagem: (a) preparação de amostra para aquisição de imagem; (b) imagem bruta de uma seção transversal; (c) região de interesse extraída de imagem bruta; (d) imagem após o filtro non-local mean; e (e) segmentação de imagem usando TWS, f. 23
- Figura 6 Diferentes abordagens de modelagem baseada em imagens com elementos de contorno: (a) imagem original; (b) segmentação de uma região de interesse; (c) problema com uma abordagem convencional de decomposição do domínio de MEC; (d) problema com a abordagem de decomposição de domínio baseada em pixel; e (e) um subdomínio quadrilateral genérico com quatro elementos de contorno, f. 24
- Figura 7 Discretização de domínio: (a) discretização do MEF; e (b) discretização do MEC, f. 26
- Figura 8 Discretização de domínio através de subdomínios regulares não sobrepostos, f. 27
- Figura 9 Interface I entre dois subdomínios de baseado em *Pixels*, f. 28
- Figura 10 Domínio Ω com contorno Γ , sendo P o ponto de fonte, Q o ponto do campo e \mathbf{n} é o vetor unitário normal, f. 30
- Figura 11 Graus de liberdade de um elemento baseado em *Pixels*, f. 33
- Figura 12 Interface do programa pytomoviewer com imagem que será convertida em modelo numérico. Fonte: Sapucaia e Pereira (2020), f. 36
- Figura 13 Disposição hexagonal regular de cilindros incorporados em uma matriz e modelo correspondente, f. 37

- Figura 14 Exemplo de irregularidades provocada por modelo baseado em Pixels ao tentar reproduzir geometrias curvas, f. 38
- Figura 15 Gráficos de convergência: (a) Condutividade térmica efetiva de uma disposição hexagonal regular de cilindros usando MEF e MEC; e (b) comparação do erro relativo entre MEF e MEC, f. 39
- Figura 16 Disposição quadrada regular de fibras quadradas incorporadas em uma matriz e o modelo correspondente, f. 40
- Figura 17 Gráficos de convergência: (a) Condutividade térmica efetiva de uma disposição quadrada regular de fibras quadradas usando MEF e MEC; e (b) comparação do erro relativo de acordo com o número de iterações do MEF e MEC para diferentes discretizações, f. 41
- Figura 18 Amostra de ferro fundido nodular GGG40 com 11 μm e regiões de interesse com 100×100 , 200×200 , 300×300 , 400×400 , 500×500 e 600×600 Pixels, f. 42
- Figura 19 Condutividade térmica efetiva de amostra de ferro fundido nodular usando MEF e MEC com e sem refinamento para diferentes tamanhos de imagens, f. 44

LISTA DE TABELAS

- Tabela 1 Ordem do número de operações de *solvers* de sistema de equações, f. 34
- Tabela 2 Condutividade térmica efetiva do modelo com disposição hexagonal regular de cilindros usando diferentes discretizações, f. 38
- Tabela 3 Condutividade térmica efetiva do modelo com disposição quadrada regular de fibras quadradas usando diferentes discretizações, f. 40
- Tabela 4 Frações volumétricas de Matriz Ferrítica e Grafita para diferentes tamanhos de imagens, f. 42
- Tabela 5 Condutividade térmica efetiva de modelos de ferro fundido nodular GGG40 usando MEC, f. 43

LISTA DE ALGORITMOS

Algoritmo 1 Homogeneização de condutividade térmica de material heterogêneo, f. 34

Algoritmo 2 Gradiente Conjugado Precondicionado com Elemento-por-Elemento, f. 35

1. INTRODUÇÃO

Os materiais empregados em projetos de Engenharia possuem em escala microscópica características heterogêneas que afetam as suas características macroscópicas. A heterogeneidade das fases que constituem os materiais pode ocorrer de maneira não intencional ou ser estabelecida através de processos industriais como no caso de materiais compósitos. Os pesquisadores da área de materiais compósitos buscam sempre o aperfeiçoamento das técnicas tradicionais ou desenvolvimento de novas tecnologias para a produção de materiais com propriedades macroscópicas (condutividade térmica, rigidez, resistência mecânica, densidade e durabilidade) de maior interesse para a indústria.

Na atualidade, a determinação das características macroscópicas e a avaliação das propriedades físicas dos materiais a partir da estrutura microscópica vêm sendo um problema de essencial importância na ciência e na engenharia dos materiais (BARBERO, 2017; OTERO *et al.*, 2015). Entretanto, o alto custo de investimento, a complexidade de ensaios com materiais muito pequenos, o nível de controle de interferências externas e o tempo consumido na preparação de ensaios tornam os métodos computacionais vantajosos em determinadas fases de investigação. Em particular, a homogeneização computacional (HASSANI e HINTON, 1998) tem sido uma ferramenta de extrema importância em caracterização de materiais dos mais diferentes tipos como os materiais empregados nas indústrias química, mecânica, eletrônica e de petróleo. A homogeneização consiste em combinar as propriedades físicas individuais dos materiais, como por exemplo a condutividade térmica k , que compõem um compósito e substituí-las por uma condutividade térmica equivalente k_h como apresentado na Figura 1.

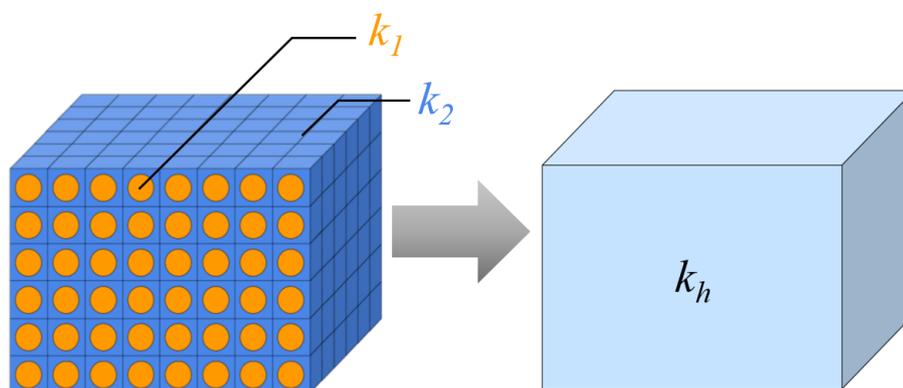


Figura 1 – Homogeneização de condutividade térmica de material heterogêneo.

Nesse contexto, a utilização de imagens tem possibilitado, como no trabalho de Berryman e Blair (1987), diversas novas formas de análise da microestrutura dos materiais. Uma dessas formas é a utilização de imagens em simulações computacionais utilizando métodos numéricos (TERADA *et al.*, 1997) como o Método dos Elementos Finitos (LUX *et al.*, 2006), Método dos Elementos de Contorno (LUKÁŠ *et al.*, 2020) e Método de Elementos Finitos baseado em Volumes de Controle (SONG e YOUN, 2006). Contudo, assim como os métodos numéricos, a qualidade dos modelos gerados a partir das imagens também exerce influência nos resultados das propriedades efetivas calculadas.

A semelhança do modelo numérico ao objeto real traz benefícios nas respostas, entretanto, é preciso considerar o custo computacional inerente necessário para realizar os cálculos da homogeneização computacional em modelos muito refinados. O equilíbrio entre a construção do modelo e do método computacional utilizado é um tema bastante comum e aberto aos pesquisadores da área de homogeneização. O objetivo deste trabalho é desenvolver uma nova abordagem do Método dos Elementos de Contorno Simétrico de Galerkin (MEC) (GRAY e PAULINO, 1997) utilizando modelos baseados em *Pixels*. Essa abordagem promete explorar os limites do equilíbrio entre método computacional e modelo numérico em um algoritmo otimizado que não precise rodar em supercomputadores.

1.1. MOTIVAÇÃO

A microtomografia computadorizada é uma excelente ferramenta de investigação da microestrutura dos materiais heterogêneos de maneira não destrutiva. Os equipamentos de raios-X e microscópios utilizam detectores para a produção de imagens digitais do material estudado. Essas imagens são guardadas digitalmente através de unidades fundamentais chamadas *Pixels* (em imagens 2D) e *Voxels* (em imagens 3D).

Um fenômeno que tem sido amplamente observado na literatura (SUKIMAN *et al.*, 2020) é a criação de modelos digitais que utilizam diretamente a unidade fundamental do *Pixels* como entrada de dados para diferentes métodos numéricos. Nesses modelos, as tradicionais malhas do Método dos Elementos Finitos (MEF) surgem diretamente dos *Pixels* possuindo assim o mesmo tamanho, geometria e orientação. Essa técnica ao mesmo tempo que é extremamente simples, pois fornece um algoritmo fácil para criação de malhas regulares, também possui boa representatividade física dos objetos representados (SUKIMAN *et al.*, 2020).

Todavia, poucos estudos se concentraram no uso do MEC para a solução de problema de homogeneização computacional. Além disso, nenhuma dessas abordagens utilizou uma estratégia otimizada junto com um modelo baseado em *Pixels*. A utilização apropriada de técnicas de alto desempenho como a Decomposição de Domínio e Condições de Contorno Periódicas tem o potencial de caracterizar as propriedades efetivas em modelos com o MEC, melhor e tão rápida quanto com o uso do MEF.

Diante disso, a utilização do MEC pode vir a ser uma possibilidade mais eficiente com baixo custo computacional para a solução de homogeneização computacional de meios heterogêneos com maior precisão do que com os outros métodos mencionados anteriormente.

1.2. OBJETIVOS

Este trabalho visa apresentar uma formulação de Homogeneização Computacional de condutividade térmica utilizando o Método dos Elementos de Contorno Simétrico de Galerkin (MEC) baseadas em *Pixels* utilizando Condições de Contorno Periódicas e Decomposição de Domínio. Para atingir esse objetivo foi implementado o MEC para problemas de potencial utilizando malhas baseadas em *Pixels*. Este programa foi implementado de forma a possibilitar análises de imagens de microtomografia e imagens sintéticas utilizando computadores pessoais.

A validação dos resultados de condutividade térmica de materiais heterogêneos deste trabalho foi realizada utilizando soluções analíticas, experimentais e numéricas juntamente com o Método dos Elementos Finitos.

1.3. ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

No Capítulo 2, será apresentada uma revisão da literatura de matérias heterogêneas e homogeneização de propriedades, aquisição de imagens e como elas estão relacionadas a homogeneização de materiais, modelos numéricos baseados em *Pixels* e homogeneização de condutividade térmica de materiais.

O Capítulo 3 exhibe a metodologia de pesquisa deste trabalho iniciando com a Decomposição de Domínio que permite que o método formulado seja competitivo em relação a outros métodos computacionais. Aprofunda-se na formulação de homogeneização numérica que será utilizada, seguindo com a formulação do Método de Elementos de Contorno

Simétrico de Galerkin. O capítulo termina com as estratégias computacionais utilizadas para deixar o método mais rápido e eficiente ao analisar imagens com grandes quantidades de *Pixels*.

Em seguida, no Capítulo 4, são apresentados os resultados encontrados de condutividade térmica efetiva para três diferentes modelos numéricos: placa com inclusão circular periódica, placa com inclusão quadrada periódica e ferro fundido nodular. São analisadas também as convergências dessas propriedades em comparação com o MEF (também baseado em *Pixels*).

2. REVISÃO DA LITERATURA

2.1. MATERIAL HETEROGÊNEO E HOMOGENEIZAÇÃO

Grande parte dos materiais utilizados na engenharia tem em suas concepções de projeto considerações de continuidade e de homogeneidade. Entretanto, a maior parte dos materiais possui sob escala microscópica descontinuidades, inclusões e heterogeneidade em sua distribuição que irão influenciar em suas características macroscópicas. O desenvolvimento de novos materiais e o aperfeiçoamento dos já existentes está, intrinsecamente, muito relacionado às pesquisas da microestrutura desses materiais como pode ser encontrado nos trabalhos de Enikolopyan *et al.* (1990), Vasiliev (1993), Gilormini e Bréchet (1999) e Vinson e Sierakowski (2008). Na engenharia é comum a utilização de combinações de materiais para a formação de novos materiais com propriedades mais interessantes comparativamente aos originais. Nesse contexto, técnicas de homogeneização têm auxiliado no estudo desses novos materiais quando a partir de modelos matemáticos da microestrutura, das fases envolvidas (matriz e reforço), são possíveis estimativas de propriedades macroscópicas.

Nos anos 70, as formulações matemáticas de homogeneização começaram a ser desenvolvidas e aplicadas em áreas como transferência de calor, escoamento de fluido em meios porosos e mecânica a fim de se encontrar propriedades efetivas equivalentes dos materiais heterogêneos (BENSOUSSAN *et al.*, 1978; CIORANESCU *et al.*, 1979; SANCHEZ-PALENCIA, 1980). Entre essas técnicas, pode-se destacar a regra da mistura como uma boa aproximação para determinados materiais que consiste em uma relação linear entre as propriedades de cada material e as frações volumétricas. Além disso, soluções analíticas também foram determinadas para a solução de particulares arranjos de matriz/inclusão como nos trabalhos de Progelhof *et al.* (1976) e Perrins *et al.* (1979).

Apesar do uso para diferentes materiais, a regra da mistura e as soluções analíticas possuem limitações que impedem o seu uso em determinados fenômenos físicos ou materiais. Uma das maneiras de superar esses problemas e melhorar as aproximações com resultados experimentais foi a utilização de soluções numéricas como o Método dos Elementos Finitos (MEF). Nesses casos, surge um importante conceito que é o Volume Representativo Elementar (VRE, ou do inglês *representative volumetric element* – RVE). O VRE é um

volume dentro de um material heterogêneo que estatisticamente é suficiente para incluir as heterogeneidades da microestrutura (SUN e VAIDYA, 1996). Logo, o VRE deve ser grande o suficiente para comportar todas as particularidades do material heterogêneo (grãos, inclusões, vazios, fibras, etc), mas ao mesmo tempo deve ser pequeno o suficiente devido ao custo do método computacional.

Adicionalmente, definido um VRE, as pesquisas de Kanit *et al.* (2003), Terada *et al.* (2000), Larsson *et al.* (2011), mostraram que o modo como são impostas as condições de contorno influenciam os valores de propriedades efetivas calculadas através dos métodos numéricos como mostrado na Figura 2. Considerando três possibilidades de condições de contorno: (1) condição de contorno de Dirichlet; (2) condição de contorno de Neumann e (3) condição de contorno periódica, estudos como o apresentado por Nguyen *et al.* (2012) aponta que a taxa de convergência de condições periódicas é maior com o aumento do VRE do que outros tipos de condições.

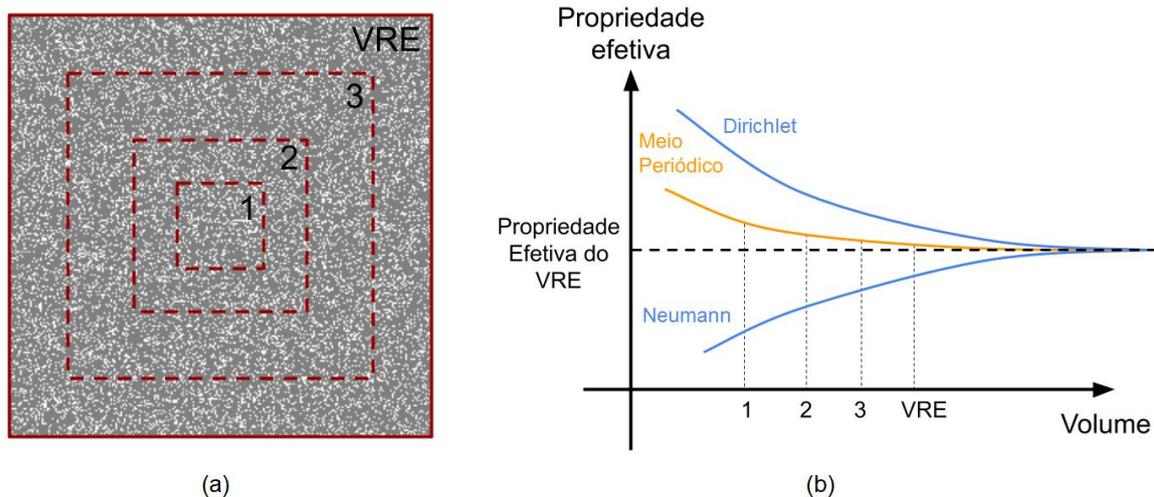


Figura 2 – Convergência de propriedades efetivas (a) diferentes tamanhos de volume de interesse; e (b) convergência de propriedades efetivas de acordo com as condições de contorno. Fonte: Adaptado de Nguyen *et al.* (2012).

Ainda sobre condições de contorno periódicas, Andreassen e Andreassen (2014) fornecem uma solução simples e didática para a implementação computacional dessas condições periódicas em elementos finitos que pode ser estendida também em outros métodos numéricos. Esta solução consiste em criar uma numeração de nós e elementos de forma ordenada para garantir maior controle na manipulação desses elementos. A ordenação proposta consiste em numerar os nós de cima para baixo e da esquerda para a direita, como mostrado na Figura 3.

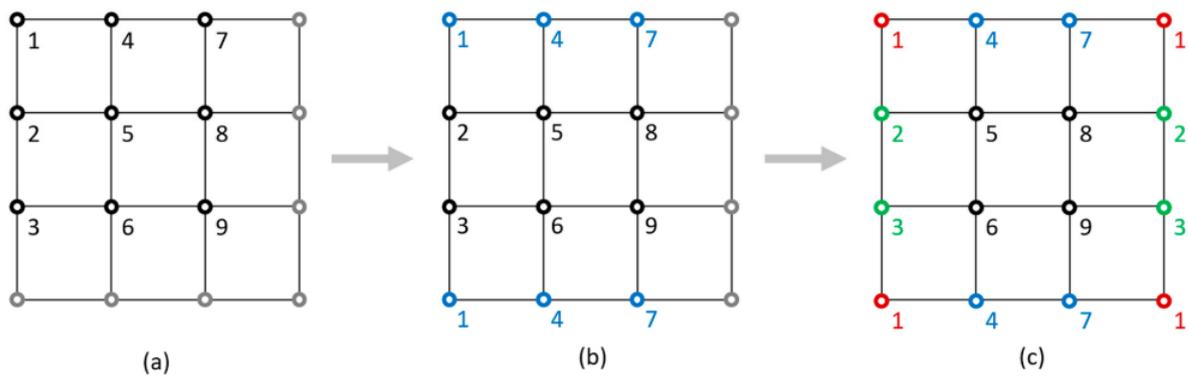


Figura 3 – Passos para numeração dos nós dos subdomínios considerando condições de contorno periódicas: (a) numeração de cima para baixo e da esquerda para direita, ignorando nós das arestas inferior e da direita; (b) em seguida, a aresta inferior é numerada da mesma forma que a aresta superior; e (c) finalmente, a aresta da direita é numerada da mesma forma que a aresta da esquerda. Fonte: Vianna *et al.* (2020)

2.2. AQUISIÇÃO DE IMAGENS, PROCESSAMENTO E SEGMENTAÇÃO

A concorrência entre os resultados experimentais e numéricos depende diretamente da fidelidade da representação do material heterogêneo com o modelo computacional. Pesquisas anteriores mostraram que o uso de dispositivos de aquisição de imagens, por exemplo, microscópio eletrônico de varredura (SUKIMAN *et al.*, 2017) ou microtomografia computadorizada de raios-X (micro-CT) (BLUNT *et al.*, 2013), são excelentes maneiras de criar modelos computacionais confiáveis devido a visualização interna das fases constituintes, distribuição e geometria dos materiais.

O processo para de criação do modelo computacional utilizando imagens de microtomografia computadorizada envolve várias etapas que têm sido amplamente estudadas: aquisição de imagem, processamento, segmentação de imagem e geração de malha. Em relação a aquisição de imagens, deve se observar que uma imagem digital é uma representação visual formada por pequenos elementos chamados *Pixels* que possuem valores específicos de cores. Em determinadas regiões, de acordo com Vásárhelyi *et al.* (2020), podem ocorrer erros ou artefatos que não correspondem à estrutura do material e devem ser retirados através de técnicas de filtragem. Esses artefatos são introduzidos devido ao próprio processo de aquisição de micro-CT, como: amostras úmidas que sofrem alterações de volume durante a aquisição, amostras leves e finas que se deslocam devido as etapas de rotação, artefatos devido ao formato cônico dos feixes de raios-X gerados pela fonte, etc.

São inúmeros os autores (DARBON *et al.*, 2008) que reconhecem o uso de técnicas de processamento de imagem, em específico a utilização de filtros, a fim de reduzir a

interferência dos ruídos e artefatos das imagens. Os filtros são algoritmos sofisticados que facilitam a compreensão e extração de informações das imagens modificando a cor dos *Pixels* de acordo com as informações que estão ao redor deste como na Figura 4. É possível também entender os filtros, no contexto de homogeneização, como sendo algoritmos que modificam o histograma das imagens de modo a distinguir melhor as fases do material.

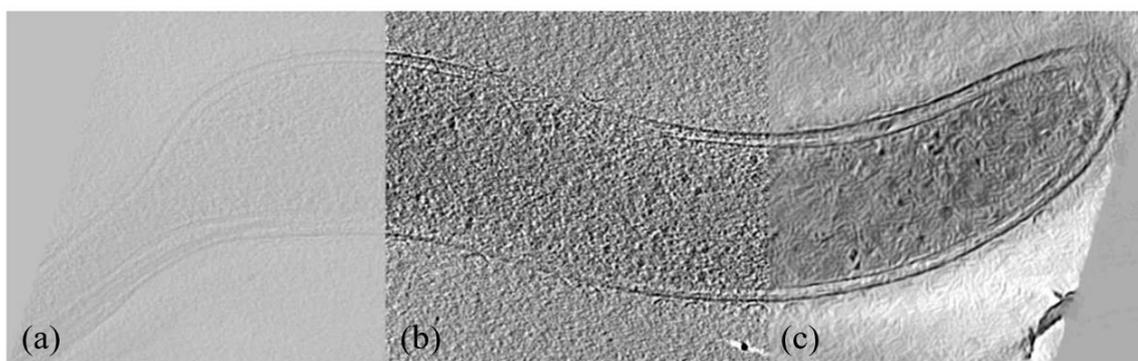


Figura 4 – Composição de imagem com três etapas de tratamento de imagem: (a) reconstrução de tomografia; (b) normalização do histograma; e (c) aplicação de filtro.

Fonte: Darbon *et al.* (2008)

Existem diferentes *softwares* para tratamento e segmentação de imagens. Entretanto, parte desses *softwares* possui licenças pagas extremamente caras para algumas aplicações. Nessa conjuntura, é notável que o ImageJ (SCHNEIDER *et al.*, 2012) tem se tornado um recurso ideal e extremamente acessível a um número ilimitado de pesquisadores. A acessibilidade promovida pelo *software* torna possível ainda o desenvolvimento de *macros* e *plugins* por terceiro como é o caso do filtro *non local means* (DARBON *et al.*, 2008) utilizado nesse trabalho.

A última etapa antes da criação do modelo é a segmentação da imagem, ou seja, dada uma determinada imagem em tons de cinza, determinar quais são as regiões do material que caracterizam determinadas fases (quais *pixels* serão definidos como fase A, B, C, etc). O processo de segmentação pode ser realizado utilizando o histograma da imagem como em Tobias e Seara (2002) e Sun *et al.* (2005). Contudo, as limitações dos presentes estudos incluem naturalmente uma análise matemática do histograma ou de regiões da imagem. Para superar esse problema, ferramentas de aprendizado de máquina como o Trainable Weka Segmentation (TWS) desenvolvido por Arganda-Carreras *et al.* (2017) tem conseguido através de treinamento de classificadores resultados impressionantes de segmentação automática.

Todas as etapas apresentadas anteriormente, apesar de não estarem diretamente ligadas a homogeneização numérica, são importantes pois a escolha dessas técnicas determina a

qualidade e confiabilidade do modelo numérico final. O erro inerente de cada etapa é sistematicamente incorporado as etapas subsequentes e deve ser considerado quando for realizada a comparação de resultados numéricos com experimentais. O fluxo de trabalho completo do tratamento de imagem convencionalmente adotado pela indústria é mostrado na Figura 5 para uma amostra real de um ferro fundido nodular (PEREIRA *et al.*, 2020).

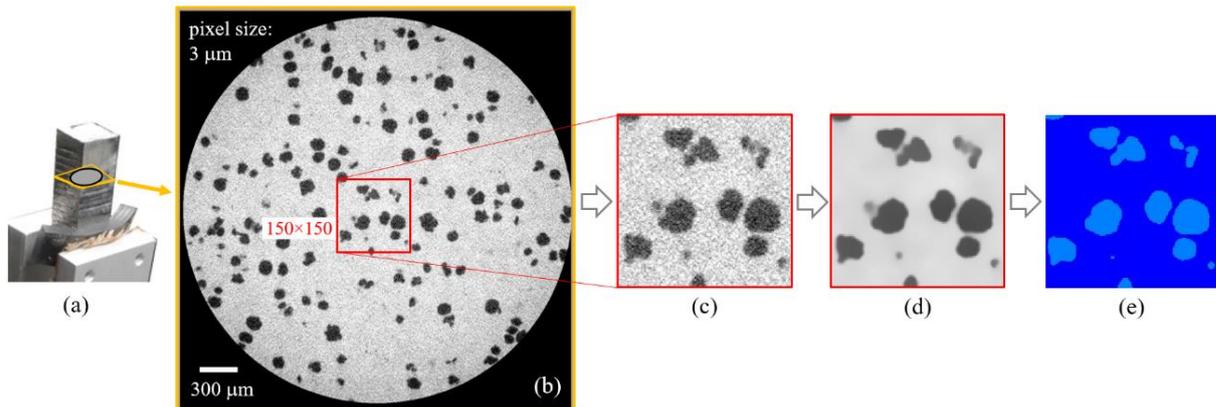


Figure 5 - Representação esquemática de um fluxo de trabalho completo de tratamento de imagem: (a) preparação de amostra para aquisição de imagem; (b) imagem bruta de uma seção transversal; (c) região de interesse extraída de imagem bruta; (d) imagem após o filtro *non-local mean*; e (e) segmentação de imagem usando TWS.

2.3. MODELO NUMÉRICO BASEADO EM PIXELS

O início dos estudos e usos de modelos computacionais com métodos numéricos baseados em *Pixels* a partir de imagens de tomografias pode ser encontrado na década de 90 com os trabalhos de (KEYAK e SKINNER, 1992; VAN RIETBERGEN *et al.*, 1993). Nesses modelos cada *Pixel* é diretamente considerado como um único elemento finito e a ele são atribuídas propriedades físicas de acordo com a sua cor. A utilização dessa tecnologia permitiu, por exemplo, a criação e análise de objetos com geometria complexa como o osso humano (HOLLISTER e RIEMER, 1993) com bons resultados em comparação a resultados com modelos de geometria suavizada. Embora seja uma busca natural encontrar modelos numéricos com geometrias suavizadas mais próximas ao real, deve-se considerar sempre o custo computacional relacionado a essas análises com milhares de elementos. Modelos baseados em *Pixels*, por possuírem sempre a mesma geometria, são calculados antes das análises e permitem também técnicas que melhoram o desempenho como o Elemento-por-Elemento (EPE) junto com o Gradiente Conjugado Precondicionado (GCP) (CAREY e JIANG, 1986).

Embora seja na verdade uma estratégia natural para elementos finitos, ainda falta trabalho que empregue tal estratégia para elementos de contorno. A Figura 6 (a-b) apresenta resumidamente o processo de criação de modelo segmentado que pode ser utilizado pelos métodos numéricos. A comunidade de elementos de contorno geralmente aplica os elementos de contorno em toda a fronteira de cada região não conectada para discretizar a imagem, conforme ilustrado na Figura 6 (c). No entanto, é possível perceber que os elementos de contorno também podem ser empregados da mesma maneira que o MEF. Neste trabalho, a metodologia de modelagem proposta consiste em criar um modelo numérico onde o domínio é composto por todos os elementos da imagem. Este domínio é, portanto, subdividido em vários subdomínios não sobrepostos. Cada subdomínio é criado a partir de um único *Pixel* da imagem e é composto por apenas um material, conforme Figura 6 (d). Finalmente, cada subdomínio inclui elementos de contorno em cada aresta do *Pixel*, conforme mostrado na Figura 6 (e).

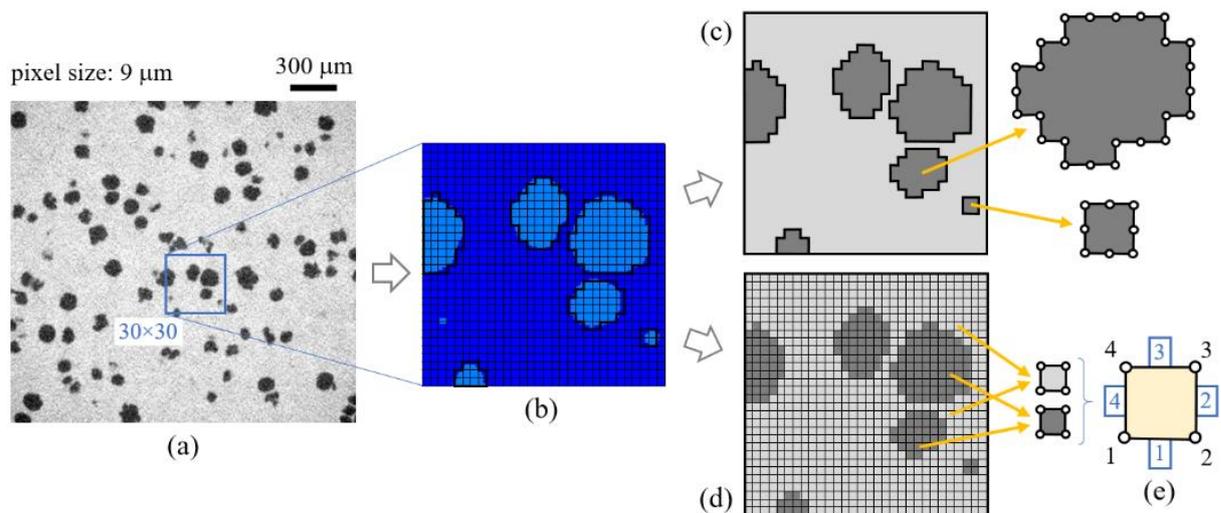


Figure 6 - Diferentes abordagens de modelagem baseada em imagens com elementos de contorno: (a) imagem original; (b) segmentação de uma região de interesse; (c) problema com uma abordagem convencional de decomposição do domínio de MEC; (d) problema com a abordagem de decomposição de domínio baseada em pixel; e (e) um subdomínio quadrilateral genérico com quatro elementos de contorno.

De fato, uma das principais vantagens relacionadas ao MEC que é a menor discretização do modelo resultante fica aparentemente prejudicada com um modelo composto por subdomínios semelhantes a uma malha regular de quadriláteros. Entretanto, subdomínios regulares baseados em *Pixels* são muito mais fáceis de controlar a geometria, as coordenadas e a conectividade. Portanto, pode ser atribuída a mesma matriz de condutividade térmica a todos os subdomínios com as mesmas propriedades físicas. O benefício desse fato é que não é

mais necessário calcular a matriz de condutividade de todos os subdomínios do modelo, apenas uma matriz de condutividade por material, reduzindo assim drasticamente o uso de CPU e RAM. Logo, espera-se que o uso do MEC tenha uma vantagem sobre o MEF no cálculo das propriedades térmicas efetivas, pois se acredita que o MEC fornece uma melhor matriz de condutividade térmica.

2.4 HOMOGENEIZAÇÃO NUMÉRICA DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA

A condutividade térmica é um parâmetro físico dos materiais que possui bastante relevância no projeto de produtos de diversas áreas da engenharia de materiais, mecânica, química, civil, eletrônica e de petróleo. De fato, a condutividade térmica efetiva de materiais heterogêneos e compostos, encontra-se inclusive no fenômeno de condução de calor, podendo então ser resolvida pela equação de Laplace. Essa equação também governa outros fenômenos físicos, portanto o programa desenvolvido para homogeneizar propriedades térmicas efetivas também pode ser utilizado para esses outros fenômenos por meio de analogias simples.

Em particular, a condutividade térmica efetiva tem sido investigada há décadas por incontáveis pesquisadores, tanto teoricamente quanto experimentalmente. Em alguns desses estudos aparecem modelos analíticos, semianalíticos e numéricos para calcular a condutividade térmica efetiva de materiais heterogêneos (PROGELHOF *et al.*, 1976; HALE, 1976; TELEJKO e MALINOWSKI, 2004; BURGER *et al.*, 2016). Em comparação com outras técnicas, os métodos de homogeneização numérica têm vantagens notáveis para estimar propriedades eficazes, como demonstrado por Hollister e Kikuchi (1992), e se tornaram muito populares como uma alternativa para caros experimentos de laboratório.

Considerando homogeneização numérica utilizando o MEC é possível observar trabalhos como o de Dondero *et al.* (2011) que tentam utilizar técnicas para melhorar a velocidade do método. Analogamente, Lukáš *et al.* (2020) utiliza o MEC para obter uma melhor homogeneização de condutividade térmica de problemas 2D. Entretanto, não foram encontrados trabalhos que utilizem MEC em homogeneização computacional juntamente com Decomposição de Domínios em modelos baseados em *Pixels* com baixo custo computacional que sejam capazes de fornecer uma representação satisfatória do material heterogêneo de interesse.

3. MODELAGENS MATEMÁTICA E NUMÉRICA

Para compreender o desenvolvimento de homogeneização computacional utilizando a formulação do Método dos Elementos de Contorno Simétrico de Galerkin (MEC) é preciso entender antes o conceito de Decomposição de Domínios. O conceito de dividir cada vez mais o domínio de maneira a simplificar o problema pode não parecer trivial para um MEC, mas é a base para do método proposto.

3.1. DECOMPOSIÇÃO DE DOMÍNIO

O MEC é frequentemente usado para obter soluções aproximadas para problemas em aplicações científicas e de engenharia. Em comparação com os métodos de domínio, o MEC tem algumas vantagens para calcular as aproximações dos campos de temperatura e fluxo de calor dentro do domínio assumido o mesmo nível de discretização. Normalmente, assume-se como uma vantagem do MEC a redução da dimensão do problema em comparação com os métodos de domínio. Em consequência da redução da dimensão do problema, observa-se também a redução do número de incógnitas do sistema de equações (Figura 7). Desse modo, o sistema de equações final do MEC é normalmente menor com uma solução mais precisa.

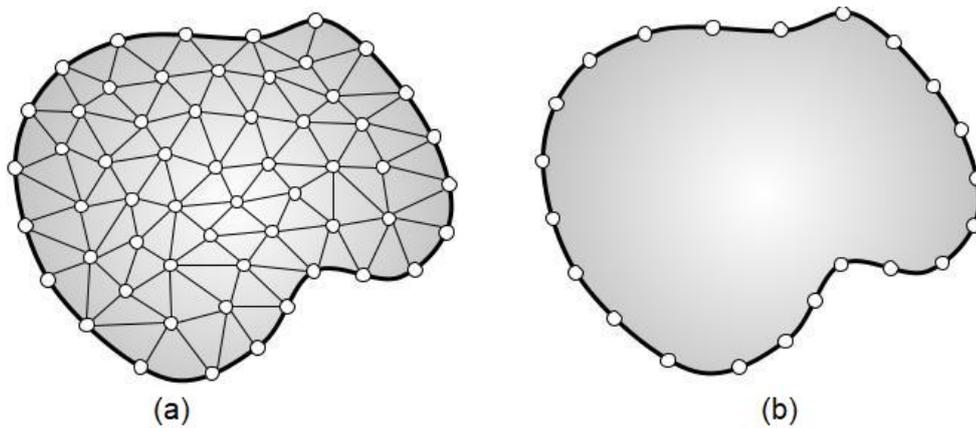


Figure 7 – Discretização da geometria do problema: (a) discretização com o MEF; e (b) discretização com o MEC.

No entanto, o modelo proposto de MEC para esse trabalho parece bastante contra intuitivo à primeira vista (Figura 8), mas possui grande potencial de resolver problemas grandes e complexos de forma rápida e precisa. A proposta desenvolvida para o MEC baseado em *Pixels* consiste em decompor o domínio em diversos subdomínios que serão analisados

individualmente. Para cada *Pixel* será atribuído um subdomínio de MEC e serão calculadas as matrizes que governam o problema.

Como todos os subdomínios, com o mesmo material, tem a mesma dimensão e orientação, as matrizes do problema são iguais. Somente essa estratégia já reduziria o tempo de processamento e o consumo de memória do computador, mas se espera que essas matrizes do MEC consigam aproximar melhor que o MEF os valores dos fluxos de calor interno do domínio. Sendo assim, é preciso definir como irá funcionar a estratégia de Decomposição de Domínio no MEC.

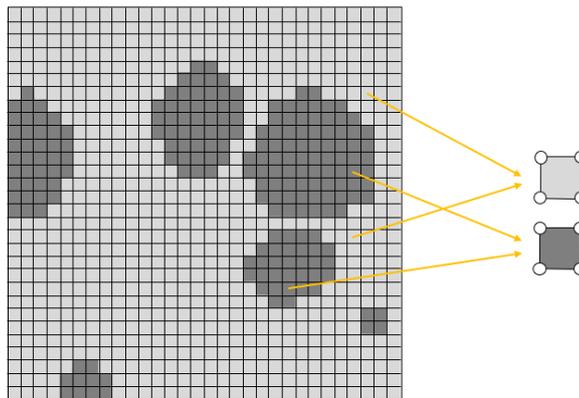


Figure 8 – Discretização de domínio através de subdomínios regulares não sobrepostos.

Para resolver grandes problemas com diferentes fases, difíceis de serem resolvidos em apenas um computador ou que necessitam de entrada de dados de outros métodos computacionais, muitos pesquisadores recorrem a técnicas de Decomposição de Domínios. Existem apelos crescentes para o uso dessas técnicas em ambientes de computador serial e paralelo para melhorar a velocidade e a viabilidade do uso do MEC em problemas totalmente acoplados. A estratégia utilizada neste trabalho consiste em utilizar uma formulação direta para subdomínios não sobrepostos que consiste em compatibilizar a continuidade das condições de contorno na interface dos domínios.

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz limitado por uma fronteira Γ e particionada em N subdomínios não sobrepostos. Cada subdomínio corresponde à um *Pixel*, desta maneira, seu interior é governado pela equação de condução de calor em estado estacionário com apenas um material isotrópico homogêneo como

$$\Omega = \bigcup_{r=1}^N \Omega^r, \text{ para } r = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

$$\Gamma = \bigcup_{r=1}^N \Gamma^r, \quad \Gamma^i \cap \Gamma^j = \emptyset, \quad i \neq j \quad (2)$$

em que o sobrescrito r denota o subdomínio Ω^r .

Em um caso específico, como na Figura 9, considere dois subdomínios Ω^1 e Ω^2 . A interface entre os subdomínios pode ser escrita como

$$I = \Gamma^1 \cap \Gamma^2 \quad (3)$$

$$\Omega = \Omega^1 \cup \Omega^2 \quad (4)$$

$$\Omega^1 \cap \Omega^2 = \emptyset \quad (5)$$

sendo assim, o sistema de equações diferenciais parciais lineares (EDP) para esses subdomínios pode ser escrito por

$$\mathbf{KT} = \mathbf{q} \quad (7)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{BB}^1 & \mathbf{k}_{BI}^1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{k}_{IB}^1 & \mathbf{k}_{II}^1 + \mathbf{k}_{II}^2 & \mathbf{k}_{IB}^2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{k}_{BI}^2 & \mathbf{k}_{BB}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_B^1 \\ \mathbf{T}_I \\ \mathbf{T}_B^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_B^1 \\ \mathbf{q}_I^1 + \mathbf{q}_I^2 \\ \mathbf{q}_B^2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

onde \mathbf{k} é a contribuição da matriz de condutividade térmica de cada subdomínio, \mathbf{T} é o vetor de temperatura, \mathbf{q} é o vetor de fluxo de calor prescrito no contorno, e os subscritos $ij = II, BB$ e IB (ou BI), referem-se, respectivamente, a nós na interface entre subdomínios, nós em limites não sobrepostos e nós de interface.

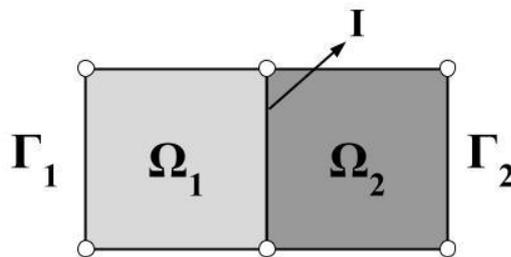


Figure 9 – Interface I entre dois subdomínios de elementos de contorno baseado em *Pixels*.

Com a equação (8) é possível realizar a formulação do MEC utilizando subdomínios baseados em *Pixels*. Faz-se necessário agora, formular o problema de homogeneização de condutividade térmica e determinar para subdomínios parametrizados os valores da matriz de condutividade térmica \mathbf{k} .

3.2. HOMOGENEIZAÇÃO NUMÉRICA DE CONDUTIVIDADE TÉRMICA

As técnicas de homogeneização numérica usam as relações entre a micro e a macroestrutura do material para determinar a propriedade efetiva de materiais heterogêneos. Essa técnica considera as características, propriedades e relações entre as fases em escala microscópica para determinar as propriedades na escala macroscópica. Para problemas de condução de calor, a propriedade mais relevante é a condutividade térmica efetiva que pode ser determinada aplicando-se um gradiente de potencial conhecido em um VRE. Sob essas circunstâncias, um campo de fluxo de calor será induzido no domínio. A condutividade térmica efetiva do material $\bar{\mathbf{k}}$ é definida então como a relação entre o gradiente de potencial devido à condução do gradiente de temperatura $\langle \nabla \mathbf{T} \rangle_{\Omega}$ e o fluxo de calor médio $\langle \mathbf{q} \rangle_{\Omega}$ na macroescala, conhecida como lei de Fourier (Ω aqui, denota o VRE unitário)

$$\langle \mathbf{q} \rangle_{\Omega} = -\bar{\mathbf{k}} \langle \nabla \mathbf{T} \rangle_{\Omega} \quad (9)$$

onde $\langle \mathbf{q} \rangle_{\Omega} = \langle \{q_1, q_2\}^T \rangle_{\Omega}$ é o vetor de fluxo médio de calor calculado a partir do fluxo de calor em escala microscópica, ou seja,

$$\langle \mathbf{q} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \mathbf{q} d\Omega \quad (10)$$

A lei de Fourier, dada pela Equação (9), afirma que o fluxo de calor total é igual ao produto da condutividade térmica média (dada por Watt por metro-Kelvin, W/(m·K), no SI) e o gradiente de potencial. Para um problema de condução de calor bidimensional, duas análises devem ser realizadas aplicando-se um gradiente de potencial unitário dentro do VRE em cada uma das direções cartesianas para determinar seu vetor de fluxo médio de calor correspondente. Para cada condição de contorno, o vetor de fluxo médio de calor corresponde a uma coluna da matriz de condutividade térmica efetiva $\bar{\mathbf{k}}$.

No contexto de homogeneização numérica, a análise utilizando o MEC baseado em imagens tem a possibilidade de estimar melhor o campo potencial dentro de um volume representativo digital e assim melhor resultado no vetor de fluxo de calor médio associado.

3.3. MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO SIMETRICO DE GALERKIN

O Método dos Elementos de Contorno Simétrico de Galerkin (MEC) é um método numérico derivado a partir de equações integrais de contorno. O MEC destina-se a solução de problemas de valor de contorno governados por equações diferenciais parciais que podem ser representados também por equações integrais de contorno. A vantagem e escolha desse método, em relação as formulações tradicionais baseadas em equações integrais de contorno está na formulação de uma matriz simétrica positiva definida. Pensando na solução de sistemas de equações lineares, a matriz simétrica positiva definida possibilita o uso de métodos iterativos, tal como o Gradiente Conjugado, que possui estabilidade e convergência garantidas.

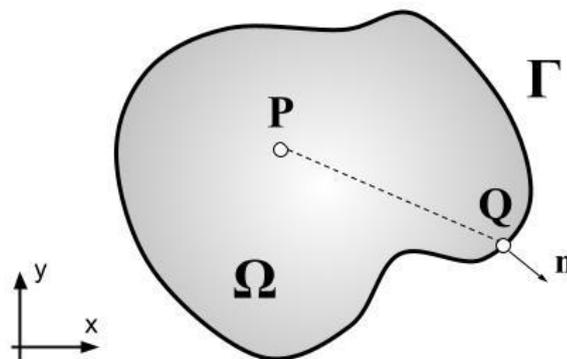


Figure 10 – Domínio Ω com contorno Γ , sendo P o ponto de fonte, Q o ponto do campo e \mathbf{n} é o vetor unitário normal.

As principais ferramentas matemáticas utilizadas pelo MEC são as funções de Green que consistem em uma solução de uma equação diferencial a partir de uma fonte não homogênea (delta de Dirac) e condições de contorno homogêneas (campo). Para o problema de potencial, a equação de condução de calor em estado estacionário (equação de Laplace) em materiais heterogêneos pode ser escrita por

$$k\nabla^2 T(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (11)$$

onde T é a temperatura no domínio Ω com o contorno $\Gamma = \partial\Omega$ (Figura 10), \mathbf{x} é um ponto genérico no domínio e k é a condutividade térmica do material.

Aplicando a formulação de Green o problema de condução de calor pode também ser descrito pela equação integral de limite fortemente singular para temperatura e a equação integral de limite hipersingular para fluxo normal (GRAY e PAULINO, 1997), ou seja, duas equações integrais de contorno (EIC), T-EIC e q-EIC, respectivamente

$$T(\mathbf{P}) + \int_{\Gamma} T(\mathbf{Q}) \frac{\partial G}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) d\Gamma = \int_{\Gamma} \left[\frac{1}{k} G(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \right] \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{Q}) d\Gamma \quad (12)$$

$$k \frac{\partial T(\mathbf{P})}{\partial \mathbf{N}} + \int_{\Gamma} T(\mathbf{Q}) \left[k \frac{\partial^2 G}{\partial \mathbf{N} \partial \mathbf{n}}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \right] d\Gamma = \int_{\Gamma} \left[\frac{1}{k} \frac{\partial G}{\partial \mathbf{N}}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \right] \frac{\partial T}{\partial \mathbf{N}}(\mathbf{Q}) d\Gamma \quad (13)$$

onde \mathbf{P} é o ponto de fonte, \mathbf{Q} é o ponto do campo, \mathbf{n} é o vetor unitário normal externo ao ponto \mathbf{Q} , \mathbf{N} é o vetor unitário normal externo ao ponto \mathbf{P} , $\partial \mathbf{N}$ indica uma derivada em relação às coordenadas de \mathbf{P} , $\partial \mathbf{n}$ indica uma derivada em relação às coordenadas de \mathbf{Q} e $G(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ é a solução fundamental.

É importante observar que, até o momento, as EIC são válidas apenas para pontos dentro do domínio. Dito isso, empregando o processo de limite a fim de mover o ponto fonte para a fronteira do problema, usando a técnica de resíduos ponderados de Galerkin, e subdividindo a fronteira em um conjunto de elementos aproximados através da interpolação de seus valores nodais é possível escrever as equações como

$$\int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}^T G_{TT}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \boldsymbol{\psi} d\Gamma d\Gamma \mathbf{q} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}^T G_{Tq}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \boldsymbol{\psi} d\Gamma d\Gamma \mathbf{T} \quad (14)$$

$$\int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}^T G_{qT}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \boldsymbol{\psi} d\Gamma d\Gamma \mathbf{q} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}^T G_{qq}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \boldsymbol{\psi} d\Gamma d\Gamma \mathbf{T} \quad (15)$$

onde $\boldsymbol{\psi}$ são as funções de formas lineares, \mathbf{q} é um vetor associado ao fluxo de calor na fronteira, \mathbf{T} são as temperaturas nodais na fronteira e as funções fundamentais formam como

$$G_{TT}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = -\frac{1}{2\pi k} \log(r) \quad (16)$$

$$G_{Tq}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{R}}{r^2} \quad (17)$$

$$G_{qT}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{R}}{r^2} \quad (18)$$

$$G_{qq}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = -k \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{\mathbf{N} \cdot \mathbf{n}}{r^2} + 2 \frac{(\mathbf{N} \cdot \mathbf{R})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{R})}{r^4} \right) \quad (19)$$

onde $r = \|\mathbf{R}\| = \|\mathbf{Q} - \mathbf{P}\|$ é a distância entre o ponto fonte \mathbf{P} e o ponto de campo \mathbf{Q} , o primeiro subscrito denota as equações T-EIC e q-EIC, e o segundo subscrito denota a solução fundamental relacionada.

O uso do T-EIC e do q-EIC para resolver problemas de engenharia e fazer o acoplamento com o MEF não é novo e pode ser encontrado em trabalhos como Gray e Paulino (1997). Usando a formulação do MEC é possível criar uma matriz de condutividade térmica simétrica e positiva $\tilde{\mathbf{k}}$ comum a todos os subdomínios de mesmo material após ligeiras manipulações (HAAS e KUHN, 2003)

$$\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{G}_{qT} \mathbf{G}_{TT}^{-1} \mathbf{G}_{Tq} - \mathbf{G}_{qq} \quad (20)$$

onde \mathbf{G}_{ij} são as matrizes que representam as integrais dupla das equações (14) e (15).

Por fim, é necessário propor um lado direito eficiente que conecte todos os subdomínios e faça compatibilidade da temperatura e fluxo de calor nas interfaces das regiões. Dessa forma, o fluxo de calor de contorno \mathbf{q} é convertido em vetor de fluxo de calor nodal equivalente $\bar{\mathbf{q}}$ na interface através de

$$\bar{\mathbf{q}} = \mathbf{M}\mathbf{q} \quad (21)$$

onde

$$\mathbf{M} = \int_{\Gamma} \boldsymbol{\psi}^T \boldsymbol{\psi} d\Gamma \quad (22)$$

Substituindo as equações (20) e (21) na equação (8), encontra-se o reduzido sistema algébrico de equações muito semelhante a uma matriz de condutividade térmica usada no MEF

$$\mathbf{M} \tilde{\mathbf{k}} \mathbf{T} = \bar{\mathbf{q}} \quad \therefore \quad \mathbf{k} \mathbf{T} = \bar{\mathbf{q}} \quad (23)$$

Apesar da semelhança, espera-se que o uso do MEC permita uma mudança qualitativa nas aproximações das temperaturas e fluxo dentro do domínio. Essa alteração, prevê para o cálculo das propriedades efetivas melhores aproximações para menores VRE.

Portanto, a matriz de condutividade térmica de um subdomínio quadrado unitário homogêneo (Figura 11), pode ser expressa por

$$\mathbf{k} = k \begin{bmatrix} a & -c & -b & -c \\ -c & a & -c & -b \\ -b & -c & a & -c \\ -c & -b & -c & a \end{bmatrix} \quad (24)$$

com $a = 5/18$, $b = 4/18$ e $c = 5/180$ para o MEC e $a = 2/3$, $b = 1/3$ e $c = 1/6$ para o MEF.

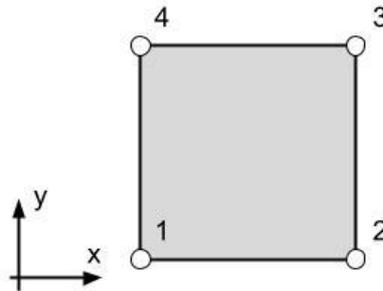


Figure 11 – Graus de liberdade de um subdomínio baseado em *Pixels*.

3.4. ESTRATÉGIAS COMPUTACIONAIS

As implementações mais tradicionais do MEC, usando *solvers* diretos ou iterativos, consistem em armazenar em memória RAM todo o sistema de equações do modelo físico. Mesmo usando técnicas como Decomposição de Domínio para reduzir a quantidade de memória usada e a complexidade do problema, esse tipo de arranjo pode não ser suficiente para soluções de grandes problemas como são nos modelos baseados em imagens.

Uma abordagem alternativa para este problema é usar um método baseado nos *Pixels* das imagens, no qual são criados os subdomínios com a mesma geometria e orientação, resultando em uma estrutura similar a uma malha regular. No programa do MEC para homogeneização de condutividade térmica (Algoritmo 1), cada subdomínio representa uma fase do material heterogêneo da imagem, conseqüentemente, pode ser atribuído a todos os subdomínios com as mesmas propriedades físicas uma mesma matriz de condutividade térmica. A principal vantagem desse fato é reduzir tremendamente o uso de CPU e memória RAM, pois é necessário armazenar e calcular apenas uma matriz de condutividade térmica por material da imagem.

Algoritmo 1 MEC para homogeneização de condutividade térmica

- 1: **Entrada:** imagem digital, propriedades dos materiais, tolerância GCP
 - 2: **Saída:** matriz de propriedades térmicas efetivas $\bar{\mathbf{k}}$
 - 3: Gera mapa de graus de liberdade
 - 4: Gera mapa de materiais dos subdomínios
 - 5: Calcula a matriz de condutividade dos subdomínios \mathbf{k}^r para cada material
 - 6: **for** ($i = 0, \dots, \dim(\bar{\mathbf{k}})$) **do**
 - 7: Montagem do vetor do lado direito \mathbf{q}_i
 - 8: Resolve o sistema de equações $\mathbf{KT} = \mathbf{q}$ (com EPE and GCP)
 - 9: Calcula o fluxo médio de calor nos subdomínios
 - 10: Atualização da coluna i da matriz $\bar{\mathbf{k}}$
 - 11: **end for**
-

Como os modelos gerados através de imagens podem ser grandes, é necessário utilizar uma solução diferente dos *solvers* diretos como mostra a Tabela 1 (HUGHES *et al.*, 1983), pois estes consomem muita memória na montagem de todo o sistema de equações. Uma possível solução para contornar o problema em questão, muito utilizada no MEF, é usar a técnica EPE junto com o GCP em processamento serial (Algoritmo 2). Em suma, essas técnicas combinadas preservam a velocidade computacional, reduzem o uso de memória e desacoplam a solução do domínio resolvendo diretamente as equações em cada subdomínio em vez de um sistema cheio.

Tabela 1 – Ordem do número de operações de *solvers* de sistema de equações.

Métodos de solução de sistemas	2D
Direto com fatoração	$O(N^4)$
Direto por retrossubstituição	$O(N^3)$
Elemento-por-Elemento	$O(n_{its}N^2)$

Fonte: Hughes *et al.* (1983).

O outro tópico particularmente importante ao investigar a homogeneização numérica é a garantia de que a convergência das propriedades efetivas do VRE ocorrerá corretamente, mesmo em pequenos volumes. Em linha com estudos anteriores (TERADA *et al.*, 2000), o uso de condições de contorno periódicas pode levar a resultados mais precisos de forma mais rápida do que outras rotinas. No MEC, as condições de contorno periódicas podem ser aplicadas atribuindo o mesmo grau de liberdade aos pares de nós correspondentes nas superfícies opostas.

Algorithm 2 Gradiente Conjugado Precondicionado com Elemento-por-Elemento

```

1: Entrada:  $\mathbf{k}_e, \mathbf{b}$ , tolerância, subdomínios, imax
2: for ( $e = 0, \dots, \text{subdomínios}$ ) do Inicializa o preconditionador (Jacobi)
3:    $\mathbf{M}_e \leftarrow \text{diag}(\mathbf{k}_e)$ 
4: end for
5:  $i \leftarrow 0$ 
6:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$ 
7:  $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{b}$ 
8:  $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}$ 
9:  $\mathbf{q}_{temp} \leftarrow \mathbf{0}$ 
10:  $\delta_{new} \leftarrow \langle \mathbf{r}, \mathbf{d} \rangle$ 
11:  $\delta_0 \leftarrow \delta_{new}$ 
12: while ( $i < imax$  e  $\delta_{new} > \text{tolerância}^2 \delta_0$ ) do
13:   for ( $e = 0, \dots, \text{subdomínios}$ ) do
14:      $\mathbf{q}_{temp} \leftarrow \mathbf{k}_e \mathbf{d}_e$ 
15:      $\mathbf{q}_e \leftarrow \mathbf{q}_e + \mathbf{q}_{temp}$ 
16:   end for
17:    $\alpha \leftarrow \delta_{new} / \langle \mathbf{d}, \mathbf{q} \rangle$ 
18:    $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}$ 
19:    $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \alpha \mathbf{q}$ 
20:    $\mathbf{q} \leftarrow \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}$ 
21:    $\delta_{old} \leftarrow \delta_{new}$ 
22:    $\delta_{new} \leftarrow \langle \mathbf{r}, \mathbf{q} \rangle$ 
23:    $\beta \leftarrow \delta_{new} / \delta_{old}$ 
24:    $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{q} + \beta \mathbf{d}$ 
25:    $\mathbf{q} \leftarrow \mathbf{0}$ 
26:    $i \leftarrow i + 1$ 
27: end while

```

Para verificar o procedimento proposto pelo MEC, foi desenvolvido inicialmente um software em MATLAB®. Entretanto, os tamanhos dos modelos (1500×1500) e o custo computacional para a resolução do sistema de equações foi um fator decisivo para alterar para a linguagem de programação dinâmica Julia (versão 1.5.2). Ressalta-se que Julia (PERKEL, 2019) possui um ambiente onde é fácil implementar e desenvolver os códigos computacionais, depurar, testar algoritmos e plotar os resultados. O código foi escrito com precisão dupla (64 bits) e é facilmente transportável para várias plataformas de computação de alto desempenho. Tão importante quanto, o código foi otimizado para funcionar em computadores pessoais usando o gerenciamento de memória de forma mais eficiente e relativamente rápida.

4. RESULTADOS

Primeiramente, para verificar a convergência, estabilidade e a precisão nos cálculos do fluxo e condutividade térmica efetiva foram utilizados o MEC e o MEF baseados em *Pixels* em problemas com dois materiais sintéticos. Todos os resultados desta seção foram obtidos utilizando o código em Julia do repositório *pfem4ec* elaborado por Pereira e Sapucaia (2021). O código *pfem4ec* foi otimizado e desenvolvido para realizar a homogeneização computacional usando o MEF baseado em *Pixels* com o menor consumo de memória, sendo, entretanto, necessária uma pequena alteração na matriz de rigidez e no cálculo de fluxos internos para a utilização do MEC. Paralelamente, todos os modelos utilizados no *pfem4ec* foram gerados através do programa *pytomoviewer* (Figura 12) disponível no Zenodo (SAPUCAIA e PEREIRA, 2020).

Uma observação importante deve ser feita com relação aos subdomínios do MEC e aos elementos do MEF. Em ambos os métodos existe a preservação da forma do *Pixel*, tamanho e número de graus de liberdade das imagens originais. Logo, podem-se utilizar os mesmos modelos do MEC nas análises do MEF. Deste modo, os modelos foram gerados uma única vez por meio das imagens originais no programa *pytomoviewer*. Posteriormente, todos os modelos foram analisados utilizando os dois métodos. Todas as simulações numéricas foram realizadas em um *notebook* Dell com sistema operacional Windows, com processador Intel Core i7-8665U (1,90 GHz) e 32 GB de memória RAM.

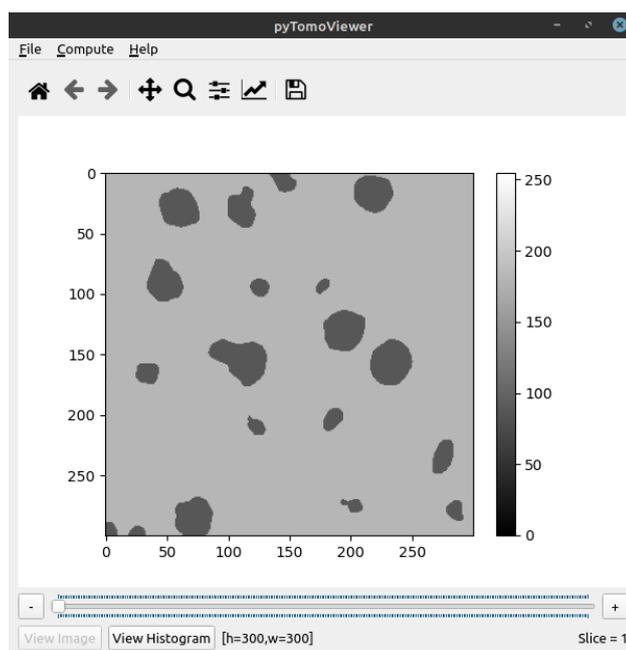


Figura 12 – Interface do programa *pytomoviewer* com imagem que será convertida em modelo numérico. Fonte: Sapucaia e Pereira (2020).

4.1. PLACA COM INCLUSÃO CIRCULAR PERIÓDICA

Como primeira demonstração de homogeneização numérica de condutividade térmica utilizando a implementação do MEC baseada em *Pixels*, optou-se por uma estratégia comum que consiste em utilizar um problema bem estudado na literatura. A escolha desse problema foi desafiadora e, portanto, escolheu-se uma solução analítica com arranjos geométricos conhecidos. Como visto na Figura 13, o compósito é constituído por dois materiais diferentes em uma estrutura periódica perfeitamente distribuída em uma disposição hexagonal regular de cilindros embutidos em uma matriz. Para esse arranjo, existe solução analítica para as propriedades efetivas em diferentes problemas físicos, como por exemplo, condutividade térmica, elétrica, permissividade dielétrica, entre outros (PERRINS *et al.*, 1979).

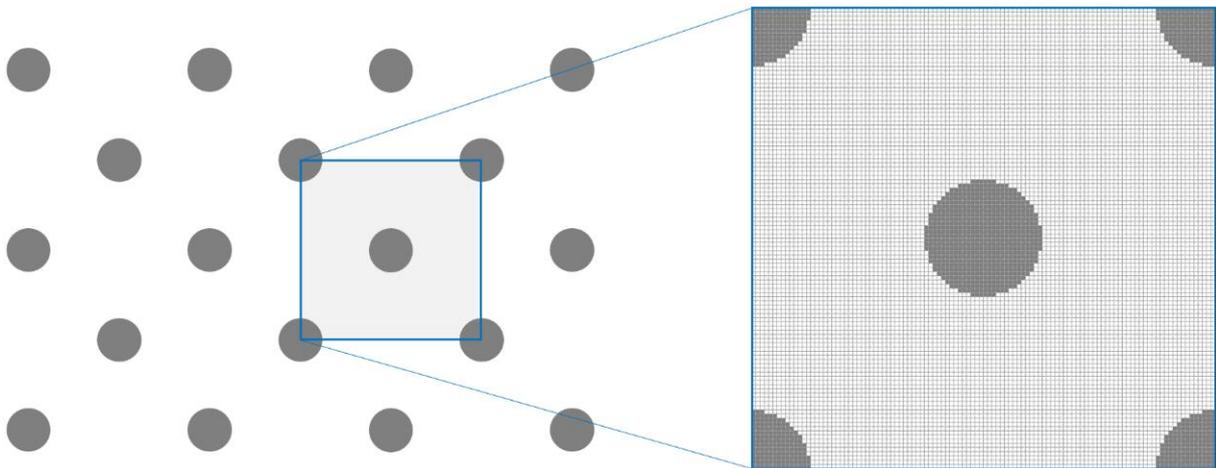


Figura 13 – Disposição hexagonal regular de cilindros incorporados em uma matriz e modelo correspondente.

Para este arranjo, a condutividade térmica efetiva k_h do compósito é governada pela fração de volume f da região ocupada pelos cilindros em relação a matriz. Sendo a condutividade térmica k_1 dos cilindros (alta condutividade) e a condutividade térmica k_2 da matriz (baixa condutividade), a solução analítica pode ser escrita como

$$k_h = k_2 \left(1 - \frac{2\beta f}{1 + \beta f - 0.075422\beta^2 f^6} \right) \quad (25)$$

onde

$$\beta = \frac{(k_2 - k_1)}{(k_2 + k_1)} \quad (26)$$

Para garantir a precisão dos cálculos utilizando o MEC, os subdomínios no modelo VRE utilizado, foram gradativamente refinados até que a convergência para a condutividade térmica efetiva fosse alcançada. Para esta validação, o raio do cilindro utilizado é $r = 0,125L$ (sendo L os lados da célula unitária), a fração de volume do cilindro é $f = 2\pi r^2$ e as condutividades térmicas são $k_1 = 10 \text{ W/(mK)}$ e $k_2 = 1 \text{ W/(mK)}$. Usando a solução analítica da Eq. (25), a condutividade térmica efetiva desse material sintético é $k_h = 1,17468 \text{ W/(mK)}$. Usando os métodos numéricos, MEC e MEF, as condutividades térmicas efetivas para diferentes tamanhos de imagens são mostradas esquematicamente na Tabela 2.

Tabela 2 – Condutividade térmica efetiva do modelo com disposição hexagonal regular de cilindros usando diferentes discretizações.

Tamanho da Imagem	Total de Pixels (subdomínios)	Condutividade Térmica Efetiva (MEF) W/(m·K)	Condutividade Térmica Efetiva (MEC) W/(m·K)
110 × 110	12100	1,18272	1,18181
120 × 120	14400	1,18036	1,17959
150 × 150	22500	1,17933	1,17866
110 × 110	12100	1,18272	1,18181
120 × 120	14400	1,18036	1,17959
150 × 150	22500	1,17933	1,17866
200 × 200	40000	1,17780	1,17733
350 × 350	122500	1,17629	1,17600
600 × 600	360000	1,17557	1,17541
800 × 800	640000	1,17525	1,17513
1200 × 1200	1440000	1,17502	1,17494
1500 × 1500	2250000	1,17486	1,17480

Apesar da utilização de um modelo baseado em *Pixel* que não descreve de forma adequada a circunferência (Figura 14) da solução analítica é possível observar uma boa aproximação dos resultados com a solução analítica para ambos métodos. De certo modo, o MEC nos modelos testados possui uma melhor aproximação da propriedade efetiva. Essas observações ficam mais evidentes ao analisar o gráfico de convergência da Figura 15 (a) e o erro relativo da Figura 15 (b) em escalas logarítmicas para cada tamanho de imagem.

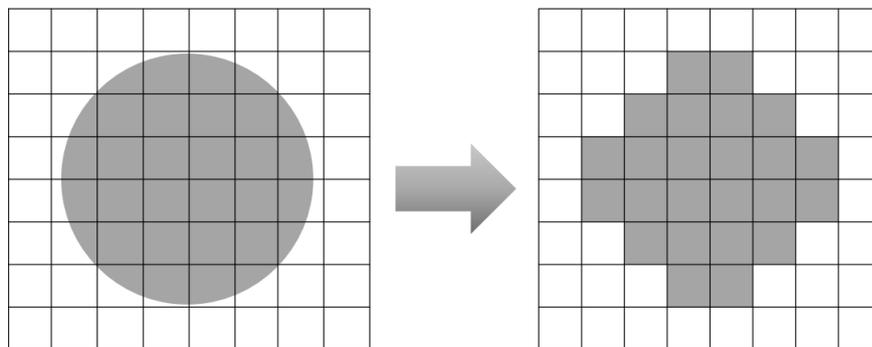


Figura 14 – Exemplo de irregularidades provocada por modelo baseado em *Pixels* ao tentar reproduzir geometrias curvas.

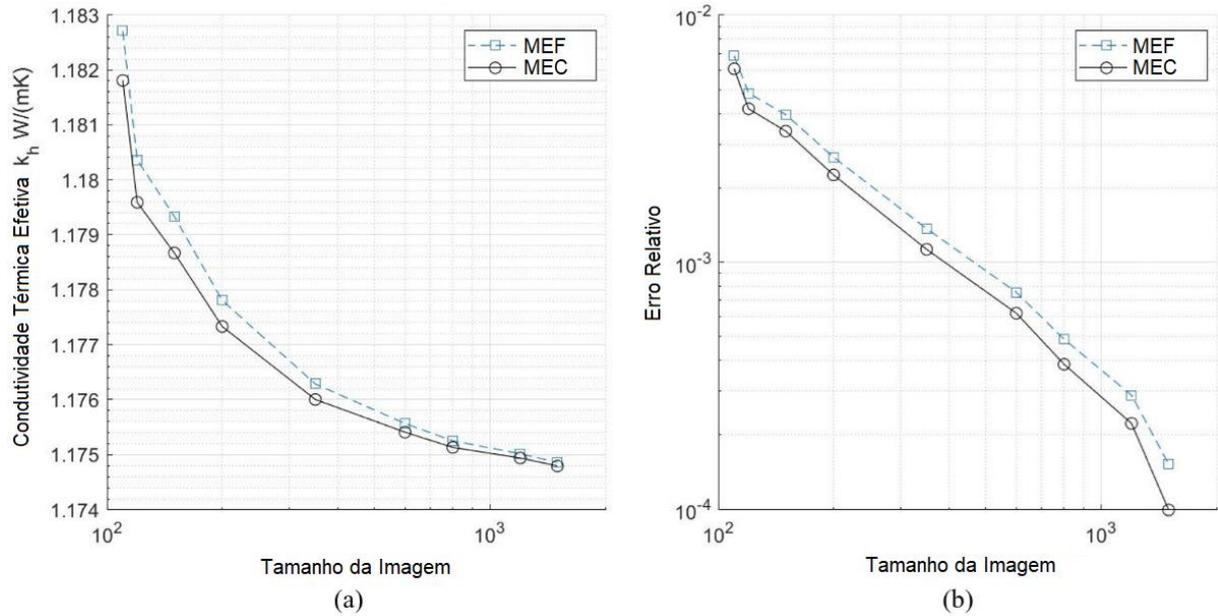


Figura 15 – Gráficos de convergência: (a) Condutividade térmica efetiva de uma disposição hexagonal regular de cilindros usando MEF e MEC; e (b) comparação do erro relativo entre MEF e MEC.

Os gráficos em escala logarítmica ressaltam as diferenças de resultados dos métodos em relação ao número de *Pixels* na aresta. É notável que em ambos os casos o erro relativo diminui à medida que aumenta o tamanho da imagem. Vale ressaltar também que existem dois tipos diferentes de erros acumulados nesta análise: o erro numérico e o erro geométrico. O primeiro está intimamente relacionado aos métodos numéricos (MEF e MEC) utilizados, bem como os algoritmos de resolução do sistema e o critério de parada. O segundo erro está relacionado a modelagem de cilindros através de *Pixels*. Isso sugere uma nova perspectiva a respeito do uso de MEC baseado em *Pixels*, uma vez que o custo computacional entre os métodos é praticamente idêntico e os resultados de condutividade térmica efetiva são, em princípio, melhores que o MEF.

4.2. PLACA COM INCLUSÃO QUADRADA PERIÓDICA

A fim de investigar a lacuna entre os métodos numéricos e remover qualquer influência relacionada a mudança da geometria no modelo após o refinamento do problema, foi proposto um modelo com geometria coincidente aos subdomínios. O modelo é bastante semelhante à disposição hexagonal regular de cilindros, possui estrutura periódica e mesmas propriedades físicas. O material heterogêneo é composto por duas fases diferentes com

condutividades térmicas $k_1 = 10 \text{ W/(mK)}$ e $k_2 = 1 \text{ W/(mK)}$. A respeito do arranjo espacial, a inclusão é uma fibra quadrada com disposição regular quadrada como mostrado na Figura 16.

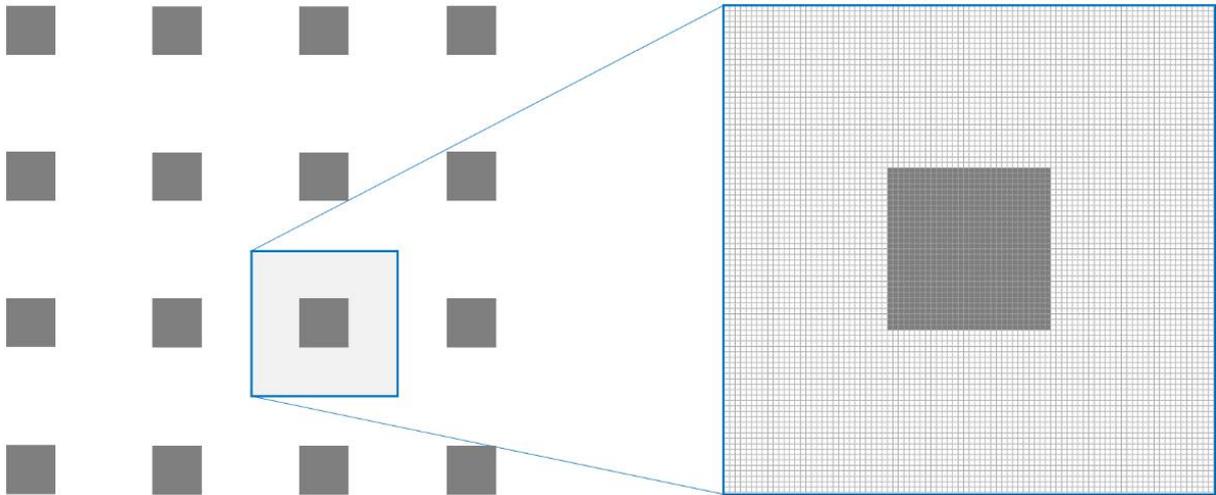


Figura 16 – Disposição quadrada regular de fibras quadradas incorporadas em uma matriz e o modelo correspondente.

Para o modelo escolhido não existe solução analítica, embora seja possível observar na Tabela 3 uma convergência para um resultado com o aumento do refinamento. Como era esperado devido aos resultados anteriores, é possível observar que o MEC possui mesmo com poucos subdomínios respostas melhores que o MEF.

Tabela 3 – Condutividade térmica efetiva do modelo com disposição quadrada regular de fibras quadradas usando diferentes discretizações.

Tamanho da Imagem	Total de Pixels (subdomínios)	Condutividade Térmica Efetiva (MEF) W/(m·K)	Condutividade Térmica Efetiva (MEC) W/(m·K)
3 × 3	9	1,25000	1,22222
9 × 9	81	1,22054	1,21566
15 × 15	225	1,21642	1,21410
30 × 30	900	1,21397	1,21313
60 × 60	3600	1,21306	1,21275
90 × 90	8100	1,21282	1,21265
150 × 150	22500	1,21267	1,21259
300 × 300	90000	1,21259	1,21256
450 × 450	202500	1,21256	1,21254

Por outro lado, observando os resultados apresentados na Figura 6 em comparação com os resultados da Figura 4, é possível demonstrar que: (i) as mudanças na discretização da geometria do problema através de *Pixels* afetam de fato o cálculo das propriedades efetivas; (ii) o cálculo das propriedades efetivas usando MEC converge mais rápido do que com o MEF para um mesmo VRE (Figura 17-a); e (iii) independente do tamanho da imagem a taxa de convergência dos métodos computacionais são bem semelhantes (Figura 17-b).

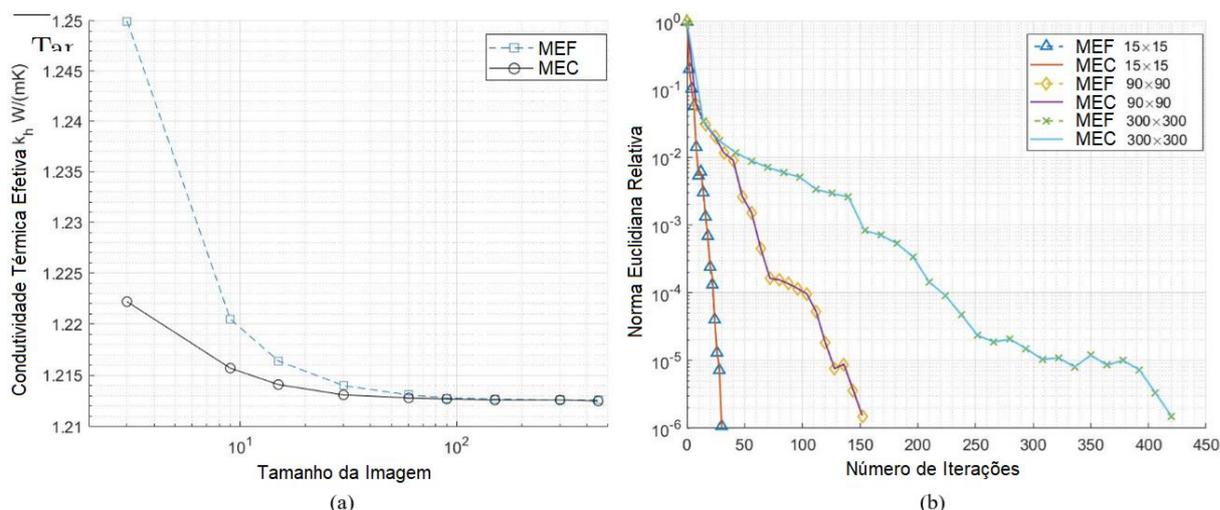


Figura 17 – Gráficos de convergência: (a) Condutividade térmica efetiva de uma disposição quadrada regular de fibras quadradas usando MEF e MEC; e (b) comparação do erro relativo de acordo com o número de iterações do MEF e MEC para diferentes discretizações.

4.3. FERRO FUNDIDO NODULAR GGG40

É importante ressaltar que apesar de materiais compósitos como o ferro fundido nodular aparentarem macroscopicamente serem homogêneos, na verdade podem conter distribuições aleatórias entre suas fases constituintes. O ferro fundido nodular pode ser dividido em duas fases: uma matriz ferrítica e inclusões de grafita. A grafita se apresenta através de esferas com tamanhos diferentes que podem ser manipulados através de processos fabris. Apesar dos esforços de vários pesquisadores, a previsão das propriedades efetivas experimentais de materiais compósitos é uma tarefa árdua. Nesse sentido, a predição das propriedades efetivas desse material através de simulações pode vir a ser uma alternativa válida desde que seja considerado o comportamento de pequenos nódulos de grafita que apresentam tamanhos, formas e arranjos diferenciados.

Uma vez que existem imagens de microtomografia computadorizada de raios-X para o material estudado, os modelos baseados em imagens são adequados para o uso de métodos de homogeneização numérica. Afim de estimar a condutividade térmica efetiva de uma amostra real, analisar a influência dos nódulos de grafita no tamanho do VRE e determinar a validade do MEC para esses modelos, foram utilizadas imagens do ferro fundido ASTM A536 (Metalrens, Minas Gerais, Brasil) ou GGG40 (PEREIRA *et al.*, 2018; PEREIRA *et al.*, 2020). A Figura 18 mostra uma seção transversal da amostra de ferro fundido (tamanho de *Pixel* 11 μm) de dimensões 6 mm \times 7 mm \times 24 mm com diferentes regiões de interesse segmentadas: 100 \times 100, 200 \times 200, 300 \times 300, 400 \times 400, 500 \times 500 e 600 \times 600 *Pixels*.

Ainda mais, todos os modelos foram gerados utilizando o filtro *non-local means*, segmentação utilizando TWS e *pytomviewer*.

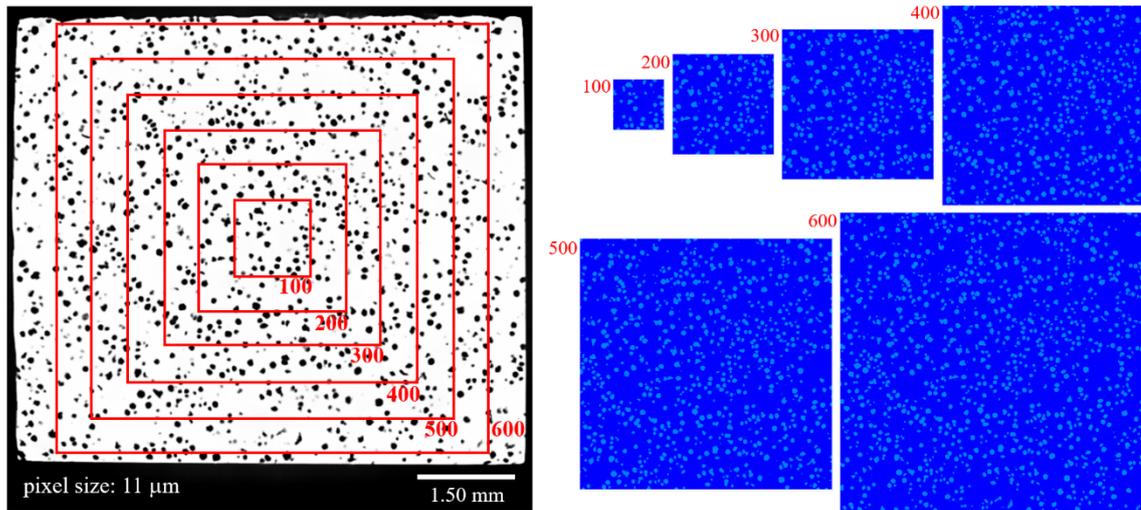


Figura 18 – Amostra de ferro fundido nodular GGG40 com $11\ \mu\text{m}$ e regiões de interesse com 100×100 , 200×200 , 300×300 , 400×400 , 500×500 e 600×600 *Pixels*.

Logo após a geração do modelo de ferro fundido do MEC gerados a partir da imagem micro-CT de $11\ \mu\text{m}$ é obrigatória definir nas duas fases, matriz ferrítica e grafita, os valores de condutividade térmica de $80,4\ \text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ e $129,0\ \text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ (LIU *et al.*, 2019), respectivamente. Além disso, a fração volumétrica de cada modelo pode ser visualizada na Tabela 4. Naturalmente, na Tabela 5 são apresentados os valores de condutividade térmica efetiva para cada um dos modelos utilizando o MEC.

Tabela 4 – Frações volumétricas de Matriz Ferrítica e Grafita para diferentes tamanhos de imagens.

Tamanho da Imagem	Volume de Matriz Ferrítica	Volume de Grafita
100×100	0,8390	0,1610
200×200	0,8474	0,1526
300×300	0,8488	0,1512
400×400	0,8501	0,1499
500×500	0,8565	0,1435
600×600	0,8599	0,1401

Tabela 5 – Condutividade térmica efetiva de modelos de ferro fundido nodular GGG40 usando MEC.

Tamanho da Imagem	Condutividade Térmica Efetiva $k_{xx} W/(mK)$	Condutividade Térmica Efetiva $k_{xy} W/(mK)$	Condutividade Térmica Efetiva $k_{yx} W/(mK)$	Condutividade Térmica Efetiva $k_{yy} W/(mK)$
100 × 100	86,74554	0,01085	0,01088	86,6484
200 × 200	86,36020	0,00645	0,00645	86,3529
300 × 300	86,30021	-0,01104	-0,01098	86,2969
400 × 400	86,24187	-0,00667	-0,00667	86,2483
500 × 500	85,99548	-0,00753	-0,00750	85,9844
600 × 600	85,85569	-0,00582	-0,00582	85,8491

Para estes casos, o tamanho da região de interesse utilizada e a distribuição da grafita ao longo dos eixos vertical e horizontal afetam os resultados da homogeneização computacional. Essas descobertas apoiam a noção de que o aumento da região de interesse conduz a melhores resultados de propriedades efetivas. Além disso, o estudo mostra também que a condutividade térmica efetiva do ferro fundido nodular calculada com o MEC apresenta uma ligeira diferença entre o valor médio da condutividade térmica efetiva homogeneizada e condutividade térmica axial inferior a 0,1%. Diante disso, e considerando a ordem das magnitudes da condutividade térmica efetiva transversais suficientemente baixas, o ferro fundido nodular GGG40 pode ser considerado como um material isotrópico para propriedades térmicas.

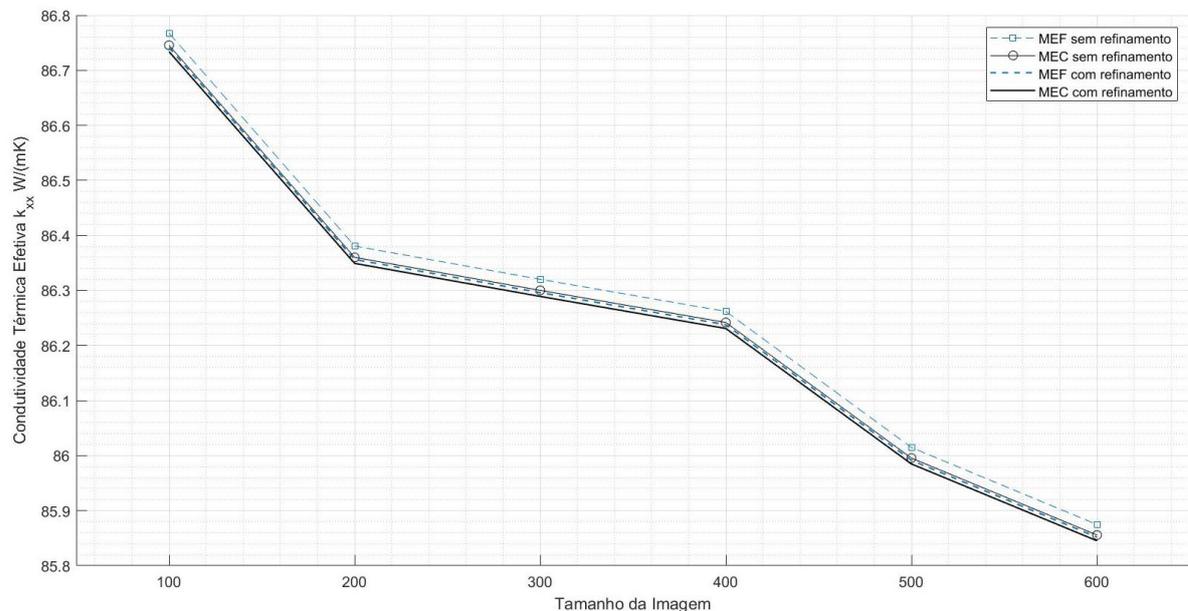


Figura 19 – Condutividade térmica efetiva de amostra de ferro fundido nodular usando MEF e MEC com e sem refinamento para diferentes tamanhos de imagens.

Mais observações também podem ser retiradas desse exemplo quando se realiza um refinamento nos subdomínios do modelo. O refinamento consiste em discretizar um subdomínio ou *Pixel* igualmente nos dois eixos, fazendo um *Pixel* se tornar quatro. Como pode ser observado na Figura 19, o resultado obtido utilizando um refinamento do MEF equivale ao resultado do MEC sem refinamento. Isso implica em inúmeras vantagens do MEC frente ao método tradicional já que o tempo de processamento e custo computacional aumentam com o refinamento.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foram apresentados os conceitos e a metodologia para a criação de um programa para solução de problemas de homogeneização numérica de condutividade térmica de imagens utilizando o Método dos Elementos de Contorno Simétrico de Galerkin (MEC). Foram também realizadas comparações do MEC com o Método dos Elementos Finitos (MEF) a fim de observar o desempenho da metodologia proposta frente a um método consagrado na literatura.

Diante dos resultados deste estudo, pode ser entendido como objetivo alcançado a implementação de um programa de homogeneização computacional utilizando o MEC com uma nova metodologia baseada em *Pixels* de imagens. Esse feito se deve principalmente a estratégia da utilização da Decomposição de Domínios que permitiu dividir um problema grande e complexo, que é a imagem de um material heterogêneo, em pequenos subdomínios fáceis de serem resolvidos. Entende-se igualmente como objetivo alcançado a utilização de uma técnica extremamente poderosa de resolução de sistemas, mas não muito comum aos MEC devido ao sistema de equações final, que é Gradiente Conjugado Precondicionado.

Em resumo, o desenvolvimento do programa por si só, pode ser considerado como um aspecto promissor no desenvolvimento da homogeneização computacional utilizando o MEC. Entretanto, é importante ressaltar que os resultados obtidos em comparação com o MEF apontam resultados promissores do MEC. A metodologia utilizada apresenta bons resultados em comparação a modelos analíticos, melhores resultados em relação ao MEF para uma mesma discretização, possui competitividade em relação a tempo de processamento e controle do uso de memória.

Idealmente, essas descobertas devem ser replicadas em estudos de outros materiais heterogêneos e de outros problemas físicos. Pesquisas futuras devem considerar mais problemas físicos, como elasticidade e permeabilidade, e devem investigar os resultados dos valores das propriedades efetivas com outros métodos computacionais também. Também como trabalhos futuros é desejável que os subdomínios sejam em três dimensões utilizando ao invés dos *Pixels* os *Voxels* (volume + *Pixel*).

Em conclusão, entende-se também que o uso da linguagem de programação Julia se adequa bastante a programação científica de fenômenos físicos pois fornece as ferramentas necessárias a leitura de arquivos, resolução de sistema e visualização de resultados. Resta, no entanto, em trabalhos futuros uma maior investigação no desenvolvimento de algoritmos que consigam utilizar resolução de sistema de forma paralela.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDREASSEN, E.; ANDREASEN, C. S. How to determine composite material properties using numerical homogenization. *Computational Materials Science*, vol. 83, p. 488–495, 2014.

ARGANDA-CARRERAS, I.; KAYNIG, V.; RUEDEN, C.; ELICEIRI, K. W.; SCHINDELIN, J.; CARDONA, A.; SEBASTIAN SEUNG, H. Trainable Weka Segmentation: a machine learning tool for microscopy pixel classification. *Bioinformatics*, vol. 33, n. 15, p. 2424–2426, 2017.

BARBERO, E. J. *Introduction to composite materials design*. 3. ed. New York: CRC Press, 2017.

BENSOUSSAN, A.; LIONS, J.-L.; PAPANICOLAOU, G. *Asymptotic analysis for periodic structures*, Amsterdam: North Holland, 1978.

BERRYMAN, J. G.; BLAIR, S. C. Kozeny–Carman relations and image processing methods for estimating Darcy’s constant. *Journal of Applied Physics*, vol. 62, n. 6, p. 2221–2228, 15 Sep. 1987.

BLUNT, M. J.; BIJELJIC, B.; DONG, H.; GHARBI, O.; IGLAUER, S.; MOSTAGHIMI, P.; PALUSZNY, A.; PENTLAND, C. Pore-scale imaging and modelling. *Advances in Water Resources*, vol. 51, p. 197–216, 2013.

BURGER, N.; LAACHACHI, A.; FERRIOL, M.; LUTZ, M.; TONIAZZO, V.; RUCH, D. Review of thermal conductivity in composites: Mechanisms, parameters and theory. *Progress in Polymer Science*, vol. 61, p. 1–28, 2016.

CAREY, G. F.; JIANG, B.-N. Element-by-element linear and nonlinear solution schemes. *Communications in Applied Numerical Methods*, vol. 2, n. 2, p. 145–153, 1986.

CIORANESCU, D.; PAULIN, JEAN, S. J. Homogenization in open sets with holes. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 71, n. 2, p. 590–607, 1979.

DARBON, J.; CUNHA, A.; CHAN, T. F.; OSHER, S.; JENSEN, G. J. Fast nonlocal filtering applied to electron cryomicroscopy. *2008 5th IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro*, [S. L.], p. 1331–1334, IEEE, 2008.

DONDERO, M.; CISILINO, A. P.; CARELLA, J. M.; TOMBA, J. P. Effective thermal conductivity of functionally graded random micro-heterogeneous materials using representative volume element and BEM. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 54, n. 17–18, p. 3874–3881, 2011.

ENIKOLOPYAN, N. S.; FRIDMAN, M. L.; STALNOVA, I. O.; POPOV, V. L. Filled polymers: mechanical properties and processability. *Advances in Polymer Science*, vol. 96, p. 1–67, 1990.

GILORMINI, P.; BRÉCHET, Y. *Syntheses: Mechanical properties of heterogeneous media: Which material for which model? Which model for which material? Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 7, n. 5, p. 805–816, 1999.

GRAY, L. J.; PAULINO, G. H. Symmetric galerkin boundary integral formulation for interface and multi-zone problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 40, n. 16, p. 3085–3101, 1997.

HAAS, M.; KUHN, G. Mixed-dimensional, symmetric coupling of FEM and BEM. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 27, n. 6, p. 575–582, 2003.

HALE, D. K. The physical properties of composite materials. *Journal of Materials Science*, vol. 11, n. 11, p. 2105–2141, 1976.

HASSANI, B.; HINTON, E. A review of homogenization and topology optimization I - Homogenization theory for media with periodic structure. *Computers and Structures*, vol. 69, n. 6, p. 707–717, 1998.

HOLLISTER, S. J.; KIKUCHI, N. A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites. *Computational Mechanics*, vol. 10, n. 2, p. 73–95, 1992.

HOLLISTER, S. J.; RIEMER, B. A. Digital-image-based finite element analysis for bone microstructure using conjugate gradient and Gaussian filter techniques. In: *Mathematical Methods in Medical Imaging II*. International Society for Optics and Photonics, p. 95-106, 1993.

HUGHES, T.J.R.; LEVIT, I.; WINGET, J.; An element-by-element solution algorithm for problems of structural and solid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 36, n. 2, p. 241–254, 1983.

KANIT, T.; FOREST, S.; GALLIET, I.; MOUNOURY, V.; JEULIN, D. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, vol. 40, n. 13–14, p. 3647–3679, 2003.

KEYAK, J. H.; SKINNER, H. B. Three-dimensional finite element modelling of bone: effects of element size. *Journal of Biomedical Engineering*, vol. 14, n. 6, p. 483–489, 1992.

LARSSON, F.; RUNESSON, K.; SAROUKHANI, S.; VAFADARI, R. Computational homogenization based on a weak format of micro-periodicity for RVE-problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 200, n. 1–4, p. 11–26, 2011.

LIU, X.; RÉTHORÉ, J.; BAIETTO, M. C.; SAINOT, P.; LUBRECHT, A. A. An efficient strategy for large scale 3D simulation of heterogeneous materials to predict effective thermal conductivity. *Computational Materials Science*, vol. 166, n. November 2018, p. 265–275, 2019.

LUKÁŠ, D.; OF, G.; ZAPLETAL, J.; BOUCHALA, J. A boundary element method for homogenization of periodic structures. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, vol. 43, n. 3, p. 1035–1052, 2020.

LUX, J.; AHMADI, A.; GOBBÉ, C.; DELISÉE, C. Macroscopic thermal properties of real fibrous materials: Volume averaging method and 3D image analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 49, n. 11–12, p. 1958–1973, 2006.

NGUYEN, V.-D.; BÉCHET, E.; GEUZAINÉ, C.; NOELS, L. Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Computational Materials Science*, vol. 55, n. 13–14, p. 390–406, 2012.

OTERO, F.; OLLER, S.; MARTINEZ, X.; SALOMÓN, O. Numerical homogenization for composite materials analysis. Comparison with other micro mechanical formulations. *Composite Structures*, vol. 122, p. 405–416, 2015.

PEREIRA, A., ANFLOR, C., BETANCUR, A., LEIDERMAN, R. ds-uct-001: Cast Iron GGG40: X-Ray micro-CT of a nodular cast iron sample class GGG40. v1.0.0 [Data set]. Zenodo. 2020. <http://doi.org/10.5281/zenodo.3858516>

PEREIRA, A.; COSTA, M.; ANFLOR, C.; PARDAL, J.; LEIDERMAN, R. Estimating the Effective Elastic Parameters of Nodular Cast Iron from Micro-Tomographic Imaging and Multiscale Finite Elements: Comparison between Numerical and Experimental Results. *Metals*, vol. 8, n. 9, p. 695, 2018.

PEREIRA, A. M. B.; SAPUCAIA, V. W. Pixel-based Finite Element Method for computing effective electrical conductivity. 2020. Disponível em: <https://github.com/LCC-UFF/pfem4ec>. Acesso em: 02 fev. 2021.

PERKEL, J. M. Julia: come for the syntax, stay for the speed. *Nature*, vol. 572, n. 7767, p. 141–142, 30 2019.

PERRINS, W. T.; MCKENZIE, D. R.; MCPHEDRAN, R. C. Transport properties of regular arrays of cylinders. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 369, n. 1737, p. 207–225, 1979.

PROGELHOF, R. C.; THRONE, J. L.; RUETSCH, R. R. Methods for predicting the thermal conductivity of composite systems: a review. *Polymer Engineering and Science*, vol. 16, n. 9, p. 615–625, 1976.

SANCHEZ-PALENCIA, E. *Non-homogeneous media and vibration theory*, Berlin: Springer-Verlag, 1980.

SAPUCAIA, V. W.; PEREIRA, A. M. B. LCC-UFF/pytomoviewer: pytomoviewer v1.0.0 Zenodo. 2020. <http://doi.org/10.5281/zenodo.4315330>

SCHNEIDER, C. A.; RASBAND, W. S.; ELICEIRI, K. W. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. *Nature Methods*, vol. 9, n. 7, p. 671–675, 2012.

SONG, Y. S.; YOUN, J. R. Evaluation of effective thermal conductivity for carbon nanotube/polymer composites using control volume finite element method. *Carbon*, vol. 44, n. 4, p. 710–717, 2006.

SUKIMAN, M. S.; KANIT, T.; N'GUYEN, F.; IMAD, A.; MOUMEN, A. El; ERCHIQUI, F. Effective thermal and mechanical properties of randomly oriented short and long fiber composites. *Mechanics of Materials*, vol. 107, p. 56–70, 2017.

SUKIMAN, M. S.; ANDRIYANA, A.; ANG, B. C.; METSELAAR, H. S. C. Elastic properties of electrospun PVDF nanofibrous membranes: Experimental investigation and numerical modelling using pixel-based finite element method. *Polymer Testing*, vol. 81, n. July 2019, p. 106218, 2020.

SUN, H.; YANG, J.; REN, M. A fast watershed algorithm based on chain code and its application in image segmentation. *Pattern Recognition Letters*, vol. 26, n. 9, p. 1266–1274, 2005.

SUN, C. T.; VAIDYA, R. S. Prediction of composite properties from a representative volume element. *Composites Science and Technology*, vol. 56, n. 2, p. 171–179, 1996.

TELEJKO, T.; MALINOWSKI, Z. Application of an inverse solution to the thermal conductivity identification using the finite element method. *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 146, n. 2, p. 145–155, 2004.

TERADA, K.; MIURA, T.; KIKUCHI, N. Digital image-based modeling applied to the homogenization analysis of composite materials. *Computational Mechanics*, vol. 20, n. 4, p. 331–346, 1997.

TERADA, K.; HORI, M.; KYOYA, T.; KIKUCHI, N. Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches. *International Journal of Solids and Structures*, vol. 37, n. 16, p. 2285–2311, 2000.

TOBIAS, O. J.; SEARA, R. Image segmentation by histogram thresholding using fuzzy sets. *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 11, n. 12, p. 1457–1465, 2002.

VAN RIETBERGEN, B.; WEINANS, H.; HUISKES, R.; ODGAARD, A. Three Dimensional Analysis of a Realistic Trabecular Bone Structure. Using a Large-Scale FE-Model. *ASME-PUBLICATIONS-BED*, v. 24, p. 250-250, 1993.

VÁSÁRHELYI, L.; KÓNYA, Z.; KUKOVECZ, Á.; VAJTAI, R. Microcomputed tomography-based characterization of advanced materials: a review. *Materials Today Advances*, vol. 8, p. 100084, 2020.

VASILIEV, V. V. *Mechanics of composite structures*. Washington: CRC Press, 1993.

VINSON, J. R.; SIERAKOWSKI, R. L. *The behavior of structures composed of composite materials*. Dordrecht: Springer, 2008.

VIANNA, R. S.; CUNHA, A. M.; AZEREDO, R. B. V.; LEIDERMAN, R.; PEREIRA, A. Computing Effective Permeability of Porous Media with FEM and Micro-CT: An Educational Approach. *Fluids*, vol. 5, n. 1, p. 16, 2020.