

Doutorado

ORGANOFOSFORADOS POLIDENTADOS SIMÉTRICOS

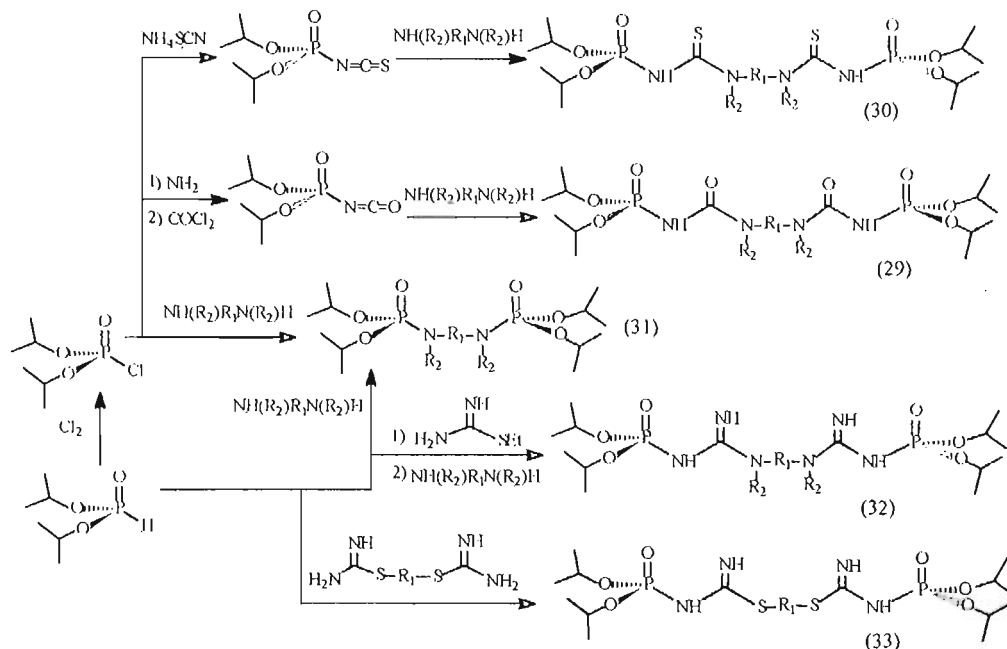
Autora: Lilia de Amorim

Orientadora: Whei Oh Lin

(Tese defendida no IME)

O presente trabalho descreve a síntese e caracterização de compostos bifosforilados simétricos visando a obtenção de materiais com potencial capacidade ligante.

Foram sintetizados 18 compostos que, de acordo com a natureza do heteroátomo participante, serão tratados por fosforiltiouréias (30), fosforiluréias (29), fosforamidas (31), fosforilisotiouréias (33) e fosforilguanidinas (32) simétricas.



O diisopropilfosfito foi utilizado como material de partida. As fosforilisotiouréias (33) e as fosforilguanidinas (32) foram obtidas através de uma reação bifásica desenvolvida por Zhao & Lin. As fosforiltiouréias (30) e as fosforiluréias (29) foram preparadas através dos respectivos intermediários diisopropoxifosforilisotiocianidato e diisopropoxifosforilsocianidato. As fosforamidas (31) foram sintetizadas pelos dois métodos, ou seja, através do diisopropilclorofosfonato e pelo sistema bifásico de Zhao & Lin.

Todos os compostos foram devidamente caracterizados por Espectrometria de Infravermelho (IV), Espectrometria de Massas e Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear (RMN).

Estudos prévios de complexação realizados através da espectrometria de UV mostram que ligantes tipo fosforiltiouréias simétricas (30) formam complexos com os íons Cu^{+2} , Zn^{+2} e Pb^{+2} .

INTERAÇÃO DE NITRO GUANIL HIDRAZONAS AROMÁTICAS TRIPANOCIDAS COM ALBUMINA DO SORO BOVINO E DNA POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Autora: *Luzineide Wanderley Tinoco*

Orientador: *José Daniel Figueroa Villar, PhD*

(Tese defendida no IME, em agosto de 1998)

A possibilidade de interação das nitro guanil hidrazonas aromáticas (NGHAs) derivadas do (*o*, *m* e *p*)-nitrobenzaldeído (GH2NB, GH3NB e GH4NB) com o DNA e com as proteínas plasmáticas foi investigada neste trabalho com o objetivo de adquirir algum conhecimento sobre o mecanismo de ação destes compostos e das reais possibilidades de sua aplicação na quimioprofilaxia do sangue contaminado por *T.cruzi* nas áreas endêmicas.

A escolha do tampão HOAc/NaOAc, com pH 4,75 a 20°C, para os estudos de interação, foi feita após um estudo sobre a síntese dos sais de NGHAs com AcO^- , Cl^- , $p\text{TsO}^-$, NO_3^- , HPO_4^{2-} , SO_4^{2-} e $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ e a influência dos diferentes contra-ânions na solubilidade das drogas. A atribuição inequívoca dos valores de deslocamento químico aos hidrogênios e carbonos das NGHAs em tampão acético foi realizada através de técnicas de RMN em uma e duas dimensões.

Foi feito um estudo sobre a possibilidade de interação intermolecular destes compostos, a qual poderia afetar os estudos posteriores de interação droga-biopolímeros. Os resultados obtidos por δ e T_1 sugerem que as três drogas apresentam uma certa tendência para a associação droga-droga, sendo a GH3NB a que mais mostra esta tendência. Estes resultados são confirmados pelos valores de τ_c determinados através da utilização de T_1^s , com a GH3NB apresentando o maior

valor de τ_c ($6,6 \times 10^{-10}$) a GH2NB com um valor intermediário ($\tau_c = 5,3 \times 10^{-10}$) e a GH4NB com o menor valor ($\tau_c = 1,06 \times 10^{-11}$).

Para complementar os estudos de interação droga-droga foi feito um estudo por modelagem molecular, que confirmou a tendência das nitro guanil hidrazonas para formar dímeros. De acordo com os resultados de modelagem molecular, consistentes com o estudo por RMN, a GH4NB, que apresenta a maior atividade tripanocida, seria a droga com os terminais catiônicos mais livres.

Na tentativa de determinar o número de sítios de interação da GH3NB por molécula de BSA e a constante de associação do complexo, foi feito um estudo por diálise de equilíbrio. Os resultados, difíceis de serem reproduzidos, mostram que a interação GH3NB-BSA é, provavelmente, fraca e inespecífica.

O estudo de interação das NGHAs com a BSA seguiu o mesmo procedimento utilizado para o estudo das NGHAs puras por RMN. Com a utilização das medidas de T_1 foi possível determinar o τ_c para as NGHAs na presença de BSA, [GH2NB ($\tau_c = 4,2 \times 10^{-9}$), GH3NB ($\tau_c = 1,5 \times 10^{-9}$) e GH4NB ($\tau_c = 1,8 \times 10^{-9}$). Considerando que quanto maior τ_c menor a mobilidade da molécula, pode-se dizer que o grau de interação das NGHAs com BSA aumenta na ordem GH3NB < GH4NB < GH2NB.

O estudo de interação das NGHAs com o DNA foi feito unicamente através das medidas de T_1 , para uma única concentração das drogas e do DNA e com temperatura constante. Este estudo mostrou que, nas condições nas quais os experimentos foram realizados, não ocorre qualquer interação entre as NGHAs e o DNA.

ESTUDOS FÍSICO-QUÍMICOS DE COMPOSTOS ORGÂNICOS CONTENDO FÓSFORO

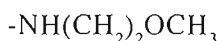
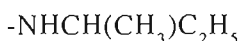
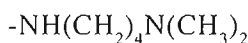
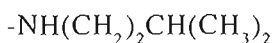
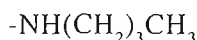
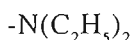
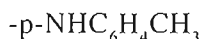
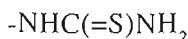
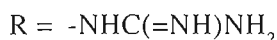
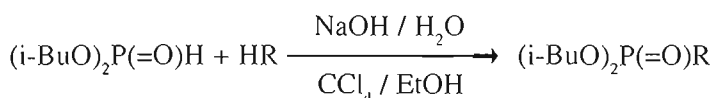
Autora: Regina Célia Rebouças Dalston

Orientadora: Whei Oh Lin

(Tese defendida no IME, em 11 de março de 1998)

O presente trabalho consiste no levantamento de dados termodinâmicos e cinéticos de dialcoxifosforilguanidinas, uréias e tiouréias. Foram determinadas as entalpias de fusão e formação de alguns desses compostos já desenvolvidos, anteriormente, no Instituto Militar de Engenharia. Foi realizado um estudo cinético da degradação da tiouréia, a temperatura ambiente, em diversos meios aquosos, em diferentes pH's, que contribuíram para a melhor definição das condições de reação de fosforilação da tiouréia.

Adicionalmente, realizou-se um estudo de basicidade, foram desenvolvidas novas substâncias derivadas do fosfito de diisobutila, de acordo com a equação geral:



A basicidade de alguns desses compostos orgânicos contendo fósforo foi determinada por titulação potenciométrica em meio acético com ácido perclórico, acrescentando acetato de mercúrio para melhorar a resolução das curvas de titulação.

Mestrado

GERÊNCIA DE CONFIGURAÇÃO DA SDH SEGUNDO A ARQUITETURA TMN: UM ESTUDO DE CASO

Autora: *Miriam Celi Luvisari Rumiantzeff*

Orientadora: *Eunice Luvizotto Medina Pissolato*

(Tese defendida no IME, em 9 de março de 1998)

O trabalho se propõe a definir os requisitos, um conjunto de funções de gerência da Hierarquia Digital Síncrona (SDH) segundo o modelo da arquitetura TMN (Telecommunications Management Network).

Para tanto, contém uma descrição da TMN, seus objetivos e estruturação. Descreve o conceito de gerência em camadas segundo a definição dos processos de gerência, sob o ponto de vista de uma Empresa Operadora de Telecomunicações, as arquiteturas física, lógica e de informações que compõem o modelo da TMN e o conceito de interface padrão, sobre o qual se suporta todo o modelo.

Para descrever a SDH é apresentado o modelo de arquitetura genérica de redes de transporte definida pelo ITU, que pode ser utilizado na descrição do funcionamento de qualquer rede de transporte. Como exemplo, o trabalho contempla sua aplicação à rede PDH (Plesiochronous Digital Hierarchy).

A partir do modelo genérico de redes são então descritas as características de funcionamento, estruturas de multiplexação e mecanismos de gerência, que serão explorados através de uma aplicação prática: uma sub-rede SDH real, instalada na Telerj.

O trabalho contém uma descrição da constituição física da sub-rede (localização dos equipamentos e topologia da sub-rede) e das funções de gerência de elemento de rede para a área funcional de configuração, exigidas quando da aquisição da sub-rede.

Estes requisitos são então analisados e, com base em publicações recentes, incluindo recomendações de organismos padronizadores, e de experiência profissional pessoal, o trabalho propõe, para a área de gerência de configuração, um novo conjunto de funções de gerência dos elementos que compõem a sub-rede.

Seguindo a hierarquia de gerência em camadas preconizada no modelo, o trabalho propõe ainda um conjunto de funções para a gerência da sub-rede, considerando a mesma área funcional.

Entretanto, por serem genéricas, as funções de gerência definidas podem ser estendidas a qualquer sub-rede SDH, de qualquer topologia, o que amplia o seu campo de aplicação.

Concluindo, o trabalho traça alguns cenários de evolução das aplicações de gerência e as perspectivas futuras de integração, que constituem o objetivo principal da TMN.

ANÁLISE DINÂMICA DE CHASSI VEICULAR UTILIZANDO OS PROCEDIMENTOS GENERALIZADOS DA TÉCNICA DOS GRAFOS DE LIGAÇÃO

Autor: Renato Seixas da Rocha

Orientador: Fernando Ribeiro da Silva

(Tese defendida no IME, em 19 de março de 1998)

A flexibilidade da estrutura de veículos terrestres pesados torna-se relevante em função das deformações apreciáveis a que estas ficam sujeitas, principalmente quando submetidas a condições dinâmicas.

Assim, o principal objetivo do trabalho é explorar a utilização da técnica generalizada dos Grafos de Ligação na modelagem da dinâmica vertical de veículos automotores terrestres com chassis flexíveis. Para isso, foram utilizados os procedimentos desta técnica para realizar-se o acoplamento dinâmico entre o subsistema estrutural com parâmetros distribuídos, que representa o chassi, e os subsistemas com parâmetros concentrados que representam os passageiros, motor e suspensão.

Na modelagem do chassi fez-se uso dos procedimentos da análise estrutural dinâmica através da técnica dos Grafos de Ligação. Com estes procedimentos, o modelo dinâmico obtido com a discretização do chassi pelo Método dos Elementos Finitos é integralmente aproveitado pela técnica dos Grafos de Ligação.

O modelo escolhido para a análise no trabalho procura representar através dos seus parâmetros geométricos e físicos, o chassi de um ônibus urbano com motor dianteiro e suspensão de feixe de molas. O grafo multiligação correspondente ao sistema global do veículo, é construído justapondo-se os três grafos desenvolvidos individualmente para cada tipo de subsistema: o chassi discretizado por elementos finitos, os passageiros e motor e as suspensões.

O modelo matemático linear na forma de estado foi obtido diretamente do Grafo de Ligação global do veículo. Este modelo é caracterizado por um sistema de equações diferenciais ordinárias do tipo *stiff* (“de difícil solução”) e para simulá-lo foram utilizados três procedimentos distintos: o modelo de espaço de estado de tempo discreto; a sub-rotina DIVPAG da biblioteca IMSL em linguagem FORTRAN e a função LSIM do programa MATLAB.

Foram simulados o comportamento do veículo passando obliquamente sobre um obstáculo (quebra-molas) e trafegando sobre diferentes classes de estradas, que foram geradas randomicamente. Foram vários os resultados obtidos, como por exemplo: deformações dinâmicas das molas da suspensão; tensões normais induzidas no chassi; acelerações verticais dos passageiros, o que possibilitou a análise de conforto proporcionada pelo veículo, segundo a norma ISO 2631/1:1997; e algumas análises relativas às interações energéticas entre a dinâmica vertical do veículo e o seu sistema propulsor.

A modelagem e a obtenção do modelo matemático global do veículo através da técnica dos Grafos de Ligação, mostrou-se bastante simples. Assim, a utilização desta técnica da engenharia de sistemas se constitui numa boa alternativa na modelagem de veículos terrestres, onde sejam considerados os efeitos da flexibilidade estrutural.

FISCALIZAÇÃO NO TRANSPORTE COLETIVO RODOVIÁRIO URBANO

Autor: *Salvador Cardoso*

Orientadores: *Laerte de Holanda Sales Filhos – DSc*

Vânia Barcellos Gouvêa Campos – DSc

(Tese defendida no IME, em 1º de abril de 1998)

O trabalho em questão apresenta uma consolidação de procedimentos de fiscalização dos serviços de transporte coletivo urbano brasileiro e opiniões de especialistas em transportes urbanos de diversos organismos, de tal forma a ser utilizado como fonte de consulta por municípios de pequeno e médio porte que estejam interessados na formação de seus órgãos gestores de transporte coletivo, ou ainda auxiliando nas medidas a serem tomadas, subsidiando propostas mais adequadas a cada situação.

São abordados também algum aspectos da gestão dos transportes no que se refere à delegação dos serviços, às leis e às responsabilidades tanto do Poder Público quanto das Empresas Operadoras que exploram os serviços.

No que concerne à fiscalização são apresentados tipos de organização, estruturas, procedimentos, atribuições, parâmetros e equipamentos de apoio e de automação eletrônica, referentes ao desenvolvimento dessa atividade por parte dos órgãos gestores, visando ao controle e à fiscalização de veículos, prepostos e documentos operacionais, seja nos terminais, garagens ou corredores urbanos.

Para melhor entendimento do trabalho desenvolvido são incluídos em um segundo volume os seguintes anexos glossários, legislação, procedimentos para preenchimento de formulários e modelos, infra-estrutura e equipamentos de apoio e de inspeção, plano emergencial de greve, procedimentos do corpo de fiscalização e registradores de velocidade.

A partir desta consolidação, são propostas alternativas para estruturação e implementação da atividade de fiscalização, classificada em distintas situações e medidas para aumentar sua eficácia.

PROCEDIMENTO PARA SELEÇÃO DE MÉTODO PARA MANUTENÇÃO DA GEOMETRIA DA SUPERESTRUTURA FERROVIÁRIA

Autor: *Henrique Alexandre Dourado Lima*

Orientadores: *Maria Cristina Fogliatti de Sinay – PhD*

Carlos Alceu Rodrigues – MC

(Tese defendida no IME, em 15 de abril de 1998)

O objetivo do presente trabalho é o de propor um procedimento que auxilie na seleção do método de correção geométrica da superestrutura ferroviária a ser utilizado levando em consideração características da via e dos métodos de manutenção.

Inicialmente, são apresentados conceitos sobre via permanente e seus componentes, acompanhando uma revisão da literatura pesquisada sobre os parâmetros geométricos da superestrutura da via permanente e os seus possíveis defeitos. São definidos os fatores de degradação ferroviária e as

formas de se determinar a qualidade da via. Em seguida são abordadas as tolerâncias dos parâmetros geométricos. É definido o objetivo da manutenção da via permanente sendo identificados os principais serviços que integram essas atividades, sempre enfocando aquelas ligadas diretamente à correção geométrica.

Os três métodos correntes de correção geométrica (manual, semi-mecanizada e mecanizada) são descritos de forma detalhada, evidenciando suas diferenças em relação à produtividade, custos de aquisição e manutenção dos equipamentos, custos com combustível e lubrificante, custos com deslocamentos e vida útil dos serviços.

A partir da identificação das variáveis que compõem os custos de correção geométrica é proposto um procedimento para selecionar o método ou combinação de métodos que apresente o menor índice custo/benefício para uma determinada situação.

A utilização do procedimento em um caso prático confirma a aplicabilidade do mesmo mostrando que, além de selecionar o método de correção, ele pode ser utilizado como ferramenta para tomada de decisão, auxiliando na previsão de custos, análises de cenários e dimensionamento das equipes.

UMA CONTRIBUIÇÃO AO PLANEJAMENTO DO TRANSPORTE DE CARGAS EM ÁREAS URBANAS

Autor: *Jorge Alberto de Carvalho*

Orientadores: *Laerte de Holanda Sales Filho – DSc*

Ângelo Francisco Martins Gonçalves – DSc

(Tese defendida no IME, em 16 de abril de 1998)

O objetivo do presente trabalho é contribuir para o planejamento da movimentação de cargas em áreas urbanas, a partir de uma investigação exploratória e descritiva, baseada no levantamento de medidas adotadas em algumas cidades brasileiras e também de cidades dos países hoje considerados desenvolvidos, bem como em abordagens teóricas sobre o assunto pesquisadas na literatura.

São enfatizadas questões relacionadas com esse tipo de movimentação, no que concerne à natureza, características, problemas vinculados, impactos ambientais, tipos de veículos e tipos de cargas, dentre outras.

O estudo tanto ressalta a importância de movimentação das cargas nas áreas urbanas como identifica a carência de metodologia consolidada para o planejamento, seja no nível restrito apenas às cargas, como em âmbito sistêmico e integrado com o planejamento tradicional de transportes urbano de passageiros.

Neste sentido, e com base nas experiências e considerações teóricas levantadas, são estruturadas alguns princípios, que servem de subsídios ao processo de planejamento da movimentação das cargas em áreas urbanas.

Dentre as contribuições advindas da presente tese, pode-se dizer que a incorporação dos transportes de cargas no processo de planejamento do transporte urbano pode resultar em melhora significativa no sistema de transporte urbano como um todo e criar um correspondente benefício para a comunidade.

ANÁLISE NUMÉRICA DA INTERAÇÃO DE DEFETOS QUALIFICÁVEIS COMO HIC

Autora: Ana Lucia Hortencio dos Santos de Souza

Orientador: Cícero Vianna de Abreu – Coronel

(Tese defendida no IME, em 27 de abril de 1998)

Este trabalho utiliza o Método dos Elementos Finitos para estudar numericamente a interação de defeitos qualificáveis como Trincamento Induzido por Hidrogênio – HIC (*Hydrogen Induced Cracking*).

O modelo de placa contendo duas trincas passantes foi escolhido para efeito de comparação com outros estudos. As condições de contorno resumem-se em pressão na superfície das trincas e tensões remotas atuando paralelamente ao eixo x. A placa nestas condições simula a parede e um tubo ou de um vaso de pressão.

Do ponto de vista da Mecânica da fratura, o modo de falha operante é o modo I de abertura paralelamente ao eixo x. A placa nestas condições simula a parede de um tubo ou de um vaso de pressão.

Do ponto de vista da Mecânica da Fratura, o modo de falha operante é o modo I de abertura de trinca. As condições necessárias para o início de propagação são dadas pelos parâmetros de energia conhecidos por CTOD (deslocamento de abertura de trinca) e integral J.

O principal objetivo desta análise é tratar o problema da fragilização por hidrogênio pela aplicação do conceito de instabilidade de superfície como um fenômeno de instabilidade plástica, e, assim, comprovar a possibilidade de associar tal fenômeno aos parâmetros de Mecânica da Fratura. Este fato favorece o desenvolvimento futuro de um critério similar ao desenvolvido por Rice e Johnson para extensão de trincas dúcteis.

Dentro de duas possíveis configurações no posicionamento das trincas, trincas frontais e trincas defasadas, as distâncias entre as pontas das trincas foram diminuídas e os valores de deformação

plástica nos nós foram monitorados. Um valor de carga crítico foi obtido pelo valor de deformação plástica para início de instabilidade de superfície definido em análise considerando a bifurcação de fluxo plástico.

Os resultados mostraram que somente no caso de trincas defasadas a instabilidade de superfície correspondeu a valores de CTOD e integral J críticos.

FERRAMENTA PARA MINERAÇÃO DE DADOS COM INTERFACE INTELIGENTE

Autor: *João Luiz Alves de Barros*

Orientador: *Emmanuel Piseces Lopes Passos*

(Tese defendida no IME, em 29 de abril de 1998)

O objetivo da tese é o desenvolvimento de uma ferramenta destinada à obtenção de conhecimentos em bancos de dados, empregando técnicas inteligentes como redes neurais e algoritmos genéticos.

Para atingir esse objetivo é abordada a compreensão de uma metodologia completa do processo de KDD (descoberta de conhecimentos em bancos de dados), que é implementada na ferramenta construída.

Como contribuição adicional da tese, são apresentadas as diferentes visões sobre como realizar a mineração de dados.

Na parte final do trabalho, é mostrada a aplicação da ferramenta construída com alguns casos reais.

FONTES DE REFERÊNCIA DE RADIONUCLÍDEOS EMISSORES ALFA

Autor: *Paulo Alberto Lima da Cruz*

(Tese defendida no IME, em 6 de maio de 1998)

Neste trabalho são apresentados os procedimentos de preparação de fontes puntiformes individuais e mistas de ^{233}U , ^{238}Pu , ^{241}Am ^{244}Cm , e fontes extensas de ^{241}Am desenvolvidas pela técnica de eletrodeposição desses radionuclídeos em suporte de aço niquelado.

Obteve-se rendimento de deposição superior a 90% e fontes com qualidade equivalente às fontes padrões de laboratórios primários de metrologia de radionuclídeos utilizados. Da mesma forma, a

homogeneidade de deposição com dispersão da ordem de 10% para as fontes preparadas é equivalente a das fontes padrões.

As fontes mistas preparadas apresentaram espectros com picos característicos dos radionuclídeos bem-definidos e resolvidos com resolução em energia da mesma ordem das fontes individuais. Isso permitiu a determinação das quantidades dos radionuclídeos presentes, por meio de fontes individuais e de fontes mistas simuladas a partir de fontes individuais, com incerteza de 2,5%.

A metodologia proposta para a avaliação da homogeneidade de deposição permitiu verificar como ocorreu a deposição e quantificar a dispersão.

A estabilidade em longo prazo verificada para as fontes extensas apresentou uma variação de 0,2%, relativamente ao padrão primário de ^{239}Pu depositado em platina.

Resolução em energia das fontes com valores similares aos padrões primários, homogeneidade de deposição da mesma ordem dos valores recomendados na literatura e estabilidade em longo prazo, qualificam essas fontes como fontes de referência.

SISTEMAS DE GESTÃO PARA A EXCELÊNCIA: Um enfoque para a indústria de *software*

Autor: *Carlos Mathias Mota Vargas*

Orientador: *Paulo Afonso Lopes da Silva, PhD*
(Tese defendida no IME, em 19 de maio de 1998)

Esta tese tem como objetivo analisar comparativamente as metodologias para o aprimoramento do processo de desenvolvimento de *software* intituladas *Modelo de Maturidade da Capabilidade para Software – SEI/SW-CMM, v. 1.1 (Capability Maturity Model for Software)* e a *Norma NBR ISO 9000-3/1993 com os Critérios de Excelência do Prêmio Nacional da Qualidade – PNQ/1998* criando as bases para o desenvolvimento de uma metodologia para a excelência em *software*, agregando os seus benefícios.

Desta forma, objetiva-se agregar valor ao processo de decisão das organizações que:

- pretendam utilizar metodologias de aprimoramento nos seus processos de desenvolvimento de *software*, podendo também se auto-avaliarem;
- apóiam a indústria de *software* no intuito de torná-la de exportação pela criação de critérios de avaliação da excelência; e
- pretendem utilizar critérios de avaliação de fornecedores.

A metodologia utilizada para as comparações compreendeu duas etapas:

ETAPA I – Identificação das atividades – Constituiu-se em identificar as atividades de cada sistema de gestão, dentro de suas peculiaridades:

- **Critérios do PNQ:** Identificaram-se dentro de cada um dos 20 itens de avaliação as atividades contidas nas áreas a serem abordadas.
- **Norma NBR ISO 9000-3:** Foram identificadas todas as atividades em todos os quesitos de suas 22 cláusulas.
- **Modelo CMM:** Consideraram-se todas as práticas-chave agrupadas dentro de suas 18 áreas-chave de processo e em suas características comuns.

ETAPA II – Identificação das similaridades – Constituiu-se em utilizar os Critérios do PNQ como referência de identificar similaridades nas atividades com os demais sistemas de gestão:

- Norma NBR ISO 9000-3: Analisou-se cada uma das atividades identificadas buscando similaridades com os critérios do PNQ.
- Modelo CMM: Inicialmente consideraram-se os escopos das características comuns, denominadas: *Comprometimento com a execução, Capacitação para a execução, Medição e Análises e Verificação da implementação*, identificando-se suas respectivas áreas-chave. Após isto, buscou-se analisar as práticas-chave contidas nas atividades a executar (a característica comum que restava) para então identificar as similaridades com os critérios do PNQ.

Com essas comparações foram respondidas as seguintes perguntas:

1. Como está a similaridade dos sistemas de gestão com os critérios de excelência do PNQ?
2. Qual a contribuição principal desses sistemas de gestão?
3. Qual é a melhor forma de utilização dos sistemas de gestão estudados?

Conclui-se que para o desenvolvimento de um sistema de gestão para a excelência em *software* deve-se usar os critérios do PNQ como uma base para o sistema de gestão, incorporando a ele o Modelo CMM, principalmente no que se refere à gestão de processos a serem implementados na organização de *software* e à Norma NBR ISO 9000-3 como um instrumento de entendimento desses processos, considerando neste sistema de gestão o seu processo de documentação e de avaliação pelas auditorias.

Entre as recomendações de continuidade encontram-se:

- Considerar a versão 2.0 do Modelo CMM (em elaboração), o Modelo SPICE (também em elaboração) e as normas da qualidade do produto no contexto do sistema de gestão para a excelência em *Software*, atualizando e integrando a qualidade do produto e a qualidade do processo.
- Utilizar os critérios do PNQ como um instrumento gerencial.
- Verificar se existe correlação entre a pontuação dos critérios do PNQ, o nível de maturidade do Modelo CMM e a obtenção de certificação ISO 9001.

- Verificar o impacto do nível de maturidade, da obtenção da certificação ISO 9001 e da premiação do PNQ nos resultados das organizações, considerando-se inclusive o nível de satisfação das partes interessadas.

AVALIAÇÃO DE DANOS POR FADIGA EM LIGAS DE ALUMÍNIO

Autor: Pedro Augusto de Souza Lopes Cosentino – Cap QEM Met

Orientadora: Martha Patrícia Butrón Guillén – Prof^a PhD

(Tese defendida no IME, em 17 de junho de 1998)

Os materiais metálicos, em especial as ligas de engenharia para fins estruturais são altamente complexos. Esta complexidade está ilustrada esquematicamente na Figura 1, onde se vêem as particularidades microestruturais (nem todas estão necessariamente sempre presentes no material) e dois dos principais modos de fratura, a fratura transgranular e a intergranular.

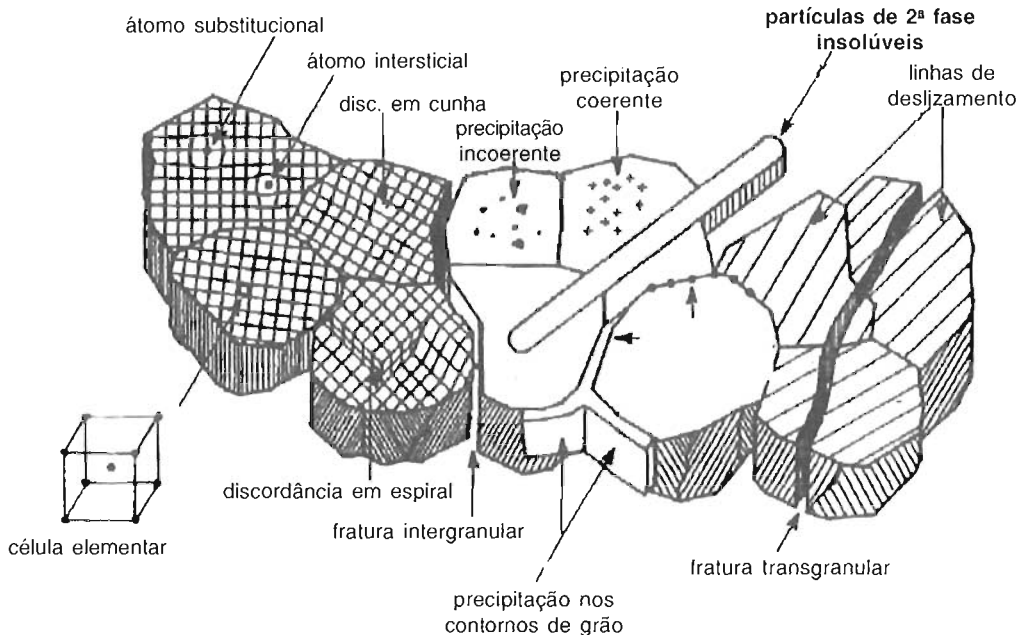


Figura 1: Características microestruturais dos materiais metálicos

Além disso, a maioria dos materiais estruturais é policristalino. Eles consistem em um agregado de grãos, onde cada um possui uma orientação cristalina particular. A avaliação e a quantificação de como evolui o dano na microestrutura do material é um desafio permanente para o Engenheiro de Materiais.

O dano responsável pela maioria das falhas em serviço provocadas por solicitações mecânicas é a fadiga.¹ Particularmente, no setor aeronáutico tem crescido a preocupação com a fadiga dos materiais. Nos últimos anos quase 2 mil aviões sofreram sérios acidentes provocados pela fadiga e hoje em dia ocorrem cerca de cem acidentes por ano.²

O alumínio é o principal material utilizado na fabricação de componentes estruturais para a aviação e, devido às crescentes exigências de resistência mecânica, tolerância ao dano e durabilidade das novas aeronaves bem como a extensão da vida das que estão voando atualmente, torna-se importante avaliar os danos das ligas sujeitas a carregamentos cíclicos.

As ferramentas utilizadas na análise da fadiga são as seguintes:³

- A compreensão detalhada da microestrutura. A metalurgia física está num alto nível de compreensão. Dentre alguns aspectos incluem-se: movimento das discordâncias e a interação da microestrutura do material com elas.
- Máquinas de ensaio e equipamentos de laboratório. O instrumental dos laboratórios possui um padrão adequado às necessidades experimentais.
- Mecânica da fratura, que é a mecânica aplicada a um corpo sólido com trincas, utilizadas intensamente para modelar estruturas de engenharia com resultados satisfatórios.
- Métodos computacionais poderosos.
- Possibilidade de medidas e de análises estatísticas das cargas de fadiga em serviço.

A fadiga é, porém, um problema multidisciplinar. Dois objetivos primários podem ser definidos: a compreensão dos mecanismos físicos básicos do processo de fadiga e o desenvolvimento de métodos de previsão da resistência à fadiga, da vida em fadiga e do crescimento da trinca.

Em fadiga, é necessário obter um amplo conhecimento das relações existentes entre a microestrutura e as propriedades cíclicas a serem alcançadas. A microestrutura que oferece a melhor resistência a iniciação da trinca pode não ser a mais resistente à propagação.

A microestrutura de um material é definida por vários parâmetros, tais como a estrutura de discordâncias (densidade e a EFE – energia de falha de empilhamento) estrutura dos grãos (distribuição do tamanho e da forma), conteúdo de segunda fase (fração volumétrica tamanho e distribuição) e a estrutura do contorno de grão. Outro parâmetro é a distribuição da orientação dos grãos individuais.

A orientação de cada grão individual é definida por um conjunto de eixos ortogonais fixos em cada grão e correlacionados com um sistema de coordenadas externas. Quando a distribuição das orientações dos grãos deixa de ser aleatória diz-se que o material apresenta textura”. Diversas propriedades importantes dos materiais dependem da orientação do cristal, ou seja, elas são anisotrópicas.

A textura pode se alterar durante o processamento e o uso do material. Ela pode ser medida globalmente através de técnicas de difração de raios-X ou de neutrões.

A textura do material é heterogênea numa escala microscópica o que poderia propiciar a falha do material em consequência destas heterogeneidades. Assim, a determinação da orientação individual dos grãos e sub-grãos em pequenas regiões é importante para esclarecer a evolução dos danos causados ao material pela fadiga.

Estudou-se a alteração da orientação cristalina na região danificada pelo processo de fadiga utilizando a técnica de Microscopia de Imagens por Orientação (MIO). Esta técnica utiliza a análise dos padrões de Kikuchi formados pela reflexão dos elétrons retroespalhados no Microscópio Eletrônico de Varredura (MEV) na determinação das orientações dos grãos individuais. Estas, então, podem ser relacionadas diretamente com a microestrutura e com a posição da trinca, no caso dos materiais fadigados.

A técnica surgiu comercialmente no início da década de 1990⁴ com a utilização da fibra óptica para a captura dos padrões e a digitalização destes para a indexação através de um método de análise de imagens, cristalografia e textura.

A primeira e principal aplicação desta técnica tem sido o estudo da recristalização dos metais. Há um amplo potencial para a aplicação da MIO no campo das ciências dos materiais. Ressalta-se aqui o pioneirismo da utilização desta técnica para analisar os danos provocados pela fadiga no material.

Neste trabalho foram estudados os danos causados pela propagação de trincas por fadiga em duas ligas de alumínio utilizadas tradicionalmente pela indústria aeronáutica, a A17475T7351 e a A17050T7451.

Determinaram-se as taxas de propagação da trinca em função da razão de tensões R (tensão mínima/tensão máxima), utilizando a Mecânica da Fratura. Verificou-se que um aumento de R corresponde a um aumento na taxa de propagação. Utilizou-se os seguintes valores para R: 0, 1; 0,4 e 0,7.

Em paralelo, foi analisada o efeito de sobrecargas na propagação da trinca. Utilizaram-se sobrecargas de magnitudes correspondentes a 50%, 75% e 100%. O retardamento desta propagação só foi constatado para sobrecargas acima de 75%. Analisando as superfícies de fratura no Microscópio Eletrônico de Varredura, constatou-se o efeito das sobrecargas. Estas reduziram a rugosidade da superfície de fratura e promoveram a formação de trincas secundárias.

Utilizou-se pela primeira vez a Microscopia de Imagens por Orientação (MIO) para analisar os efeitos da passagem da trinca no material. Constatou-se a mudança na microtextura do material junto à superfície de fratura, indicando assim que ocorre a rotação dos planos cristalográficos do material pela criação da trinca. A análise da região submetida à sobrecarga mostrou uma forte heterogeneidade da estrutura cristalográfica

Tentou-se avaliar a subestrutura de discordâncias do alumínio provocadas pelos danos por fadiga em amplitude constante e os danos provocados pelas sobrecargas, utilizando a Microscopia Eletrônica

de Transmissão (MET), mas não foi possível devido à rugosidade da superfície de fratura impedir a formação de imagem com suficiente contraste para se visualizar a subestrutura de discordâncias.

As principais conclusões do trabalho foram:

- Observou-se a atuação do mecanismo do fechamento da trinca para a propagação em amplitude constante. O efeito das sobrecargas torna-se efetivo a partir de 75%, sobrecargas em torno de 50% não influenciam as taxas de propagação.
- A trinca de fadiga promove uma alteração da orientação dos planos cristalinos do material nas suas imediações quando de sua passagem.
- Os dados indicam aparentemente que possa ocorrer a ativação de diferentes planos de deslizamento com a sobrecarga. Planos estes que expostos ao ambiente podem se oxidar com mais facilidade, promovendo o fechamento da trinca.
- A sobrecarga promove uma forte desorientação dos planos cristalinos. O retardamento observado, talvez seja uma consequência da trinca ter que se reorientar novamente de modo favorável à sua propagação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 – DIETER, G. E., *Metalurgia Mecânica*, Guanabara Koogan S.A., p. 344, Rio de Janeiro, 1981.
- 2 – CAMPBELL, G. S. e LAHEY, R., *A Survey of Serious Aircraft Accident Involving Fatigue Fracture*, Int. J. Fatigue, vol. 6, p. 25, 1984.
- 3 – SCHIJVE, J., *Fatigue of Aircraft Materials and Structures*, Fatigue, vol. 16, nº 1, p. 21-32, 1994.
- 4 – WEILAND, H., *Microtexture Determination and its Application to Materials Science*, JOM, p. 37-41, setembro de 1994.

PROCEDIMENTO PARA A VIABILIZAÇÃO DE INVESTIMENTOS PRIVADOS EM FERROVIAS

Autor: *Waldercy do Carmo*

Orientadores: *Fernando Luiz Cumplido MacDowell da Costa*

Vânia Barcellos Gouvêa Campos

(Tese defendida no IME, em 13 de julho de 1998)

Esta dissertação de mestrado aborda o Processo de Concessões públicas da infra-estrutura dos transportes, explorando a íntima relação entre as concessões e a diminuição dos custos operacionais no transporte, fruto da exigência da abertura da economia brasileira e do fortalecimento do MERCOSUL, visando a ampliar a capacidade dos corredores de transporte que o alimentam.

Para atingir o objetivo foram pesquisados o modelo de concessão brasileiro, os modelos de concessão utilizados no exterior, a importância da contribuição da iniciativa privada nos corredores de transportes e a evolução da legislação pertinente.

Todo o trabalho foi desenvolvido de acordo com a tendência mundial de parceria público-privada que originou o *projet finance*, com o financiamento dos projetos de infra-estrutura recebendo como garantia o *cash flow* do empreendimento com uma divisão balanceada de riscos equacionados entre patrocinadores, credores e beneficiários.

Busca alternativa para o problema da ociosidade dos corredores ferroviários, atraindo empresários rodoviários, donos das cargas, para o sistema ferroviário. Propõe a utilização de uma das tecnologias mais avançadas no mundo o *road railer (Car Less)*, técnica capaz de revolucionar o transporte intermodal brasileiro, estuda o transporte de contêineres e destaca a evolução da taxa de crescimento de utilização dos mesmos no transporte de carga geral.

Admite condições de operação, comportamento de linha, frequência, velocidade, confiabilidade etc., para que as ferrovias possuam sistemas operacionais com credibilidade, que possibilite desenhar uma logística mais adequada ao mercado de transporte atual de carga geral.

Metodologia Proposta

Propõe uma metodologia que aborda de forma sistêmica a utilização de corredores de transporte onde se encontram várias modalidades de transportes, com características peculiares e interdependentes.

O procedimento permite avaliar sob o ponto de vista da Empresa Privada, as conseqüências do estabelecimento das prioridades que se deseja como atingimento de metas e outras restritivas, como o montante de investimentos passíveis de aplicação no tempo, no intuito de obter a configuração, que melhor atenda o objetivo de captar para o transporte ferroviário uma parcela da carga geral transportada pelo modo rodoviário.

Importância do Trabalho

O Governo brasileiro está consciente de que a consolidação da ampla reforma do Estado, iniciada em 1988, é cada vez mais premente e fundamental para torná-lo mais atuante em suas funções típicas de regulador e fiscalizador; delegando a execução dos serviços públicos à iniciativa privada.

O Governo Federal, na definição do PND Programa Nacional de Desestatização, procurou tanto viabilizar a melhoria dos produtos e serviços das ferrovias estatais, em termos do aumento da eficiência e melhoria do padrão de qualidade e preço, quanto desonerar o Estado de encargos presentes e

futuros, dado o cenário de escassez de recursos públicos, tendo especial interesse em tornar o processo de concessão atrativo aos investidores privados.

O PND tornou-se uma das esperanças do Governo para que o Brasil retome o crescimento econômico, alicerçado sobre um Estado forte e apoiado numa economia de livre mercado.

DESEMPENHO DINÂMICO E ADAPTAÇÃO DE CONTROLES AUTOMÁTICOS DE GERAÇÃO

Autor: *Eduardo de Medeiros Brandi*

Orientador: *Jorge Luiz de Araújo Jardim*

(Tese defendida no IME, em 14 de julho de 1998)

Um levantamento dos controles de regulação primária e secundária dos geradores e sua modelagem é apresentado.

O critério atual de ajuste do Bias para os Controles Automáticos de Geração (CAG) para a característica de resposta natural de frequência de um sistema é revisto. Estes critérios são baseados na análise em regime permanente. É apresentado que as aproximações que envolvem este critério não são válidas quando o efeito das dinâmicas do sistema é levado em consideração.

Um novo critério de ajuste baseado somente no desempenho dinâmico do CAG é proposto. O ajuste dos Controles Automáticos de Geração para atender ao desempenho dinâmico desejado, utilizando-se o Controle Adaptativo de Modelo de Referência (controle direto) que é projetado e avaliado.

O controle adaptativo é utilizado para manter o desempenho dinâmico desejado sob variações paramétricas significativas. As leis de controle adaptativo empregado se baseiam na teoria da passividade.

QUALIDADE NA ELABORAÇÃO DE PLANOS DIRETORES PARA O SETOR DE TRANSPORTES

Autor: *Gilberto Jorge da Cruz Araújo*

Orientadores: *Maria Cristina Fogliatti de Sinay*

Paulo Roberto Dias Moraes

(Tese defendida no IME, em 30 de julho de 1998)

O objetivo principal desta tese é estudar o Método do Albedo aplicado a duas camadas e vários grupos de energia.

As principais ferramentas de modelagem nucleares disponíveis para blindagem incluem a aproximação da difusão, teoria de transporte e técnicas de Monte Carlo. A teoria de transporte ou o Método de Monte Carlo são habitualmente usados para análise de blindagem onde investigações de penetração são mais sensíveis a aspectos direcionais.

O Método do Albedo aplicado ao nêutron a multigrupos é caracterizado por acompanhar a radiação e está baseado nos dados de saída das matrizes de reflexão [a], absorção [b] e transmissão [g] de cada camada.

No capítulo II, foi analisado um caso particular de cálculos neutrônicos para múltiplas camadas, em uma blindagem, usando o Método do Albedo aplicado ao nêutron para um grupo de energia. Foi modelado e desenvolvido o algoritmo e então feito uma aplicação para um grupo de energia e quatro camadas. Os resultados obtidos, quando comparados com o método da difusão, foram excelentes.

No capítulo III, foi analisado um caso particular de cálculos neutrônicos para múltiplas camadas, em uma blindagem, usando o Método do Albedo aplicado ao nêutron para dois grupos de energia. Foi modelado e desenvolvido o algoritmo e então feita uma aplicação para dois grupos de energia e três camadas. Os resultados obtidos, quando comparados com o método da difusão, foram excelentes.

No capítulo IV foi analisado um caso particular de cálculos neutrônicos para duas camadas e multigrupos de energia, em uma blindagem usando o Método do Albedo aplicado ao nêutron para seis grupos de energia e duas camadas. Foi modelado e desenvolvido o algoritmo e então feita uma aplicação para um grupo de energia e quatro camadas. Os resultados obtidos, quando comparados com o método da difusão, foram excelentes.

Os resultados dos cálculos teóricos confirmaram a validade do Método do Albedo aplicado ao nêutron, para multigrupos de energia, em análises de blindagem dos tipos tratados nesta pesquisa.

Nem tudo que reluz é ouro.

Provérbio Popular

*Poema é uma única expressão literária imortal e
não há nada de tão péssimo escrito que não tenha
algum pensamento que valha.*

Austregésilo de Athayde