HOMOGENEIZAÇÃO DE UM MATERIAL COMPOSTO ATRAVÉS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Homogenization of a composite material through the finite element method

Jacson Luiz Zaparoli¹; Gilson Francisco Paz Soares²; Jariel Augusto Rotta³

- ¹ Graduando de Engenharia Civil da Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões URI Erechim. E-mail: jacsonzaparoli@hotmail.com
- ² Doutor em Engenharia pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul UFRGS. Professor e coordenador do curso de Engenharia Civil da Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões URI Erechim. E-mail: gilsonfps@uricer.edu.br
- ³ Graduado em Engenharia Mecânica pela Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões URI Erechim. E-mail: jariel.rotta@outlook.com

Data do recebimento: 12/01/2015 - Data do aceite: 12/06/2015

RESUMO: Neste trabalho foi realizado um modelamento numérico computacional visando a aplicação de técnicas de homogeneização para determinação do elemento de volume representativo (EVR) de um material composto bifásico particulado onde a matriz é constituída de Polimetilmetacrilato (PMMA) e a segunda fase representada por heterogeneidades esféricas similares a elastômeros com uma distribuição aleatória no interior da matriz. A metodologia empregada contempla a análise numérica computacional, através do método dos elementos finitos e com auxílio do software ANSYS. Foi aplicado o critério de Hill para determinação do EVR do modelo através da análise estatística da convergência dos parâmetros K^* (Módulo de Compressibilidade) e G^* (Módulo de Elasticidade Transversal) para modelos com 15% de fração volumétrica de heterogeneidades em relação à matriz. Obteve-se, para estas características, um EVR de 16 heterogeneidades. Na sequência, foram realizadas alterações nesta fração volumétrica para 10%, 5% e 1%, quando foi comprovada a sua influência na determinação do EVR, consequentemente, se obteve para estes casos, respectivamente, EVRs de 16, 32 e 32 heterogeneidades, quando analisados os parâmetros $K^* e G^*$ conjuntamente. Por fim, variou-se os distanciamentos mínimos entre a matriz e a segunda fase e concluiu-se que essa variação não gera mudanças significativas nos resultados.

Palavras-chave: Homogeneização. Elemento de volume representativo. Método dos Elementos Finitos.

ABSTRACT: In this study, a numerical computational modeling aiming the application of homogenization techniques to determine the representative volume element (RVE) of a particulate biphasic composite material where the matrix is constituted of polymethylmethacrylate (PMMA) was carried out, and the second phase represented by spherical heterogeneities similar to elastomers randomly distributed inside the matrix. The methodology used includes the numerical computational analysis through the finite elements method and with the help of the ANSYS software. The Hill criterion was applied to determine the RVE of the model through the statistical analysis of the convergence of the parameters K^* (Compressibility Modulus) and G^* (Cross Elasticity Modulus) for models with 15% volume fraction relative to the matrix heterogeneities. An RVE of 16 heterogeneities was obtained for these characteristics. Further, changes were made in this volume fraction to 10%, 5% and 1% proving its influence on the determination of RVE, consequently, with the analysis of the K^* and G^* together RVEs of 16, 32 and 32 heterogeneities were respectively obtained. Finally, the minimum distances between the matrix and the second phase have varied. It may be concluded that this variation does not generate great changes in the results.

Keywords: Homogenization. Representative Volume Element. Finite Element Method.

Introdução

O grande avanço nos estudos da engenharia e da ciência dos materiais tem proporcionado o projeto de produtos cada vez mais eficazes e seguros. Exemplo disto é a crescente utilização de materiais compostos, aqueles formados por duas ou mais fases, em aplicações de alta precisão na engenharia, o que gera a necessidade de um amplo estudo de sua caracterização mecânica.

Neste contexto, Dutra (2012) buscou construir um modelo constitutivo capaz de representar o comportamento do concreto reforçado com fibras de aço (CRFA), no qual a formulação está fundamentada na teoria de homogeneização, no método dos elementos finitos (MEF), e também em observações experimentais disponíveis na literatura. Um elemento de volume representativo (EVR) foi analisado na fase elástica e na ruptura. Os resultados analíticos foram comparados com os resultados experimentais e com os obtidos na resolução numérica do problema formulado sobre o EVR do CRFA, por meio de uma ferramenta numérica baseada em MEF. Essa comparação permitiu avaliar a influência da anisotropia do modelo, como também da geometria real das fibras sobre a resistência do compósito.

Ghossein e Lévesque (2012) desenvolveram uma ferramenta numérica automatizada para definição das propriedades efetivas de um material composto bifásico, linear elástico, reforçado com partículas esféricas distribuídas aleatoriamente. As micro estruturas virtuais aleatórias foram geradas por um algoritmo baseado na dinâmica molecular. As propriedades efetivas dos materiais foram computadas usando a técnica de Transformação Rápida de Fourier (TRF). As previsões da ferramenta numérica foram comparadas com os modelos de homogeneização analíticos para uma vasta gama de propriedades mecânicas e volumes de frações esféricas. Concluíram que a nova ferramenta proporciona um meio único para a computação, uma vez que proporciona resultados precisos das propriedades de compósitos em um grande número de micro estruturas, assim podendo, desta forma substituir modelos analíticos de homogeneização.

Khdir et al. (2013) estimaram, através de uma metodologia de homogeneização computacional, a resposta elasto-plástica de um material composto bifásico. As simulações basearam-se no MEF, usando um cubo tridimensional com inclusões esféricas de diferentes tamanhos, mas menores que o elemento de volume representativo determinístico (EVRD) da microestrutura. Foi proposto estender a abordagem desenvolvida, no meio elástico heterogêneo, por Drugan e Willis (1996) e Kanit et al. (2003), para um material composto constituído por uma matriz de polímero vítreo elasto-plástico e uma segunda fase de esferas de borracha elásticas, distribuídas aleatoriamente na matriz. Foi verificado que a resposta elasto-plástica eficaz do composto pode ser determinada com precisão através do cálculo de um número suficiente de pequenos subvolumes de tamanho fixo extraídos do EVRD e contendo diferentes concepções da microestrutura aleatória. Na resposta de um subvolume foi encontrada uma anisotropia, enquanto a média de todos os subvolumes demonstra o caráter isotrópico do EVRD. Por fim, para uma precisão aceitável, concluíram que é necessária a realização de dois modelos de frações de volume de partículas.

Mello e Argenta (2014) analisaram o comportamento e a geometria de inclusões

em uma matriz, considerando um material bifásico isotrópico. O modelo foi elaborado com a inclusão centralizada e aproximando a mesma da borda da matriz. Para o cálculo das propriedades efetivas foi utilizado um algoritmo, sendo a modelagem realizada no *software ANSYS*. Os resultados se mostraram eficazes, proporcionando uma reflexão do efeito da posição das inclusões na matriz.

Otero et al. (2015) analisaram a homogeneização, em duas escalas, de três estruturas compostas através do MEF. A teoria implementada foi comparada com outras formulações micro estruturais, em termos de precisão de resultados e custo computacional. A comparação mostrou que em uma analise linear a homogeneização é uma excelente alternativa entre outras formulacões. Seu custo computacional, em termos de tempo de processamento, compensa, além de conseguir capturar vários fenômenos micro estruturais que não são automaticamente obtidos nas formulações. No caso de simulação de materiais com micro estrutura complexa, concluíram também que a homogeneização é uma excelente alternativa, sendo um meio promissor na análise não linear, quando aplicada juntamente com um critério de limite, para se decidir se é necessário analisar o elemento de volume representativo ou não.

Sendo assim, o objetivo principal deste trabalho consiste em contribuir com o desenvolvimento de estratégias para o estudo do comportamento micro mecânico das propriedades de materiais compostos particulados com distribuição aleatória da segunda fase, realizando a homogeneização numérica de um material composto formado por uma matriz cúbica de polimetilmetacrilato (PMMA) com inclusões esféricas de elastômeros utilizando o método dos elementos finitos. O PMMA é um material transparente e com elevada dureza e resistência ao risco, que, quando combinados com material elastomérico, podem ter suas propriedades otimizadas para, por exemplo, resistirem mais a impactos, podendo ser aplicados na indústria aérea e automobilística.

Metodologia

Para a determinação do EVR através da homogeneização numérica, são necessárias condições de contorno que gerem uma condição específica no modelo. Assim sendo, foi aplicada a condição de contorno de Hill e as formulações de K^* (Módulo de Compressibilidade) e G^* (Módulo de Elasticidade Transversal) a fim de determinar o EVR. Em seguida, estudou-se a influência de alguns parâmetros no modelo implementado.

As características do modelo em estudo são apresentadas na Tab. I.

Para os estudos apresentados neste trabalho, foi mantida constante a fração de volume da segunda fase em relação ao volume total (CI) e variou-se o número de inclusões (esferas ou heterogeneidades). A Fig. 1 ilustra modelos utilizados no processo de homogeneização (modelos com 2, 4, 8 e 16 inclusões distribuídas aleatoriamente no interior da matriz).

Em uma análise de elementos finitos. deve-se aplicar ao modelo uma malha condizente com a geometria do modelo. O tipo de malha utilizado e o refinamento aplicado influenciam diretamente nos resultados. O elemento finito aplicado neste trabalho foi selecionado na biblioteca de elementos finitos do ANSYS, sendo este o elemento SOLID186 (ANSYS, 2012), que é constituído por até 20 nós com três graus de liberdade por nó, permitindo translações nodais nos sentidos x, y e z. O elemento suporta o regime elástico de tensões e é adequado para modelagem de volumes irregulares, podendo ter qualquer orientação espacial. A Fig. 2 mostra os arranjos nodais que podem ser assumidas pelo elemento SOLID186.

	Forma Geométrica	Material	Módulo de Young (MPa)	Coeficiente de Poisson
Matriz	Cubo	PMMA	3240,00	0,25
Inclusões	Esfera	Elastômero	40,00	0,40

Tabela I - Características do material composto em estudo.

Figura 1 - Modelos utilizados no estudo do EVR.



Figura 2 - Arranjos nodais do elemento finito SOLID186



Fonte: ANSYS, 2012.

Devido à inserção aleatória de inclusões, a geometria interna da matriz se torna bastante amorfa, o que faz com que a configurações tetraedro ou pirâmide, apresentadas na Fig. 2 se ajustem melhor ao modelo. A Fig. 3 mostra a malha descrita aplicada a matriz e à segunda fase.

Figura 3 - Malha de elementos finitos na matriz (a) e nas inclusões (b).



Com o objetivo de automatizar o processo de análise, foi desenvolvida uma rotina computacional envolvendo uma interface entre o *ANSYS* e o *Maple* (MAPLE, 2013).



O diagrama da Fig. 4 apresenta as principais etapas desta rotina.

O macroprocesso apresentado na Fig. 4 é dividido em quatro etapas, descritas a seguir:

- A) Início do processo, quando a rotina recebe os dados referentes ao modelo de estudo. O mesmo atribui posições para as heterogeneidades de forma aleatória e gera uma macro para o ANSYS com todas as características do modelo, como físicas, geométricas, de carregamento, de malha e refinamento.
- B) Solução do problema de elementos finitos pelo software ANSYS Academic Research Mechanical, com entrada de dados geométricos e físicos dos materiais do modelo, malha e condições de contorno e saída de dados de tensão, deformação e volume para cada elemento finito. Este processo é inteiramente controlado pela macro gerada no processo anterior, dispensando qualquer interação do usuário.
- C) Processamento dos dados de tensão e deformação obtidos no processo anterior, calculando as propriedades analisadas K* e G*. Neste processo, a rotina faz a leitura dos dados obtidos no ANSYS e calcula as propriedades desejadas, gerando uma saída de forma indexada em função da amostra e do tamanho do modelo.
- D) Os dados obtidos no passo C são armazenados em formato de banco de dados em uma planilha eletrônica, para geração dos gráficos de tensão e deformação médias.



Aplicação do Critério de Hill para a Determinação do EVR

Hill (1963 apud AIDUN et al., 1999) definiu, o elemento de volume representativo como uma amostra de material que deve:

> i) Conter todos os constituintes que caracterizam a micro estrutura do material heterogêneo em estudo;

> ii) Conter um número suficiente desses constituintes para que as propriedades médias correspondentes ao EVR independam das condições de contorno aplicadas, desde que tais condições sejam macroscopicamente uniformes, ou seja, os valores oscilam em torno de um valor médio com um desvio padrão pequeno, e o mesmo passa a ser insignificante a pouca distância da superfície.

O critério proposto por Hill para a determinação do EVR, chamado de condição energética de Hill, está representado por:

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle_{L^2} = \langle \sigma \rangle_{L^2} : \langle \varepsilon \rangle_{L^2} \tag{1}$$

Onde σ é o tensor tensão, ε é o tensor deformação, : é o produto interno duplo, < > indica média no domínio e L₂ representa o domínio em estudo.

O tamanho do EVR é obtido resolvendo problemas de valores sobre o contorno de amostras de material micro heterogêneo nas quais se verifica a resposta do valor médio de variáveis de campo. Usualmente vai se incrementando a quantidade de micro constituintes nas amostras analisadas, mantendo constantes suas frações de volume (Fig.1).

Foi utilizado o critério da homogeneidade estatística, através da convergência dos pa-

râmetros K^* (módulo de compressibilidade do material ou módulo volumétrico) e G^* (módulo de elasticidade transversal) segundo as Eqs. (2) e (3).

$$3K^* = \frac{\langle \frac{tr\sigma}{3} \rangle_{\Omega}}{\langle \frac{tr\varepsilon}{3} \rangle_{\Omega}} \tag{2}$$

$$2G^* = \sqrt{\frac{\langle \sigma' \rangle_{\Omega} : \langle \sigma' \rangle_{\Omega}}{\langle \varepsilon' \rangle_{\Omega} : \langle \varepsilon' \rangle_{\Omega}}}$$
(3)

Onde $\frac{tr\sigma}{3} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3}$ e $\frac{tr\varepsilon}{3} = \frac{\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}}{3}$ são os componentes dilatacionais, $\sigma' = \sigma - \frac{tr\sigma}{3}I$ e $\varepsilon' = \varepsilon - \frac{tr\varepsilon}{3}I$ <> indica média no domínio e Ω representa o domínio em estudo.

Também se faz necessária a determinação das condições de contorno, a fim de que se possa encontrar a solução do problema. Segundo Aidun *et al.* (1999), existem dois importantes estados de carga que satisfazem a condição de Hill: os teoremas da deformação média e da tensão média. Neste trabalho foi utilizado o teorema da deformação média, onde são aplicados deslocamentos prescritos da forma:

$$u|_{\partial\Omega} = \varepsilon. \, x \, \Rightarrow \langle \varepsilon \rangle_{\Omega} = \varepsilon \tag{4}$$

Onde ε é uma constante de deformação, Ω representa o domínio em estudo, < > indica média no domínio e x representa a coordenada de um ponto no material.

Os carregamentos descritos pela Eq. (4) são gerados por uma rotina que identifica a posição dos nós das arestas e aplica os deslocamentos prescritos referentes a cada nó. Quando utilizado o critério da homogeneidade estatística, são avaliadas a média e o desvio padrão amostral de cada modelo, sendo o EVR aquele cuja média se encontra dentro da faixa dos desvios padrão dos modelos subsequentes, podendo-se considerar uma tolerância de acordo com a necessidade. Para isso, são utilizadas várias amostras de cada tamanho, obtendo-se uma média aritmética simples dos resultados da propriedade avaliada. O desvio padrão amostral é dado por:

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$$
(5)

Onde n é a quantidade de amostras, xi é cada valor da amostra, \bar{x} valor médio das amostras.

Adotando $\varepsilon = 0,001$ na Eq. (4), tem-se uma distribuição de carregamentos aplicada em todas as arestas da matriz seguindo o padrão apresentado na Fig. 5.

Figura 5 - Distribuição de deslocamentos prescritos no contorno da matriz pelo teorema da deformação média.



O modelo de estudo adotado para determinar um EVR pelo critério de Hill possui as características apresentadas na Tab. II. Foram utilizados modelos com 2, 4, 8, 16, 32, 64 esferas e 5 amostras de cada modelo, totalizando 30 modelos distintos.

Tabela II - Dados do modelo utilizado no estudo de caso da aplicação do critério de Hill.

CI	15%
Raio das Esferas	1 [mm]
<i>DE</i> (distância mínima entre as esferas)	1 [mm]
<i>DB</i> (distância mínima entre as esferas e a matriz)	1 [mm]
Tipo de carregamento	Deslocamentos prescritos nas arestas da matriz
Valor do carregamento	Segundo Eq. (4)
Propriedades avaliadas	<i>K</i> * e <i>G</i> *

Para o cálculo das propriedades $K^* \in G^*$ foram utilizados $\sigma 11$, $\sigma 22$, $\sigma 33$, $\sigma 12$, $\sigma 13$, 219 $\sigma 23$, $\varepsilon 11$, $\varepsilon 22$, $\varepsilon 33$, $\varepsilon 12$, $\varepsilon 13$, $\varepsilon 22 \in v$. Os dados foram obtidos através do *software ANSYS* para cada elemento do modelo, e são apresentados no formato da Fig. 6, onde são mostrados os dados de tensão para alguns elementos da amostra 1 do modelo de 64 nódulos. O volume é expresso em m3 e as tensões em Pa.

A Fig. 7 mostra um panorama da distribuição de tensões obtida através do critério de Hill, para um modelo com 64 inclusões distribuídas aleatoriamente na matriz. Aplicando-se os dados das simulações nas Eqs. (2) e (3), obtêm-se os resultados de K^* e G^* para cada amostra. Os resultados são apresentados nas Tabs. III e IV para K^* e G^* , respectivamente.

RINT EL	EMENT TABLE 1	TEMS PER ELE	MENT				
***** P	OST1 ELEMENT	TABLE LISTIN	G ****				
STAT	CURRENT	CURRENT	CURRENT	CURRENT	CURRENT	CURRENT	CURRENT
ELEM	VOLU	SX	SY	SZ	51	52	53
1	0.36266E-11	94391.	78408.	0.10585E+06	0.15352E+06	71605.	53522.
2	0.28704E-11	94141.	76906.	0.10565E+06	0.15245E+06	71611.	52633.
3	0.11535E-11	96450.	78737.	0.10620E+06	0.15585E+06	72261.	53276.
4	0.16021E-11	95296.	77125.	0.10589E+06	0.15402E+06	71842.	52451.
5	0.35957E-11	93604.	78617.	0.10487E+06	0.15236E+06	71668.	53067.
6	0.25205E-11	92928.	76685.	0.10428E+06	0.15061E+06	71414.	51865.
7	0.15120E-11	96478.	79650.	0.10653E+06	0.15625E+06	72477.	53929.
8	0.23131E-11	98793.	82022.	0.10697E+06	0.15863E+06	73654.	55502.
9	0.19259E-11	99416.	85668.	0.10457E+06	0.15878E+06	73331.	57547.
10	0.20386E-11	98307.	83978.	0.10591E+06	0.15831E+06	73516.	56370.
11	0.22049E-11	99109.	85352.	0.10442E+06	0.15856E+06	73066.	57257.
12	0.22104E-11	0.10061E+06	83545.	0.10622E+06	0.15845E+06	74177.	57746.
13	0.14074E-11	94457.	96771.	98789.	0.15749E+06	70839.	61687.
14	0.23484E-11	96666.	95189.	99243.	0.15760E+06	69635.	63865.
15	0.26991E-11	96726.	96048.	0.10112E+06	0.15793E+06	69596.	66373.
16	0.45879E-11	95471.	97666.	99100.	0.15468E+06	72242.	65314.

Figura 6 - Dados de tensão e volume para amostra 1 do modelo de 64 nódulos.

Figura 7 - Distribuição de tensões obtidas para um modelo de 64 esferas e CI = 15%.



Tabela III - Resultados do módulo K* obtidos através da aplicação do critério de Hill.

Número de inclusões	2	4	8	16	32	64
	1,67E+09	1,64E+09	1,88E+09	1,67E+09	1,66E+09	1,67E+09
<i>K*</i> (Pa)	1,62E+09	1,68E+09	1,87E+09	1,66E+09	1,66E+09	1,66E+09
	1,63E+09	1,68E+09	1,97E+09	1,64E+09	1,63E+09	1,64E+09
	1,63E+09	1,67E+09	1,89E+09	1,66E+09	1,65E+09	1,67E+09
	1,68E+09	1,69E+09	1,88E+09	1,66E+09	1,68E+09	1,66E+09
Média	1,64E+09	1,67E+09	1,90E+09	1,66E+09	1,65E+09	1,66E+09
Desvio Padrão Amostral	2,87E+07	1,89E+07	4,07E+07	8,69E+06	1,80E+07	1,02E+07

Número de inclusões	2	2 4		16	32	64
	1,15E+09	1,15E+09	1,33E+09	1,17E+09	1,16E+09	1,17E+09
	1,13E+09	1,17E+09	1,33E+09	1,17E+09	1,16E+09	1,17E+09
G* (Pa)	1,13E+09	1,18E+09	1,32E+09	1,14E+09	1,14E+09	1,15E+09
	1,14E+09	1,17E+09	1,35E+09	1,16E+09	1,16E+09	1,17E+09
	1,19E+09	1,19E+09	1,35E+09	1,17E+09	1,18E+09	1,16E+09
Média	1,15E+09	1,17E+09	1,33E+09	1,16E+09	1,16E+09	1,16E+09
Desvio Padrão Amostral	2,43E+07	1,63E+07	1,18E+07	9,43E+06	1,29E+07	6,64E+06

Tabela IV - Resultados do módulo G* obtidos através da aplicação do critério de Hill.

As Figs. 8 e 9 mostram o comportamento dos modelos utilizando as relações $K^*/K^?$ e $G^*/G^?$, onde K^* e G^* são os resultados para cada um dos modelos e $K^?$ e $G^?$ são os resultados correspondentes ao modelo de 64 esferas . Com essas relações, pode-se observar a variação dos resultados dos modelos de 2, 4, 8, 16 e 32 em relação ao modelo de 64.

Segundo o critério de Hill, o EVR é o modelo a partir do qual não há mais variação significativa das propriedades analisadas e, portanto, não haveria mais necessidade de aumentar o seu tamanho. No caso em estudo, observa-se que a convergência dos parâmetros só é obtida a partir do modelo de 16 inclusões, momento em que os resultados posteriores a este tamanho se enquadram

Figura 8 - Comportamento relativo do módulo de compressibilidade K* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 15% em relação ao volume da amostra.

dentro da amplitude dos desvios padrões. Desta forma, neste espectro de erro aceitável, pode-se admitir que o EVR é o modelo de 16 esferas. Isto, quer dizer que modelos com mais de 16 inclusões não produzem respostas com diferenças importantes em relação ao mesmo, sendo assim possível a realização de análises com redução de tempo computacional.

A Fig. 10 ilustra os tempos médios, em minutos, para o processamento das cinco amostras de cada modelo estudado. Observa-se que as cinco amostras do modelo de 16 esferas, considerado como o EVR, demandaram aproximadamente 75 minutos para a geração dos resultados. Da mesma forma, o de 64 inclusões demandou aproximadamente 300 minutos.

Figura 9 - Comportamento relativo do módulo de elasticidade transversal G* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 15% em relação ao volume da amostra.



1.17 1.12 EVR = 16 esferas Relação G*/G 1,07 1,02 1.008 0.996 1,00 0.97 0.987 0.998 0,92 2 8 16 32 64 4 Número de inclusões

Quanto aos resultados dos parâmetros K^* e G^* , a diferença foi da ordem de 1% entre os dois tamanhos de modelos. Desta forma se observa uma importante redução de 75% do tempo computacional para a geração de resultados de mesma grandeza, da amostra de 64 inclusões para a amostra de 16 inclusões. O computador utilizado tem o sistema operacional *Windows* 8.0, processador *Intel* (R) *Core* (TM) i7 - 3.40 GHz, memória *RAM* de 16 GB, placa de vídeo *NVIDIA GeForce* GT 430, e os programas utilizados para a simulação foi o *ANSYS Mechanical APDL* versão 14.5.

Figura 10 - Tempo de processamento das amostras.



Estudo da Influência da Fração Volumétrica CI no EVR

Após a determinação do EVR, segundo o critério de Hill, para uma fração de volume de nódulos de 15% em relação ao volume da amostra (CI = 15%), partiu-se para a próxima etapa do trabalho, que foi o estudo da influência desta fração volumétrica de nódulos na determinação do EVR do modelo. Para tanto, foi implementada a mesma metodologia para frações CI = 10%, CI = 5% e CI = 1%. Os resultados são apresentados nas Figs. 11 à 16, sendo possível observar que, dentro da faixa de desvio padrão, o EVR para CI = 10% seria o modelo de 16 esferas, enquanto que para os casos de CI = 5% e CI = 1% ter-se-ia como EVR os modelos de 32 esferas. Portanto, fica evidenciada, embora de forma muito sutil, visto que esta é uma análise no campo linear-elástico, uma influência da fração volumétrica da segunda fase (nódulos esféricos) no interior da matriz cúbica, na determinação do EVR do modelo.

Figura 11 - Comportamento relativo do módulo de compressibilidade K* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 10% em relação ao volume da amostra.







Figura 13 - Comportamento relativo do módulo de compressibilidade K* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 5% em relação ao volume da amostra.



Figura 14 - Comportamento relativo do módulo de elasticidade transversal G* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 5% em relação ao volume da amostra.



Figura 15 - Comportamento relativo do módulo de compressibilidade K* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 1% em relação ao volume da amostra.



Figura 16 - Comportamento relativo do módulo de elasticidade transversal G* com o incremento do número de nódulos para um volume de nódulos de 1% em relação ao volume da amostra.



Estudo do Distanciamento Mínimo

Com o EVR definido (16 esferas), partiuse para o estudo da distância mínima entre as esferas (DE) e entre as esferas e a matriz (DB), a fim de verificar a influência desses parâmetros na determinação dos módulos K^* e G^* e no modelo implementado. Este estudo é importante pois testa os limites aos quais se poderia chegar para a fabricação de um modelo real, uma vez que uma grande aproximação das geometrias originam problemas nos elementos da malha, e por consequência, incoerência nos resultados. E o mesmo vale para um afastamento exagerado, sendo que se tem uma limitação de volume para inserção das esferas.

Tabela V - Resultados dos módulos K* e G* da variação da DE (Pa).

	0.5 mm		0.75 mm		1 mm		1.5 mm		2 mm	
	K*	G*								
M1	1,66E+09	1,16E+09	1,67E+09	1,18E+09	1,67E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,64E+09	1,15E+09
M2	1,66E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,16E+09
M3	1,65E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,18E+09	1,66E+09	1,14E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,63E+09	1,15E+09
M4	1,66E+09	1,17E+09	1,63E+09	1,14E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,65E+09	1,16E+09	1,65E+09	1,17E+09
M5	1,65E+09	1,16E+09	1,65E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,18E+09
Med.	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,65E+09	1,16E+09

	0.5 mm		0.75 mm		1 mm		1.5 mm		2 mm	
·	K*	G*								
M1	1,66E+09	1,16E+09	1,67E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,18E+09
M2	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,15E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,17E+09
M3	1,65E+09	1,17E+09	1,65E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,14E+09	1,64E+09	1,16E+09	1,65E+09	1,17E+09
M4	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,65E+09	1,17E+09
M5	1,65E+09	1,16E+09	1,68E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,67E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,17E+09
Med.	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,16E+09	1,66E+09	1,17E+09	1,66E+09	1,17E+09

Tabela VI - Resultados dos módulos K* e G* da da variação da DB (Pa).

Os valores originais atribuídos à DE e DB eram de 1 mm. Variou-se então estes valores para 0,5, 0,75, 1,5 e 2 mm e foram comparados com os originais. Ressalta-se que os modelos foram simulados com CI de 15% e com o número de esferas do EVR definido (16).

A seguir apresentam-se as Tabs. V e VI com os resultados dos módulos K^* e G^* da variação da DE e DB:

As Figs. 17 à 20 ilustram a relação $K^*/K^?$ e $G^*/G^?$ onde K^* e G^* são os resultados médios das variações das distâncias e $K^?$ e $G^?$ os resultados médios do distanciamento original. Pode se observar que essa variação de distâncias não gerou alterações importantes nos resultados.

Figura 17 - Relação K*/K' da variação da distância entre as esferas.







Figura 19 - Relação K*/K' da variação da distância entre esferas e matriz.



Figura 20 - Relação G*/G' da variação da distância entre esferas e matriz.



Conclusão

Os estudos efetuados neste trabalho caracterizam-se por procedimentos visando a homogeneização de um material composto formado por uma matriz cúbica polimérica de PMMA e uma segunda fase esférica de elastômeros, inseridos na matriz de forma aleatória, através da determinação de um elemento de volume representativo (EVR). Foi construída uma rotina computacional através de uma interface MAPLE/ANSYS para a confecção de modelos de elementos finitos, com suas propriedades geométricas e físicas, malha, condições de contorno, simulações, processamento e pós-processamento dos resultados. Aplicou-se a condição de contorno específica para o critério de Hill e a formulação dos parâmetros de convergência K* e G*. Concluiu-se que, para os modelos com 2, 4, 8, 16, 32, 64 inclusões na matriz, a convergência dos resultados se deu a partir dos modelos de 16 inclusões, sendo este, portanto, considerado o EVR do estudo. Após a determinação do EVR, segundo o critério de Hill, para uma fração de volume de nódulos de 15% em relação ao volume da amostra (CI = 355 15%), foi realizado o estudo da influência desta fração volumétrica de nódulos na determinação do EVR do modelo, através da implementação da mesma metodologia para frações CI = 10%, CI = 5% e CI = 1%. Os resultados evidenciaram uma influência da fração volumétrica da segunda fase (nódulos esféricos) no interior da matriz cúbica, na determinação do EVR do modelo, conforme os gráficos mostrados nas Figs. 11 à 16. Definido o EVR e verificada a influência da CI, iniciou-se o estudo da influência dos distanciamentos mínimos, sendo que se verificou que os mesmos não influenciam significativamente nos resultados, conforme observado nas Figs, 17 a 20.

REFERÊNCIAS

AIDUN, J.B.; LO, D.C.S.; TRUCANO, T.G.; FYE, R.M. Representative Volume Size: A Comparison of Statistical Continuum Mechanics and Statistical Physics. Sandia National Laboratories, Albuquerque, Novo México, 1999.

ANSYS. **ANSYS Mechanichal APDL Structural Analysis Guide Release 13**. Disponível em: <<u>http://www.ansys.com/customer/content/documentation/130/ans_str.pdf</u>>. Acesso em: 12 mar. 2012.

DRUGAN, W. J.; WILLIS, J. R. A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. International Journal of Solids and Structures, v. 44, p. 497-524, abr. 1996.

DUTRA, V. F. P. Um Modelo Constitutivo para o Concreto Reforçado com Fibras de Aço via Teoria da Homogeneização. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre, 2012.

GHOSSEIN, E.; LÉVESQUE M. A fully automated numerical tool for a comprehensive validation of homogenization models and its application to spherical particles reinforced composites. International Journal of Solids and Structures, v. 49, p. 1387-1398, jun. 2012.

KANIT, T. et al. **Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach**. International Journal of Solids and Structures, v. 40, p. 3647-3679, jun. 2003.

KHDIR, Y. K. et al. **Computational homogenization of elastic-plastic composites**. International Journal of Solids and Structures, v. 50, p. 2829-2835, ago. 2013.

MAPLE. **Online Product Help**. Disponível em: <<u>http://www.maplesoft.com/support/help/index</u>. aspx>. Acesso em: 11 jul. 2013.

MELLO, C. F.; ARGENTA, M. A. Estimativa dos efeitos da aproximação das inclusões nas condições de contorno de um material bifásico. Congresso Nacional de Matemática Aplicada à Indústria, Caldas Novas, 2014.

OTERO, F. et al. Numerical homogenization for composite materials analysis. Comparison with other micro mechanical formulations. Composite Structures, v. 122, p. 405-416, abr. 2015.

ZOHDI, T.I. Advanced School on Computational Micromechanics of Materials Science, Course Notes, International Centre for Mechanical Sciences, Udine, Italia, 2002.

GHOSSEIN, E.; LÉVESQUE M. A fully automated numerical tool for a comprehensive 378 validation of homogenization models and its application to spherical particles reinforced 379 composites. International Journal of Solids and Structures, v. 49, p. 1387-1398, jun. 2012. 380

KANIT, T. et al. **Determination of the size of the representative volume element for** 381 **random composites: statistical and numerical approach**. International Journal of Solids 382 and Structures, v. 40, p. 3647-3679, jun. 2003. 383

KHDIR, Y. K. et al. **Computational homogenization of elastic-plastic composites**. 384 International Journal of Solids and Structures, v. 50, p. 2829-2835, ago. 2013. 385

MAPLE. **Online Product Help**. Disponível em: 386 <http://www.maplesoft.com/support/help/ index.aspx>. Acesso em: 11 jul. 2013. 387

MELLO, C. F.; ARGENTA, M. A. Estimativa dos efeitos da aproximação das inclusões 388 nas condições de contorno de um material bifásico. Congresso Nacional de Matemática 389 Aplicada à Indústria, Caldas Novas, 2014. 390

OTERO, F. et al. Numerical homogenization for composite materials analysis. 391 Comparison with other micro mechanical formulations. Composite Structures, v. 122, p. 392 405-416, abr. 2015. 393

ZOHDI, T.I. Advanced School on Computational Micromechanics of Materials Science, 394 Course Notes, International Centre for Mechanical Sciences, Udine, Italia, 2002. 395