



**André Miguel
Martins de
Lima Bastos**

**Modelação Micromecânica de Propriedades de
Materiais Compósitos: Estudo Numérico da
Influência do Tipo de Condições de Fronteira**



**André Miguel
Martins de
Lima Bastos**

**Modelação Micromecânica de Propriedades de
Materiais Compósitos: Estudo Numérico da
Influência do Tipo de Condições de Fronteira**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, realizada sob a orientação científica do Doutor Joaquim Alexandre Mendes de Pinho da Cruz, Professor Auxiliar do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro

O júri / The jury

Presidente / President

Prof. Doutor Alfredo Manuel Balacó de Moraes
Professor Associado da Universidade de Aveiro

Vogais / Committee

Prof. Doutor Fernando Jorge Ventura Antunes
Professor Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Prof. Doutor Joaquim Alexandre Mendes de Pinho da Cruz
Professor Auxiliar da Universidade de Aveiro (orientador)

Agradecimentos / Acknowledgements

Em primeiro lugar quero agradecer ao Professor Alexandre Cruz, pelo acompanhamento na realização desta tese, sempre com uma opinião construtiva e acertada, sempre com um incentivo para dar, e sempre disponível a toda a hora para me ajudar.

À minha namorada, Diva, que deu mais alegria e brilho a este momento tão importante, agradeço todo o carinho, todo o amor, toda a força e apoio incondicional que me deu, sobretudo quando as coisas corriam menos bem, esteve sempre lá para mim.

Agradeço a todos os meus amigos, em especial ao João Almeida, ao José Nogueira e ao Bruno Rodrigues, por estarem comigo durante toda esta etapa, em todos os momentos, e me proporcionarem um excelente ambiente na casa onde vivíamos, risos e momentos que terei sempre em mente.

Agradeço especialmente aos meus pais, pelo apoio a todos os níveis e pelo esforço incansável que fizeram para que eu tenha aqui chegado. Pela paciência, pela compreensão, pela constante preocupação, por tudo. E ao meu irmão, o meu ídolo, um obrigado do tamanho do mundo.

Resumo

A simulação numérica, em particular a modelação com base no Método dos Elementos Finitos, desempenha um papel de importância crucial na análise do comportamento estrutural de componentes constituídos por materiais compósitos com microestruturas complexas. No entanto, a sua utilização leva geralmente a necessidade de se recorrer não só a malhas não-estruturadas de elementos finitos mas também a um elevado número de elementos finitos para a definição dos detalhes microestruturais, sendo assim necessário utilizar uma grande quantidade de memória computacional e despende tempos de computação excessivamente longos. Neste contexto, o recurso a metodologias de homogeneização pode resultar em benefícios computacionais significativos.

O conceito da homogeneização de propriedades físicas remonta ao século XIX. As técnicas de homogeneização permitem, com base na utilização de um volume elementar representativo — um conceito introduzido por Hill —, a substituição de um meio heterogéneo por um meio homogéneo equivalente, possibilitando, deste modo, a obtenção de leis de comportamento macroestruturais a partir de informação relativa ao nível microestrutural.

O volume elementar representativo consiste numa porção finita de um material heterogéneo capaz de caracterizar o seu comportamento macroscópico. A sua dimensão pode ser aproximada como o menor bloco construtivo (célula unitária) no caso de materiais compósitos que apresentem periodicidade local ou global, utilizando-se neste caso condições de fronteira periódicas para efetuar o processo de homogeneização. No entanto, no caso de não-periodicidade, o processo de homogeneização requer a aplicação de outros tipos de condição de fronteira. Em geral, são três os tipos distintos de condição de fronteira usualmente utilizados: (i) de deslocamento linear, (ii) de tração uniforme e (iii) de tipo misto. No contexto da homogeneização, as condições do tipo misto são aquelas que verificam o Critério de Hill, e este tipo inclui as condições de fronteira periódicas.

Neste contexto, este trabalho visa a análise do efeito da aplicação dos diferentes tipos de condição de fronteira adequados ao processo de homogeneização baseado em modelos micromecânicos, nomeadamente aos tipos de condição de fronteira que satisfazem o critério energético de Hill: (i) de deslocamento linear, (ii) de tração uniforme e (iii) de periodicidade.

Abstract

Numerical simulation, in particular the modeling based on the Finite Element Method, plays a crucial role in the analysis of the structural behaviour of components made by composite materials with complex microstructures. However, their use generally leads to the necessity of using not only unstructured finite element meshes but also a large number of finite elements for the definition of the microstructural details, being necessary to use a large amount of computer memory and spend excessively long computing times. In this context, the use of homogenization methods can result in significant computational benefits.

The concept of homogenization of physical properties dates back to the nineteenth century. The homogenization techniques enable, based on the use of a representative elementary volume — a concept introduced by Hill —, the replacement of a heterogeneous medium by an equivalent homogeneous one, allowing thereby to obtain the macrostructural behaviour laws from information on the microstructural level.

The representative elementary volume is the finite portion of a composite material capable of characterising its macroscopic behaviour. Its dimension can be approximated as the smallest building block (unit cell) in the case of composite materials that have local or global periodicity, being in this case used periodic boundary conditions in the process of homogenization. However, in the case of non-periodicity, the process of homogenization requires the application of other types of boundary condition. Generally, three distinct types of boundary condition are usually used: (i) linear displacement, (ii) uniform traction and (iii) mixed type. In the context of homogenization, the mixed type of conditions are those that verify Hill's criterion, and this type includes the periodic boundary conditions.

In this context, this work concerns the analysis of the effect of the application of different types of boundary condition suitable the homogenization process based on micromechanical models, namely those types satisfying Hill's energy criterion: (i) linear displacement, (ii) uniform traction and (iii) periodicity.

Conteúdo

Conteúdo	i
Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	vii
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	3
2 Modelação do Comportamento Mecânico de Materiais Heterógeneos	5
3 Geração e Representação de Microestruturas	11
3.1 Fração Volúmica e Valor Médio	11
3.2 Classificação das Microestruturas	12
3.2.1 Periodicidade e Aleatoriedade	12
3.2.2 Homogeneidade Estatística	13
3.3 Geração de Microestruturas de Compósitos de Partículas	13
4 Método dos Elementos Finitos	15
4.1 Introdução	15
4.2 Discretização Espacial do Problema	15
4.3 Formulação de Elementos Finitos	17
4.4 Sistema Global de Equações	18
5 Metodologia de Homogeneização	19
5.1 Problema da Homogeneização	19
5.2 Determinação de Propriedades Efetivas	20
5.3 Condições de Fronteira para Homogeneização	24
5.3.1 Condições de Fronteira de Tração Uniforme	25
5.3.2 Condições de Fronteira de Deslocamento Linear	26
5.3.3 Condições de Fronteira Periódicas	27
5.4 Imposição de Condições de Fronteira	29
5.4.1 Condições de Fronteira \mathcal{E} -LD-BC	29
5.4.2 Condições de Fronteira \mathcal{E} -PR-BC	30
5.4.3 Condições de Fronteira \mathcal{E} -UT-BC	31
6 Ensaio e Resultados Numéricos	33
6.1 Ensaio Numérico Efetuado	33
6.2 Ensaio de Geração e Discretização da Microestrutura	34
6.2.1 Análise da variação da fração volúmica com o número de partículas	35

6.2.2	Análise do Efeito da Permissão ou Não de Interseção com a Fronteira . . .	39
6.2.3	Análise da Aleatoriedade ou da Periodicidade Microestrutural	41
6.2.4	Análise da Influência da Morfologia das Partículas	42
6.3	Ensaaios de Homogeneização	42
6.3.1	Estudo de convergência: Refinamento da Malha	42
6.3.2	Análise da Energia Média para Diferentes Condições de Fronteira	44
6.3.3	Análise da Tensão Média para Diferentes Condições de Fronteira	46
6.3.4	Análise do Efeito da Razão de Propriedades	49
6.3.5	Análise da Fração Volúmica de Inclusões Rígidas	51
6.3.6	Análise de κ e μ para Diferentes Condições de Fronteira	53
6.3.7	Análise de κ e μ Considerando \mathcal{E} -LD-BC e Σ -UT-BC	56
6.3.8	Análise de Propriedades Mecânicas Homogeneizadas	57
7	Conclusões Finais	67
7.1	Conclusões	67
7.2	Propostas de Trabalho Futuro	71
8	Simbologia	73
A	Programa HETERO2D	75
A.1	Algoritmo de Geração de Microestruturas de Partículas	75
A.1.1	Sub-rotina <code>ranpack.f90</code>	75
A.1.2	Sub-rotina <code>ordint.f90</code>	76
A.1.3	Sub-rotina <code>auto.f90</code>	76
A.2	Condições de Fronteira Disponíveis	77
A.3	Determinação de Propriedades Macroscópicas	78
	Bibliografia	79

Lista de Figuras

2.1	Esquema do conceito de modelos multiescala [28].	6
2.2	Ilustração de multiescalas hierárquicas no corpo humano [29].	6
2.3	O complexo ginásio-termas na cidade de Sárdis, a capital do Reino da Lídia, hoje em Manisa, na moderna Turquia [29].	7
2.4	Apartamento moderno, de 17 andares, em Hannover, na Alemanha [29].	7
2.5	Materiais com distintos tipos de microestrutura: (a) poroso e (b) granular [29].	7
2.6	Barra tracionada de um compósito unidimensional [29].	8
2.7	Microestrutura heterogênea caracterizada por (a) um REV e (b) uma RUC [39].	10
3.1	Microestrutura com (a) múltiplas fases e (b) duas fases [29].	11
3.2	Classificação geométrica de uma microestrutura: (a) periódica, (b) aleatória monodispersa e (c) aleatória polidispersa [29].	12
3.3	Célula unitária associada a uma microestrutura periódica [29].	13
3.4	Microestruturas estatisticamente homogênea (esquerda) e não-homogênea (direita) [29].	13
5.1	Problema da homogeneização: material heterogêneo original da macroestrutura e material homogêneo equivalente [29].	19
5.2	Os resultados da análise de um REV permite a substituição do material heterogêneo original \mathcal{M} por um material homogêneo efetivo \mathcal{M}^* [29].	21
5.3	Decomposição do domínio \mathcal{V} do REV em duas fases, sendo a interface do material $\partial\mathcal{V}^{(1)} \cap \partial\mathcal{V}^{(2)}$ [29].	23
5.4	Efeito de aplicação de UT-BC e LD-BC [29].	27
5.5	Campos de tensão e deformação resultantes da aplicação de PR-BC [29].	28
5.6	Campos de deslocamento resultantes da aplicação de BC controladas por ϵ [29].	32
6.1	Microestruturas geradas com: (a) 4 partículas e (b) 2048 partículas, $NX=NY=100$.	35
6.2	Variação do valor de fração de volume (VOLFRAC) obtido com o número de partículas, para a realização de apenas um teste, $NX=NY=100$	36
6.3	Valores obtidos de VOLFRAC = 0,20, para vários valores de NP.	36
6.4	Valores obtidos de VOLFRAC = 0,30, para vários valores de NP.	37
6.5	Valores obtidos de VOLFRAC = 0,40, para vários valores de NP.	37
6.6	Valores obtidos de VOLFRAC = 0,50, para vários valores de NP.	38
6.7	Valores obtidos de VOLFRAC = 0,60, para vários valores de NP.	38
6.8	Variação do valor de fração de volume (VOLFRAC) obtido, para diferentes números de partículas, usando os valores médios obtidos, para valores de VOLFRAC de 10%, 20%, 30%, 40%, 50% e 60%, $NX=NY=100$	39
6.9	Microestrutura com partículas (a) com permissão e (b) sem permissão de interseção da fronteira, com $NP=25$ e $NX=NY=100$	40

6.10	Valor máximo de fração de volume obtido, para determinados números de partículas sem permissão de interseção.	41
6.11	Microestruturas (a) periódica e (b) aleatória, ambas com uma malha de $NX=NY=100$ e com $NP=49$	41
6.12	Diferentes morfologias para as partículas, para uma microestrutura periódica, $NP=49$ e $VOLFRAC$ de entrada = 50%.	42
6.13	Representação gráfica dos valores obtidos no estudo de convergência, para um número de partículas $NP = 1$	43
6.14	Malha não-refinada, composta por $NX = NY = 5$	44
6.15	Malha admissível, composta por $NX = NY = 50$	44
6.16	Variação da energia média, para uma microestrutura periódica, com o número de partículas.	45
6.17	Variação da energia média, para uma microestrutura não-periódica, com o número de partículas.	45
6.18	Perfis de energia obtidos numa microestrutura periódica (esquerda) e não-periódica (direita), para condições de fronteira (a) \mathcal{E} -Pr-BC, (b) \mathcal{E} -LD-BC e (c) \mathcal{E} -UT-BC. Ambas com $NP=9$ e $NX=NY=150$	46
6.19	Perfis de tensão obtidos numa microestrutura periódica, para a condição de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC. (a) $NP=4$ e $NX=NY=100$, (b) $NP=9$ e $NX=NY=150$, (c) $NP=16$ e $NX=NY=200$	47
6.20	Variação da tensão $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, com o número de partículas.	48
6.21	Variação da tensão $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, com o número de partículas.	48
6.22	Perfis de tensão obtidos para uma amostra com 4 partículas, para condições de fronteira (a) \mathcal{E} -Pr-BC, (b) \mathcal{E} -LD-BC, (c) \mathcal{E} -UT-BC. Ambas com $NP=4$ e $NX=NY=100$	49
6.23	Variação da tensão e da energia média, para $r = 500$	50
6.24	Variação da tensão e da energia média, para $r = 1000$	50
6.25	Variação da tensão e energia média, para $r = 0,05$	51
6.26	Variação da tensão e energia média, para $r = 0,001$	51
6.27	Variação da tensão, comparando $r = 1$ (material da matriz) e $r = 500$ (material com inclusões rígidas), com a fração volúmica.	52
6.28	Variação da energia, comparando $r = 1$ (material de matriz) e $r = 500$ (material com inclusões rígidas), com a fração volúmica.	52
6.29	Variação do módulo de compressibilidade, κ , com o número de partículas, para condições de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC.	53
6.30	Variação do módulo de corte, μ , com o número de partículas, para condições de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC.	53
6.31	Amostra utilizada na medição da inconsistência isotrópica, com 4 partículas.	54
6.32	Variação do erro, e , e do desvio médio de um conjunto de amostras, \hat{e} , para partículas sem permissão de interseção com a fronteira de microestruturas aleatórias.	54
6.33	Amostras analisadas (a) com permissão e (b) sem permissão de interseção com a fronteira da célula microestrutural.	55
6.34	Variação do desvio médio de um conjunto de amostras, \hat{e} , para (a) partículas com permissão e (b) partículas sem permissão de interseção com a fronteira da célula microestrutural.	55
6.35	Variação do módulo de compressibilidade, κ , com o número de partículas, usando condições de fronteira \mathcal{E} -LD-BC e Σ -UT-BC.	56

6.36	Variação do módulo de corte, μ , com o número de partículas, usando condições de fronteira \mathcal{E} -LD-BC e Σ -UT-BC.	57
6.37	Geometrias das amostras geradas com distribuições aleatórias de partículas esféricas, para frações volúmicas de reforço de (a) 10%, (b) 20%, (c) 30%, (d) 40% e (e) 50%.	58
6.38	Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 10%, com o número de partículas.	59
6.39	Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 20%, com o número de partículas.	59
6.40	Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 30%, com o número de partículas.	60
6.41	Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 40%, com o número de partículas.	60
6.42	Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 50%, com o número de partículas.	61
6.43	Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 60%, com o número de partículas.	61
6.44	Representação esquemática de células representativas unitárias associadas aos modelos micromecânicos (a) de Voigt-Reuss e (b) de Hashin-Shtrikman [45]. . .	62
6.45	Variação do módulo de elasticidade longitudinal com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de alumínio.	64
6.46	Variação do coeficiente de Poisson com a fracção volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de matriz de alumínio.	66
A.1	Estrutura do código HETERO2D para o algoritmo de geração de microestruturas.	75
A.2	Representação dos parâmetros N0 e NUMIP_HI.	76
A.3	Estrutura do código HETERO2D para a metodologia de homogeneização.	77

Lista de Tabelas

6.1	Valores da fração volúmica obtidos em função de VOLFRAC, $NX=NY=100$. . .	35
6.2	Valores da fração volúmica máxima obtidos, para partículas sem permissão de interseção.	40
6.3	Valores obtidos no estudo de convergência.	43
6.4	Propriedades mecânicas elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício.	57

Capítulo 1

Introdução

Com o crescimento da capacidade de cálculo dos computadores e o avanço contínuo das tecnologias, as técnicas de simulação têm sido amplamente utilizadas na previsão do comportamento mecânico, permitindo poupar tempo e recursos com a diminuição de ensaios no desenvolvimento de projetos e novos materiais. Neste contexto, o Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma das técnicas mais utilizada e, quando se utilizam corretamente quer os tipos de elemento quer os modelos constitutivos, este modelo permite excelentes aproximações.

Outra abordagem no âmbito do Método dos Elementos Finitos, recentemente desenvolvida e também utilizada, opta por uma abordagem em que, em lugar de se definir o comportamento do material por um modelo constitutivo macroscópico, se avalia a sua resposta através da análise numérica da microestrutura com base em volumes elementares representativos (REV¹).

Os materiais heterogêneos possuem propriedades físicas que variam ao longo da sua microestrutura. No caso dos materiais compósitos, as suas microestruturas consiste tipicamente em partículas ou inclusões fibrosas, e/ou poros, referidos como heterogeneidades. A escala de comprimento de uma macroestrutura (D) constituída por um material heterogêneo é tipicamente muito maior do que a escala de comprimento das heterogeneidades (d): $d \ll D$. Uma solução para este tipo de problema é a de propor formulações fenomenológicas para o comportamento macroscópico de um material heterogêneo. Sempre que o comportamento constitutivo dos constituintes individuais do material heterogêneo é conhecido, os testes laboratoriais para esta finalidade podem ser contornados, recorrendo a métodos que são geralmente classificados como *Métodos de Homogeneização*.

Os métodos de homogeneização dependem da identificação de um REV, um conceito introduzido por Hill [1], que consiste numa amostra de tamanho finito do material heterogêneo que caracteriza o seu comportamento macroscópico. Embora estejam disponíveis vários métodos de identificação de um REV, eles podem ser classificados em duas categorias principais de acordo com tipo de informação processada:

1. dados geométricos, tais como a fração de volume de heterogeneidades (ver Torquato [2]);
2. informação mecânica, tal como tensão ou propriedades elásticas (ver Zohdi e Wriggers [3], Hollister e Kikuchi [4], Hazanov e Huet [5]).

Em qualquer dos casos, o requisito geral para que uma amostra possa ser considerada um REV é que as dimensões típicas de heterogeneidades (d) sejam muito menores do que a

¹Do inglês: *Representative Elementary Volume*.

dimensão típica do REV (L): $d \ll L$. No caso de $\frac{d}{L} \rightarrow 0$, será de esperar que a amostra se assemelhe, ao nível macroscópico, a um material homogéneo. Por outro lado, a aplicabilidade da homogeneização requer que o tamanho do REV seja muito menor do que a dimensão típica da macroestrutura (D): $L \ll D$. A exigência de que $d \ll L \ll D$ é também conhecida pelo *Princípio de Separação de Escalas*.

No caso de compósitos que exibem periodicidade local e global, o REV pode ser considerado, aquando de uma análise da homogeneização com base em condições de fronteira apropriadas, como sendo a célula correspondente à mais simples unidade repetida periodicamente na microestrutura, denominada de célula representativa unitária (RUC²) que se repete periodicamente [4, 6, 7]). Porém, constata-se que numa análise clássica com base numa RUC pode não se conseguir capturar o comportamento macroscópico em situações em que ocorrem instabilidades na microescala ao nível do comportamento do material ou estrutural. Nestes casos deve-se proceder ao redimensionamento do tamanho da célula unitária.

A consideração de um REV no contexto da metodologia de homogeneização requer a aplicação de condições de fronteira nesse mesmo REV [4, 5, 8]). Nesse contexto, são normalmente utilizados três tipos de condições de fronteira: (i) de deslocamento linear, (ii) de tração uniforme e (iii) de tipo misto. No contexto da homogeneização, as condições de fronteira de tipo misto são aquelas que satisfazem o *Critério de Energia de Hill* [9], sendo as condições de fronteira periódicas um caso particular destas [7, 10]. No caso particular da elasticidade linear, provou-se haver uma relação entre os resultados de homogeneização que se obtêm com os três tipos de condições de fronteira, o que motiva o uso de condições de fronteira periódicas para microestruturas periódicas [6, 4].

Para efeitos de análise mecânica de estruturas, é conveniente introduzir duas categorias de problemas que ocorrem em dois regimes, ou seja, problemas elásticos ou inelásticos, e com deformações finitas ou infinitesimais. Se os constituintes do material heterogéneo se deformarem elasticamente, então o comportamento macroscópico do material heterogéneo será também elástico. Porém, se algum dos constituintes se deformar inelasticamente, então o comportamento macroscópico do material resultará também inelástico.

Hoje em dia, a análise de homogeneização em regime de deformação elástica infinitesimal (elasticidade linear) encontra-se bem estabelecida, podendo ser destacados os trabalhos de Aboudi [11], Christensen [12], Nemat-Nasser e Hori [7], e Torquato [2], para métodos analíticos, de Zohdi e Wriggers [3], Kaminski [13] e Nielsen [14], para aspetos computacionais, e ainda de Cioranescu e Donato [15], e Bakhvalov e Panasenko [16], para aspetos matemáticos. Neste regime, a partir do procedimento de homogeneização obtêm-se uma estimativa, ou um conjunto de limites, para o tensor de elasticidade macroscópica, que caracteriza completamente o comportamento macroscópico. A maioria dos limites analíticos e estimativas são tipicamente grosseiras, e por isso têm sido desenvolvidos métodos proporcionando limites mais refinados [17, 18] que permitem uma melhor aproximação do tensor de elasticidade macroscópico [3, 19, 20].

Uma determinação aproximada do tensor de elasticidade permite substituir o material heterogéneo por um material homogéneo efetivamente equivalente, reduzindo assim o problema macroscópico para um problema estrutural. Por outro lado, a homogeneização em deforma-

²Do inglês: *Representative Unit Cell*.

ções finitas no regime elástico foi introduzida por Hill e Rice [21] e Ogden [22]. Neste regime existem várias abordagens de homogeneização, em que se visa o estabelecimento de limites para a energia de deformação macroscópica.

A aplicabilidade de qualquer método de homogeneização requer, para além de uma boa distribuição de heterogeneidades no que diz respeito da dimensão macroestrutural, campos de deformação macroscópicos que variam ao longo de períodos. Este requisito tipicamente não é satisfeito perto dos limites estruturais da macroestrutura [4, 23]) e perto de interfaces de material macroscópico [24]. Assim sendo, deve quantificar-se o efeito dessa violação nos resultados macroscópicos e adotar, se necessário, um outro esquema de análise.

Neste contexto, este trabalho visa a análise do efeito da aplicação de diferentes tipos de condição de fronteira adequados ao processo de homogeneização baseado em modelos micromecânicos, nomeadamente aos tipos de condição de fronteira que satisfazem o critério energético de Hill: (i) de deslocamento linear, (ii) de tração uniforme e (iii) de periodicidade.

1.1 Objetivos

- Modelação numérica 2D de Elementos de Volume Representativos;
- Proceder à determinação das propriedades efetivas de materiais compósitos com base em diversos tipos de condição de fronteira, de modo a verificar a influência da utilização de cada um deles;
- Execução de um manual de cariz pedagógico e explicativo da modelação e do funcionamento do código utilizado;
- Procedimento de análise e comparação dos resultados obtidos com outros de natureza experimental, analítica ou também numérica.

Capítulo 2

Modelação do Comportamento Mecânico de Materiais Heterógeneos

A microestrutura de um material e o seu comportamento mecânico têm grande influência na sua resposta macroscópica a solicitações externas. Os modelos constitutivos geralmente utilizados, baseados em considerações fenomenológicas ou micromecânicas, conseguem prever o comportamento do material de forma realista para algumas situações. No entanto, ao nível da microestrutura existem heterogeneidades, como por exemplo vazios ou inclusões, que afetam as suas propriedades globais. Por este motivo, os modelos macroscópicos podem apresentar algumas limitações.

Com o objetivo de se obter simulações mais realistas do comportamento dos materiais, a utilização de modelos multiescala tem tido grandes desenvolvimentos recentemente. Com estes modelos resolve-se o problema ao nível macroscópico tendo acesso a informação relativa ao comportamento da microestrutura. Desta forma, consegue-se simular a influência microestrutural no comportamento global do material.

Apesar de ser uma área de investigação recente, muitos fundamentos da modelação multiescala são relativamente antigos. Estes foram desenvolvidas sobretudo na análise de materiais compósitos, como são exemplos os trabalhos de Hill [1] e de Hashin [25]. As contribuições que deram origem ao conceito atual foram introduzidas por volta da década de 1990. No trabalho de Guedes e Kikuchi [26] é aplicado o método de homogeneização a RUC, isto é, para materiais com uma microestrutura periódica, tendo Nemat-Nasser e Hori [7] aplicado a metodologia de homogeneização a materiais caracterizados por REV.

No caso geral (isto é, não-periódico) estes modelos baseiam-se na consideração de que cada região infinitesimal no domínio do problema macroscópico é tratado como sendo um REV da microestrutura do material. O tensor de deformações macroscópicas do ponto considerado — devido às solicitações impostas ao corpo — é aplicado ao REV correspondente, dando origem a um subproblema ao nível microscópico. Com a resolução deste problema obtém-se o campo de tensões à escala microscópica, que, de acordo com a figura 2.1, é homogeneizado, resultando, assim, no tensor de tensões pontual macroscópico [27].

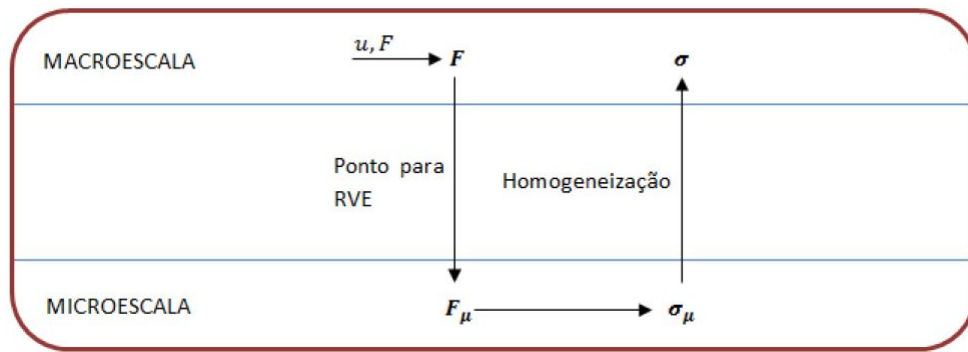


Figura 2.1: Esquema do conceito de modelos multiescala [28].

Em alguns casos, a modelação multiescala pode ser efetuada não em duas, mas em várias escalas de modo hierárquico. A modelação do corpo humano é um paradigma desta situação, conforme se ilustra na figura 2.2. De facto, os músculos são compostos por feixes de fibras, com veias de diferentes tamanhos, circulando o sangue no seu interior. O próprio sistema esquelético exhibe multiescalas hierárquicas, como é o caso, por exemplo, da coluna vertebral. Amplificando a superfície de uma vértebra, é possível observar-se a delicada estrutura porosa que o osso possui. A natureza heterogênea encontra-se assim associada a materiais ou estruturas que apresentam tais características hierárquicas. Em contraste, os materiais homogêneos correspondem àqueles que não as apresentam. O termo composto é normalmente usado como terminologia alternativa, embora seja geralmente reservado para casos especiais de materiais heterogêneos.

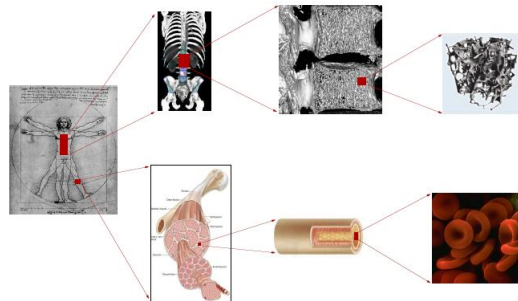


Figura 2.2: Ilustração de multiescalas hierárquicas no corpo humano [29].

Várias características de multiescala hierárquica podem ser observadas em estruturas de engenharia criadas pelo Homem. Como exemplo, apresenta-se na figura 2.3 uma estrutura de um edifício antigo em que os pilares são constituídos por uma mistura de pedaços de rocha de diferentes tamanhos, finos e grosseiros, presentes num só material através de uma ligação natural. Estas características de multiescala são propositadamente utilizadas na construção de edifícios moderno, tal como se ilustra na figura 2.4, para o uso do betão armado, o que permitiu a construção com características anteriormente inatingíveis. O betão, em si, é um material com características multiescala, uma mistura de agregados (reforço) de vários tamanhos e uma pasta de cimento que atua como ligante do material (matriz). A pasta de cimento, por sua vez, é constituída por poros (ou cavidades) e cimento hidratado/não-hidratado. De notar que os elementos estruturais da pasta de cimento apresentam aproximadamente a mesma escala de comprimento.

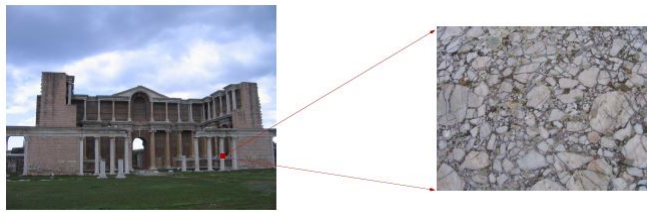


Figura 2.3: O complexo ginásio-termas na cidade de Sárdis, a capital do Reino da Lídia, hoje em Manisa, na moderna Turquia [29].

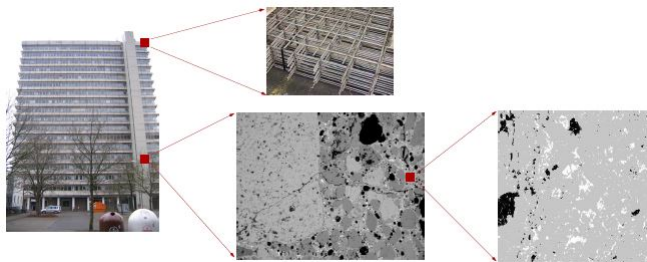


Figura 2.4: Apartamento moderno, de 17 andares, em Hannover, na Alemanha [29].

Por outro lado, atenda-se ao facto de a disposição das fases, no que diz respeito à microestrutura, ser da maior importância. Por exemplo, a existência de espaços com ar nas rochas resulta numa microestrutura porosa, como se ilustra na figura 2.5(a). Por outro lado, ao invertemos esta disposição obtêm-se pedaços de rocha imersos em ar, isto é, simples areia, uma microestrutura discreta que também é referida como granular, conforme se ilustra na figura 2.5(b). Neste contexto, estamos perante o conceito de conexão de fase. Uma ferramenta fundamental de caracterização microestrutural consiste na fração volúmica de uma fase.

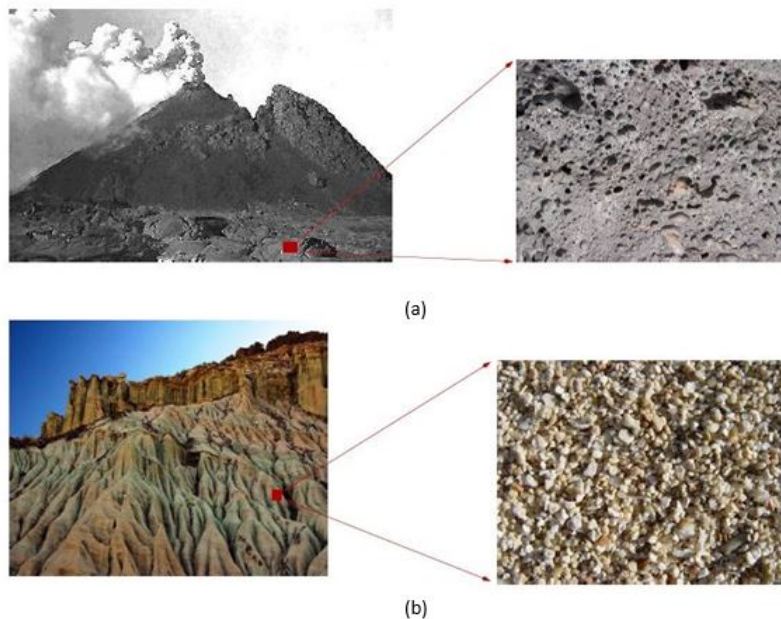


Figura 2.5: Materiais com distintos tipos de microestrutura: (a) poroso e (b) granular [29].

O principal objetivo da análise micromecânica consiste na determinação de propriedades efetivas de materiais heterógeneos. Esta análise visa a determinação de um material homogéneo de propriedades equivalentes às do heterógeneo. O efeito da dimensão das heterogeneidades no comportamento macroscópico de uma estrutura e o conceito da aproximação por um corpo homogéneo com propriedades equivalentes encontra-se ilustrado, para uma situação unidimensional, na figura 2.6, onde uma barra unidimensional é tracionada. Pretende-se determinar o campo de deslocamentos no interior da barra para uma distribuição muito fina de duas fases. No caso de a barra ser metade de uma fase e metade de outra, ter-se-ia que o campo de deslocamentos seria contínuo e constituído por 2 segmentos de reta com distintos declives. Logo que se proceda ao refinamento da distribuição de fases obtêm-se um campo constituído por uma sucessão de múltiplos segmentos de reta alternadamente de diferentes declives. Este campo parece aproximar-se (em termos de tendência) de uma única linha. Assim, para uma distribuição suficientemente fina, não se distinguirão as inflexões no campo de deslocamentos, pelo que ao nível macroscópico o material pode ser aproximado por um material homogéneo equivalente, ao qual se encontra associado a um campo resultante de deslocamentos linear.

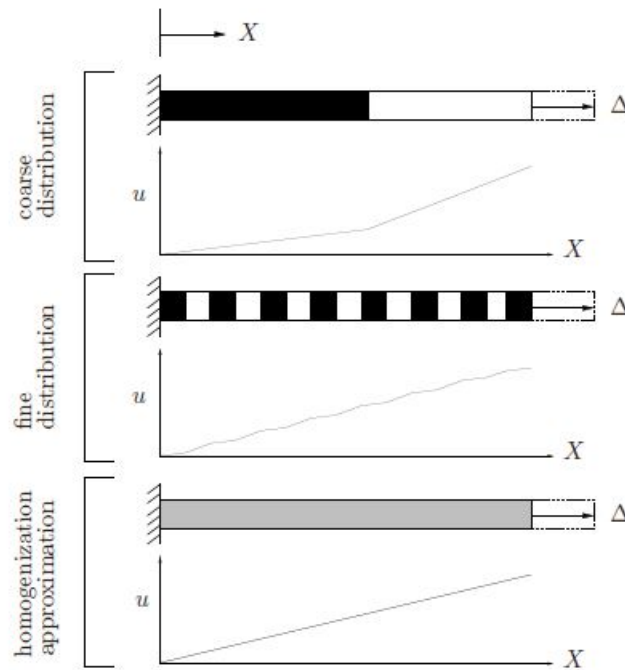


Figura 2.6: Barra tracionada de um compósito unidimensional [29].

A obtenção das propriedades desse material homogéneo equivalente consiste na metodologia de homogeneização. O conceito da homogeneização de propriedades físicas remonta ao século XIX (Poisson [31], Maxwell [32] e Rayleigh [33]). No entanto, os primeiros trabalhos referentes à teoria matemática da homogeneização datam do final dos anos 60 do século XX (ver Spanolo [34], Sanchez-Palencia [35] e De Giorgi e Spagnolo [36]). Desde então diversas técnicas de homogeneização têm vindo a surgir, das quais se destaca a homogeneização por expansão assintótica [16, 30, 37, 38]. A homogeneização por expansão assintótica consiste numa técnica expedita de abordagem a problemas de modelação de fenómenos físicos em meios com estrutura periódica, em particular do comportamento mecânico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos.

A homogeneização visa, assim, a determinação das propriedades de um material homogêneo cujo comportamento se aproxima ao do comportamento do material heterogêneo. Estas propriedades são designadas de propriedades efetivas. Estas propriedades efetivas são utilizadas para modelar o comportamento constitutivo ao nível da macroescala. Existem vários métodos de homogeneização, analíticos e computacionais. No entanto, todos eles têm como objetivo comum a obtenção de propriedades macroscópicas. A natureza de tais métodos não está longe de como um experimentalista mede as propriedades elásticas de um ensaio de tração laboratorial. As propriedades obtidas a partir desse teste de tração são na realidade uma estimativa média do comportamento de um metal policristalino com todos os tipos de defeitos e heterogeneidades incorporados em várias escalas. No entanto, o sucesso das técnicas de homogeneização é baseado na identificação de uma amostra, sob condições adequadas. A caracterização adequada dessa amostra será abordada posteriormente no decorrer do texto.

Mas qual é o porquê de (desperdiçando-se tempo e esforço) se determinar essas propriedades efetivas. Considerando-se novamente o exemplo da barra unidimensional, suponha-se que a distribuição das duas fases é tão fina que milhões de segmentos de material se encontram presentes na barra. Para se determinar o campo de deslocamentos com uma análise ou uma ferramenta numérica, tal como o método dos elementos finitos, seria necessário introduzir milhões de graus de liberdade, o que pode exigir um elevado esforço computacional. Por conseguinte, a determinação das propriedades efetivas permite a redução do esforço analítico e computacional requerido para a análise de problemas envolvendo materiais heterogêneos.

No caso particular da elasticidade linear, a propriedade que se procura determinar é o tensor macroscópico de elasticidade. Outras propriedades de interesse poderiam ser o tensor de condutividade térmica — em problemas de condução de calor —, a permeabilidade de meios porosos, certas propriedades químicas de reação e a condutividade magnética — em problemas de eletromagnetismo —, etc. Em certos casos, as propriedades macroscópicas que se pretendem para a macroescala manifestam-se com um comportamento físico completamente diferente na microescala. Note-se que se deve estar ciente do domínio de aplicabilidade de resultados da homogeneização, que são usualmente baseados em certas premissas. Portanto, os resultados obtidos só serão exatos em casos particulares.

Como em muitos outros campos da engenharia, não será erróneo afirmar que os métodos computacionais têm vindo, cada vez mais, a substituir os métodos analíticos. De facto, embora a maioria dos métodos tenham um fundo analítico sólido, requerem frequentemente implementações numéricas. De qualquer modo, os métodos de homogeneização para análise micromecânica são introduzidos para se incrementar as capacidades de previsão e de conceção do engenheiro em situações em que microestruturas complexas podem ser manipuladas dentro dos limites da teoria para se estimar o comportamento geral de macroestruturas.

Sendo um dos objetivos da micromecânica a previsão de modelos macroscópicos de materiais heterogêneos, as análises micromecânicas são realizadas usualmente com base num REV ou uma RUC (esta última no caso particular de materiais heterogêneos de microestrutura periódica), conforme se ilustra na figura 2.7. Estas entidades correspondem a diferentes representações geométricas de microestruturas heterogêneas e requerem o uso de diferentes condições de fronteira. Em particular, a análise de um REV é baseado na equivalência das condições de fronteira de tração e de deslocamento homogêneas, o que de facto define o conceito de um REV, enquanto que a análise de um RUC é baseado na combinação de condições de fronteira de deslocamento periódicas e de tração antiperiódicas.

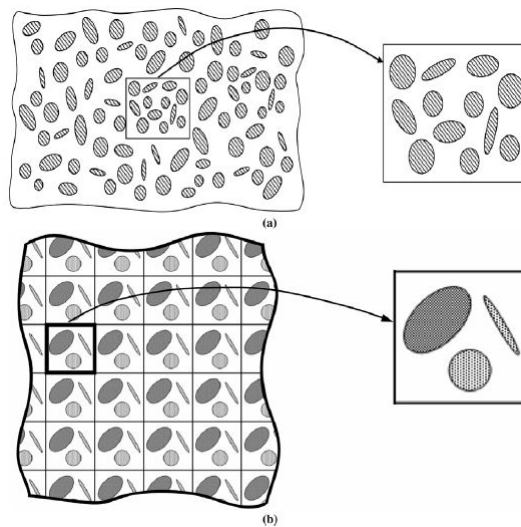


Figura 2.7: Microestrutura heterogênea caracterizada por (a) um REV e (b) uma RUC [39].

Atenda-se a que estes dois conceitos têm vindo a ser muitas vezes confundidos na literatura. A principal razão deve-se ao facto de a representação de compósitos reforçados com uma disposição periódica de fibras circulares unidireccionais dispostas em células quadradas ou hexagonais poderem ser representadas por um único RUC passível de análise pelo método de elementos finitos. Os conceitos de REV e RUC foram recentemente reexaminados em maior detalhe por vários investigadores. Estes foram estimulados por uma sequência de trabalhos de Huet [17] e outros colaboradores, que visam o problema fundamental de caracterizar módulos macroscópicos de materiais.

A RUC consiste numa porção finita de um material heterogêneo capaz de caracterizar o seu comportamento macroscópico. A sua dimensão pode ser aproximada como o menor bloco construtivo (célula unitária) no caso de materiais compósitos que apresentem periodicidade local ou global, utilizando-se neste caso condições de fronteira periódicas para efetuar o processo de homogeneização.

Capítulo 3

Geração e Representação de Microestruturas

Em seguida introduzem-se alguns conceitos relativos a microestruturas de múltiplas fase e vários métodos da sua geração e representação, visando-se apresentar alguns conceitos relativos aos procedimentos adotados nas análises micromecânicas a serem realizadas.

3.1 Fração Volúmica e Valor Médio

Como se referiu anteriormente, os materiais heterogêneos são compostos por múltiplas fases. A geometria e a distribuição destas fases podem ser extremamente complexas, conforme se ilustra na figura 3.1. Geralmente, um tipo de microestrutura será selecionado nas análises a efetuar, sendo designado por \mathcal{S} , como se ilustra na figura 3.1b.

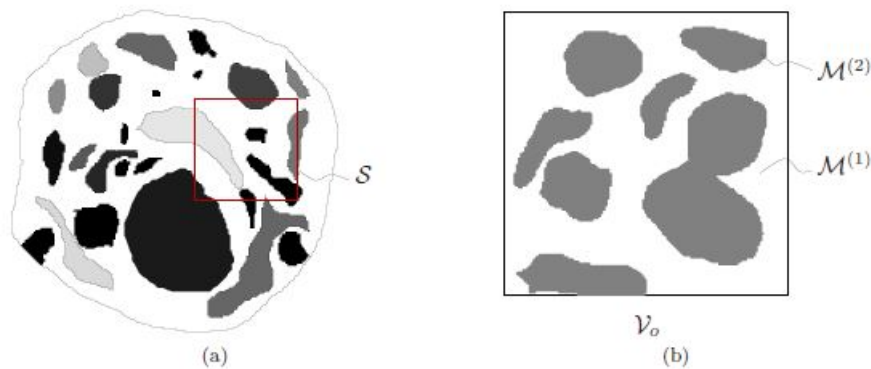


Figura 3.1: Microestrutura com (a) múltiplas fases e (b) duas fases [29].

Neste contexto, de acordo com a figura 3.1b denota-se o volume da configuração de referência para \mathcal{S} por \mathcal{V}_0 , considerando-se ainda uma configuração espacial denotada por \mathcal{V} . A fase da matriz é composta do material $\mathcal{M}^{(1)}$ que ocupa uma porção $\mathcal{V}_0^{(1)}$ de \mathcal{V}_0 . Do mesmo modo, a fase de reforço (partículas) é constituída pelo material $\mathcal{M}^{(2)}$ e ocupa uma porção $\mathcal{V}_0^{(2)}$ de \mathcal{V}_0 , pelo que $\mathcal{V}_0^{(1)} \cup \mathcal{V}_0^{(2)} = \mathcal{V}_0$ e $\mathcal{V}_0^{(1)} \cap \mathcal{V}_0^{(2)} = \emptyset$. No caso da existência de múltiplas fases (ver figura 3.1a), $\mathcal{V}_0^{(I)}$ denota uma porção da fase I . Neste contexto define-se a **fração volúmica** de fase I relativamente às configurações de referência e espacial como

$$v_0^{(I)} = \frac{|\mathcal{V}_0^{(I)}|}{|\mathcal{V}_0|}, \quad v^{(I)} = \frac{|\mathcal{V}^{(I)}|}{|\mathcal{V}|}, \quad (3.1)$$

respetivamente, sendo então $v_0^{(1)} + v_0^{(2)} = 1$ e $v^{(1)} + v^{(2)} = 1$. No entanto, atenda-se ao facto de se ter em geral que $v_0^{(I)} \neq v^{(I)}$. Para se obter uma relação entre estas duas medidas utiliza-se o conceito de **valor médio** de uma quantidade \mathcal{Q} numa região Ψ , dado por

$$\langle \mathcal{Q} \rangle_{\Psi} = \frac{1}{|\Psi|} \int_{\Psi} \mathcal{Q} \, d\Psi. \quad (3.2)$$

No seguimento deste trabalho, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, o índice Ψ que denota o domínio da média vai ser omitido sempre que seja evidente a partir do contexto (por exemplo, $\langle \mathcal{Q} \rangle$ em vez de $\langle \mathcal{Q} \rangle_{\Psi}$).

3.2 Classificação das Microestruturas

3.2.1 Periodicidade e Aleatoriedade

Um método para se classificar uma microestrutura é identificar se ela apresenta aleatoriedade ou periodicidade. Se um determinado compósito exibir periodicidade, a posição e orientação das partículas ter-se-á de repetir, conforme se ilustra na figura 3.2a. No caso de aleatoriedade, apresentará posições e orientações aleatórias, como se ilustra na figura 3.2b. Atenda-se a que na figura 3.2b as partículas de reforço encontram-se dentro do limite do domínio, não se sobrepõem e são do mesmo tamanho. No entanto, por vezes numa análise a interseção com a fronteira do limite do domínio e a sobreposição de partículas pode ser permitida, e o tamanho destas pode variar. Além disso, as propriedades do material podem em geral apresentar flutuações aleatórias. Os sistemas de partículas em que o tamanho e forma das partículas são os mesmos são denominados monodispersos, sendo classificados como polidispersos no caso contrário, conforme se ilustra na figura 3.2c.

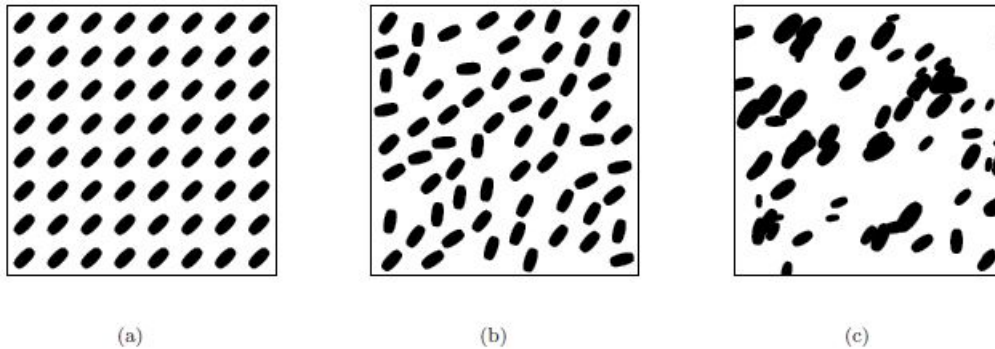


Figura 3.2: Classificação geométrica de uma microestrutura: (a) periódica, (b) aleatória monodispersa e (c) aleatória polidispersa [29].

Um conceito que se encontra relacionado com a periodicidade é o de célula unitária, a mais simples subestrutura repetitiva associada a uma microestrutura periódica. Como se

ilustra na figura 3.3, a seleção de uma célula unitária não é única. Todavia, a dimensão da célula unitária deve coincidir com o comprimento da escala l associada à periodicidade (por exemplo, distância entre partículas) ou deve ser um múltiplo inteiro de l . No entanto, esta pode ser definida a partir de qualquer porção da microestrutura. No caso de um compósito de partículas, a célula unitária mais simples é aquela que inclui apenas uma partícula.

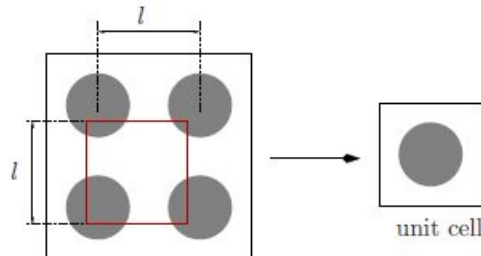


Figura 3.3: Célula unitária associada a uma microestrutura periódica [29].

3.2.2 Homogeneidade Estatística

Uma classificação alternativa das microestruturas baseia-se nas suas características estatísticas. Uma destas características é a homogeneidade estatística da distribuição das inclusões. Se as propriedades estatísticas de geometria da microestrutura não mudam de ponto para ponto, então diz-se que a microestrutura exibe homogeneidade estatística [2]. No caso contrário, em que a geometria da distribuição exibe variação observável, diz-se que a microestrutura apresenta heterogeneidade estatística. Na figura 3.4 apresentam-se exemplos de microestruturas que apresentam homogeneidade e heterogeneidade estatísticas.

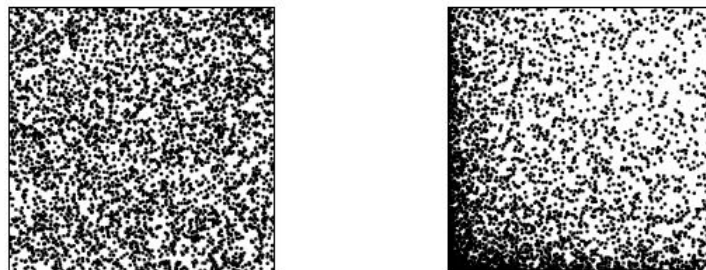


Figura 3.4: Microestruturas estatisticamente homogênea (esquerda) e não-homogênea (direita) [29].

3.3 Geração de Microestruturas de Compósitos de Partículas

A informação relativa a uma microestrutura de um material heterogêneo pode ser usada para se reconstruir a sua microestrutura real (ver Torquato [2]). Alternativamente, pode gerar-se microestruturas completamente hipotéticas, depois de um esquema de representação ter sido previamente escolhido. Tais microestruturas hipotéticas poderão então ser utilizadas posteriormente em análises microestruturais.

Considere-se um compósito de partículas de duas fases, monodisperso e estatisticamente homogêneo. Para se definir uma amostra microestrutural de partículas, é necessário gerar

um determinado número de partículas no volume da amostra. O algoritmo de geração das partículas utilizado depende das características microestruturais.

Assim, para se gerar uma amostra de uma microestrutura periódica, as partículas são simplesmente colocadas em posições predefinidas com orientações também elas predefinidas no volume da amostra, o que resulta numa célula unitária. Para o caso aleatório, o método mais simples de gerar uma microestrutura consiste em ir adicionando partículas ao volume da amostra, uma a uma de forma completamente aleatória. No caso de se pretender a não-sobreposição de partículas (partículas impenetráveis) é necessário verificar se a partícula interfere com outras partículas previamente geradas. Todavia, não é necessário proceder a qualquer verificação no caso de as partículas poderem interferir.

O algoritmo de geração utilizado poderá apresentar um desempenho algo lento para o caso de partículas impenetráveis, pois muitas vezes é necessário descartar uma microestrutura antes de todas as partículas serem colocadas, pois pode não ser possível encontrar uma posição adequada (vazia) para se colocar uma dada partícula visto que os procedimentos de geração bloqueiam. Neste contexto, tem-se que por vezes pode ser moroso ou mesmo impossível gerar uma microestrutura aleatória para frações de volume elevado.

Capítulo 4

Método dos Elementos Finitos

4.1 Introdução

O aumento da capacidade dos computadores favoreceu o aparecimento de novos métodos de análise e resolução, quase sempre aproximada, de problemas científicos e de engenharia, nomeadamente o Método dos Elementos Finitos (MEF). Este método de análise matemática, no que diz respeito à análise de estruturas, tem aplicação na determinação dos estados complexos de tensão e deformação de componentes de engenharia submetidos a diversos carregamentos mecânicos e condições de fronteira [40, 41]. Para atingir tal objetivo, o MEF transforma o domínio em estudo numa associação de elementos discretos no qual cada um deles é uma estrutura contínua mais simples, capaz de representar o campo do deslocamento no domínio do elemento global. Assim, obtém-se o estado de deformações e, posteriormente, através de relações constitutivas chega-se ao estado de tensões nos elementos. Um outro benefício na aplicação do MEF é a facilidade com que pode ser aplicado para a resolução de problemas bidimensionais e tridimensionais constituídos por vários materiais diferentes e com fronteiras irregulares, [41, 42, 40].

4.2 Discretização Espacial do Problema

O problema de elasticidade linear tridimensional consiste, em termos de notação tensorial, na seguinte formulação

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{em } \Omega \\ \boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{grad}(\mathbf{u}) + [\operatorname{grad}(\mathbf{u})]^T \right] \quad \text{em } \Omega. \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{em } \Gamma_t \\ \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{em } \Gamma_u \end{array} \right. \quad (4.1)$$

Esta formulação, designada por formulação forte, descreve o equilíbrio estático de um corpo sólido linear elástico com base, respetivamente, na equação de equilíbrio, na relação constitutiva, na relação deformação-deslocamentos (linearizada com base na hipótese das pequenas deformações), e nas condições de fronteira natural e essencial [43, 42]. $\operatorname{div}(\cdot)$ e $\operatorname{grad}(\cdot)$ designam os operadores divergência e gradiente, respetivamente. Com base na utilização do princípio dos deslocamentos virtuais é possível obter a formulação fraca a partir da formulação descrita anteriormente. Assim, introduz-se o vetor de deslocamentos virtuais, $\delta \mathbf{u}$, como função de ponderação. Esta corresponde a um campo virtual de deslocamentos, nulo nas fronteiras

com deslocamentos prescritos (Γ_u), ou seja, $\delta \mathbf{u} = 0$ em (Γ_u). Deste modo, efetuando-se o seu produto (tensorial) escalar com a equação de equilíbrio e integrando-se no domínio Ω , obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot [\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b}] \, d\Omega = 0, \quad (4.2)$$

que equivale a

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Omega} \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega. \quad (4.3)$$

Aplicando o teorema da divergência à última parcela do segundo membro da relação anterior, resulta que

$$\int_{\Omega} \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega = \int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (4.4)$$

Por outro lado, sendo $\Gamma_u \cup \Gamma_t = \Gamma$ e $\delta \mathbf{u} = 0$ em Γ_u , obtém-se

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma = \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (4.5)$$

Tendo em conta a condição constitutiva e a condição de fronteira natural, através da substituição das equações 4.4 e 4.2 na equação 4.3, obtém-se

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (4.6)$$

No entanto, tendo em consideração a relação deformação-deslocamentos e a simetria \mathbf{D} , tem-se que

$$\mathbf{D} : \boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{D} : \text{grad}(\mathbf{u}), \quad (4.7)$$

obtendo-se, assim, a equação integral correspondente ao princípio dos deslocamento virtuais para o problema de elasticidade linear e que define a sua formulação fraca como

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{D} : \text{grad}(\mathbf{u}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma, \quad \forall \delta \mathbf{u}, \quad \delta \mathbf{u} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_u. \quad (4.8)$$

O primeiro termo desta relação, conhecida como o Princípio dos Trabalhos Virtuais (PTV), é a energia de deformação virtual total e os restantes membros correspondem ao trabalho virtual realizado pelas forças volúmicas e as forças de superfície, respetivamente. Assim, o Princípio dos Trabalhos Virtuais estabelece que num sistema em equilíbrio estático o trabalho realizado pelas forças internas deve ser igual ao trabalho realizado pelas forças externas [43, 42].

Com a formulação fraca da equação definida, procede-se então à sua discretização espacial por elementos finitos. Restringindo o domínio ao de um elemento finito, pode reescrever-se a equação da formulação fraca na seguinte forma:

$$\int_{\Omega^e} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{D} : \text{grad}(\mathbf{u}) \, d\Omega = \int_{\Omega^e} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_t^e} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (4.9)$$

4.3 Formulação de Elementos Finitos

No método dos elementos finitos o corpo sólido é aproximado pela consideração de que o mesmo é equivalente a um conjunto de elementos finitos discretos agrupados, de forma adequada, pelos pontos nodais localizados nas fronteiras dos mesmos. Desta forma, é possível calcular a solução do problema. Em seguida, ilustra-se o cálculo das matrizes de rigidez elementares e a construção dos sistemas de equações de equilíbrio.

Partindo do Princípio dos Trabalhos Virtuais (equação 4.8) e relacionando o vetor dos deslocamentos virtuais $\delta \mathbf{u}$ com o campo discretizado de deslocamentos virtuais, $\delta \mathbf{a}$, os campos de deslocamentos e de deformações podem ser calculados recorrendo ao campo de deslocamentos virtuais nodais, $\delta \mathbf{a}^e$, como

$$\begin{cases} \delta \mathbf{u}^e = \mathbf{N}^e \delta \mathbf{a}^e \\ \delta \boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{B}^e \delta \mathbf{a}^e \end{cases}, \quad (4.10)$$

em que \mathbf{N}^e é a matriz das funções de forma para o elemento. Assim, pode reescrever-se o trabalho realizado pelas forças internas, por unidade de volume, como

$$\delta W_{\text{int}} = \delta \boldsymbol{\epsilon}^T \boldsymbol{\sigma} = (\delta \mathbf{a}^e)^T (\mathbf{B}^e)^T \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.11)$$

sendo $\boldsymbol{\sigma}$ o vetor de tensão. Relativamente ao trabalho das forças externas, tem-se

$$\delta W_{\text{ext}_\Omega} = (\delta \mathbf{u}^e)^T \mathbf{b} = (\delta \mathbf{a}^e)^T (\mathbf{N}^e)^T \mathbf{b} \quad (4.12)$$

e

$$\delta W_{\text{ext}_\Gamma} = (\delta \mathbf{u}^e)^T \bar{\mathbf{t}} = (\delta \mathbf{a}^e)^T (\mathbf{N}_\Gamma^e)^T \bar{\mathbf{t}}. \quad (4.13)$$

Assim, obtêm-se os valores totais de trabalho integrando as equações 4.11 e 4.12 no volume do elemento, e a equação 4.13 na superfície do elemento, resultando

$$W_{\text{int}} = (\delta \mathbf{a}^e)^T \int_{\Omega^e} (\mathbf{B}^e)^T \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega, \quad (4.14)$$

$$W_{\text{ext}_\Omega} = (\delta \mathbf{a}^e)^T \int_{\Omega^e} (\mathbf{N}^e)^T \mathbf{b} \, d\Omega \quad (4.15)$$

e

$$W_{\text{ext}_\Gamma} = (\delta \mathbf{a}^e)^T \int_{\Gamma_t^e} (\mathbf{N}_\Gamma^e)^T \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma, \quad (4.16)$$

respetivamente. Assim, reescrevendo a equação de equilíbrio estático do PTV, obtêm-se

$$(\delta \mathbf{a}^e)^T \int_{\Omega^e} (\mathbf{B}^e)^T \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = (\delta \mathbf{a}^e)^T \left[\int_{\Omega^e} (\mathbf{N}^e)^T \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_t^e} (\mathbf{N}_\Gamma^e)^T \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma \right]. \quad (4.17)$$

Atendendo à arbitrariedade do campo admissível de deslocamentos virtuais, $\delta \mathbf{a}^e$, a equação de equilíbrio para o elemento finito e corresponde a

$$\mathbf{k}^e \mathbf{d}^e = \mathbf{f}^e, \quad (4.18)$$

em que a matriz de rigidez elementar \mathbf{k}^e corresponde a

$$\mathbf{k}^e = \int_{\Omega^e} (\mathbf{B}^e)^T \mathbf{D} \mathbf{B}^e d\Omega \quad (4.19)$$

e o vetor de forças nodais é definido por

$$\mathbf{f}^e = \int_{\Omega^e} (\mathbf{N}^e)^T \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_t^e} (\mathbf{N}_\Gamma^e)^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma. \quad (4.20)$$

4.4 Sistema Global de Equações

O sistema global de equações resulta da agregação das matrizes de rigidez elementares dos n_e elementos que constituem a malha de elementos finitos, sendo esta operação frequentemente designada como *assemblagem* [44, 42]. Deste modo, constrói-se a matriz rigidez global para todo o domínio do problema. A operação de assemblagem pode simbolicamente ser representada como

$$\mathbf{K} = \sum_i^{n_e} \mathbf{K}^e, \quad (4.21)$$

sendo \mathbf{K} a matriz rigidez global e \mathbf{K}^e as matrizes de rigidez elementares. Este método direto de obtenção da matriz rigidez global é efetuado garantindo-se a coerência dos graus de liberdade. Assim, terminado o processo de assemblagem da matriz rigidez global, procede-se à representação física do comportamento de uma estrutura na forma do sistema global de equações. O sistema resultante pode então ser representado por

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (4.22)$$

em que \mathbf{u} é o vetor dos deslocamentos nodais e \mathbf{f} das forças nodais externas. Realce-se o facto de ser ainda necessário impor as condições de fronteira no sistema global para que este seja determinado.

Capítulo 5

Metodologia de Homogeneização

Em seguida apresenta-se o problema geral de homogeneização para deformações infinitesimais, em que a partir do material homogêneo se determina um material homogêneo de propriedades equivalentes, conforme se ilustra na figura 5.1. São abordados conceitos-chave tais como a identificação de quantidades macroscópicas, a relação entre as médias, os princípios de energia e, por fim, a aplicação de diferentes tipos de condições de fronteira que são usados de forma semelhante em todos os problemas de homogeneização. Este capítulo baseia-se, em grande parte, na obra de Temizer [19].

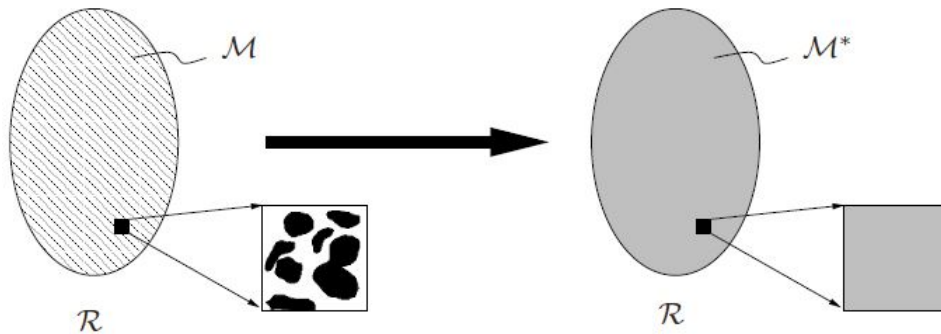


Figura 5.1: Problema da homogeneização: material heterogêneo original da macroestrutura e material homogêneo equivalente [29].

5.1 Problema da Homogeneização

Considere-se um material \mathcal{M} com macroestrutura heterogênea que possui várias fases, $\mathcal{M}^{(\mathcal{I})}$. Neste contexto, tem-se que o problema mecânico geral para este material \mathcal{M} de natureza heterogênea, associado a um domínio \mathcal{R} de fronteira $\partial\mathcal{R}$, corresponde a determinar $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$, tal que

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \rho \mathbf{b} = \rho \ddot{\mathbf{u}} \quad \text{em } \mathcal{R}, \quad (5.1)$$

com condições de fronteira

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{em } \partial\mathcal{R}^u \quad \text{e} \quad \mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{em } \partial\mathcal{R}^t, \quad (5.2)$$

e equação constitutiva

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{X}, \boldsymbol{\epsilon}). \quad (5.3)$$

Devido à presença de heterogeneidades, a densidade, ρ , e a forma explícita da equação constitutiva, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, oscilam de fase para fase, sendo esta última denotada por $\boldsymbol{\sigma}^{(I)}$. Como resultado, os campos de tensão e de deformação são altamente oscilatórios, dificultando bastante a resolução do problema na sua forma original. Por conseguinte, uma forma de se obter uma solução aproximada é utilizar a metodologia de homogeneização para a obtenção de um material homogêneo equivalente \mathcal{M}^* , considerando as mesmas condições de fronteira em \mathcal{M}^* (ver figura 5.1). Neste contexto, o problema mecânico geral para o material \mathcal{M}^* de natureza homogênea, associado a um domínio \mathcal{R} de fronteira $\partial\mathcal{R}$, corresponde a determinar $\mathbf{u}^*(\mathbf{X}, t)$, tal que

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}^*) + \rho^* \mathbf{b} = \rho^* \ddot{\mathbf{u}}^* \quad \text{em } \mathcal{R}, \quad (5.4)$$

com condições de fronteira

$$\mathbf{u}^* = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{em } \partial\mathcal{R}^u \quad \text{e} \quad \mathbf{t}^* = \boldsymbol{\sigma}^* \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{em } \partial\mathcal{R}^t, \quad (5.5)$$

e equação constitutiva

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^*(\boldsymbol{\epsilon}^*). \quad (5.6)$$

Claramente, este problema pode ser resolvido assim que se tenha uma expressão para ρ^* (densidade efetiva) e $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^*$ (equação constitutiva efetiva). Neste contexto, a qualidade com que estes valores efetivos são determinados afeta diretamente a qualidade da aproximação \mathbf{u}^* do campo de deslocamentos exato \mathbf{u} .

5.2 Determinação de Propriedades Efetivas

Numa análise do comportamento mecânico de um material heterogêneo, considerando amostras de microestrutura cada vez maiores de que se extrai uma série de resultados \mathcal{Q} , observa-se que à medida que se aumenta o tamanho da amostra os resultados obtidos se aproximam de um limite ${}^\infty\mathcal{Q}$. Visto \mathcal{Q} depender da morfologia microestrutural de uma amostra particular para amostras de dimensão relativamente pequena, define-se assim um REV como sendo a amostra cuja dimensão é tal que se obtém ${}^\infty\mathcal{Q}$, sendo assim o resultado obtido independente da morfologia particular dessa microestrutura. Nesse caso tem-se que

$$\mathcal{Q}^* = {}^\infty\mathcal{Q}. \quad (5.7)$$

A resposta efetiva não é necessariamente uma propriedade do material que se possa associar ao material efetivo (homogêneo). Num REV, a fração volúmica efetiva de heterogeneidades não corresponde a uma propriedade do material, mas consiste unicamente numa grandeza de caracterização macroscópica que está associada ao material original. Quando um REV com configuração em \mathcal{V} é analisado numa metodologia de homogeneização, o material original, \mathcal{M} , é substituído por um material efetivo homogêneo, \mathcal{M}^* . Este procedimento, representado na figura 5.2, consiste na transição do caso heterogêneo para o caso homogêneo.

Esta transição é efetuada verificando-se dois princípios fundamentais na obtenção das propriedades efetivas: o princípio de conservação de massa, utilizado para se determinar a densidade efetiva, e o princípio de conservação de energia, para se determinar a relação constitutiva efetiva.

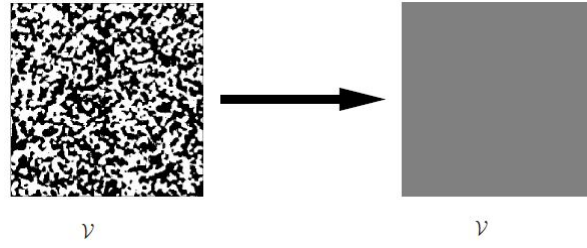


Figura 5.2: Os resultados da análise de um REV permite a substituição do material heterogêneo original \mathcal{M} por um material homogêneo efetivo \mathcal{M}^* [29].

Após o processo de homogeneização, o novo material \mathcal{M}^* com densidade ρ^* substitui o material original com densidade de natureza microestruturalmente oscilatória. Como se referiu, a determinação da densidade efetiva baseia-se no princípio de conservação de massa, pelo que a massa do material homogeneizado em \mathcal{V} deve ser a mesma do material heterogêneo original:

$$\rho^*|\mathcal{V}| = \int_{\mathcal{V}} \rho dv, \quad (5.8)$$

de onde resulta que

$$\rho^* = \langle \rho \rangle. \quad (5.9)$$

Após a obtenção da densidade efetiva, resta determinar a equação constitutiva efetiva, $\hat{\sigma}^*$. Assim, a determinação da forma (explícita) da equação constitutiva efetiva $\hat{\sigma}^*(\epsilon^*)$ pode ser feita com base num ensaio de tração utilizado para se obter o módulo de Young, E , e o coeficiente de Poisson, ν , a partir de uma amostra macroscópica. A variação do comprimento da amostra permite obter a componente de deformação ϵ_{11} e a variação de diâmetro revela que $\epsilon_{12} = \epsilon_{13}$. Em seguida, medindo o valor da força F que é aplicada, calcula-se a componente de tensão usando a área da secção transversal A , tendo-se: $\sigma_{11} = \frac{F}{A}$. Os parâmetros de elasticidade são assim fornecidos pelas equações

$$\sigma_{11} = E \epsilon_{11} \quad \text{e} \quad \epsilon_{11} = -\nu \epsilon_{12}. \quad (5.10)$$

Contudo, a amostra de ensaio possui heterogeneidades incorporadas em diversas escalas, pelo que os campos de tensão e de deformação são altamente oscilatórios. Deste modo, na realidade σ_{11} é uma representação média do valor campo de tensões oscilatório que lhe está subjacente e ϵ_{ij} uma representação média do valor campo de deformações oscilatório. Assim sendo, as relações obtidas para as propriedades dos materiais consistem essencialmente em relações entre as respetivas médias. Este conceito de relação entre valores médios está na base do processo de obtenção da relação constitutiva efetiva.

Assim, com base no ensaio de tração anteriormente referido, obtêm-se os valores de tensão e de deformação efetivos com base na obtenção de valores médios num REV (\mathcal{V}), resultando

$$\sigma^* = \langle \sigma \rangle \quad \text{e} \quad \epsilon^* = \langle \epsilon \rangle. \quad (5.11)$$

Atendendo a que

$$\text{div}(\mathbf{X} \otimes \sigma) = \sigma + \mathbf{X} \otimes \text{div}(\sigma) = \sigma + \mathbf{X} \otimes (\rho \ddot{\mathbf{u}} - \rho \mathbf{b}) \quad (5.12)$$

e, considerando o teorema da divergência, obtêm-se

$$\int_{\mathcal{V}} \operatorname{div}(\mathbf{X} \otimes \boldsymbol{\sigma}) \, dv = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \, da = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{t} \, da . \quad (5.13)$$

Com estes dois resultados, conclui-se que

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{t} \, da + \langle \mathbf{X} \otimes (\rho \mathbf{b} - \rho \ddot{\mathbf{u}}) \rangle . \quad (5.14)$$

Assim, obtém-se o

Teorema de Tensão Média: *para problemas quase-estáticos, a tensão média num corpo é prescrita em termos de dados de tração na fronteira somente na ausência de forças volúmicas:* $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{t} \, da$.

Também a deformação média pode ser expressa da mesma forma. Considerando um material heterogéneo de duas fases e atendendo a que $\mathbf{H} = \nabla \mathbf{u}$ e $\int_{\mathcal{V}} \nabla \mathbf{u} \, dv = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da$, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{H} \rangle &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{H} \, dv = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}^{(1)}} \mathbf{H} \, dv + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}^{(2)}} \mathbf{H} \, dv \\ &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(1)}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(2)}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da \\ &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(1)} \cap \partial \mathcal{V}^{(2)}} \|\mathbf{u}\| \otimes \mathbf{n} \, da . \end{aligned}$$

Na última linha da expressão anterior tem-se que $\|\mathbf{u}\| \stackrel{def}{=} \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2$ corresponde ao salto em \mathbf{u} num ponto em $\partial \mathcal{V}^{(1)} \cap \partial \mathcal{V}^{(2)}$ (as interfaces materiais) com versor normal exterior \mathbf{n} . A decomposição do domínio \mathcal{V} em $\mathcal{V}^{(1)}$ e $\mathcal{V}^{(2)}$ é apresentada na figura 5.3. Empregando este resultado na relação $\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T)$, tem-se que

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \frac{1}{2}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{u}) \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(1)} \cap \partial \mathcal{V}^{(2)}} \frac{1}{2}(\|\mathbf{u}\| \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \|\mathbf{u}\|) \, da , \quad (5.15)$$

obtendo-se o

Teorema de Deformação Média: *Para problemas quase-estáticos, a deformação média num corpo é prescrita em termos de dados de deslocamento na fronteira somente na ausência de quaisquer descontinuidades ($\|\mathbf{u}\| = 0$):* $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \frac{1}{2}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{u}) \, da$.

Refira-se que materiais heterogéneos em que se tem $\|\mathbf{u}\| = 0$, como se considerou, correspondem a materiais em que há uma aderência perfeita entre as várias fases que o constituem.

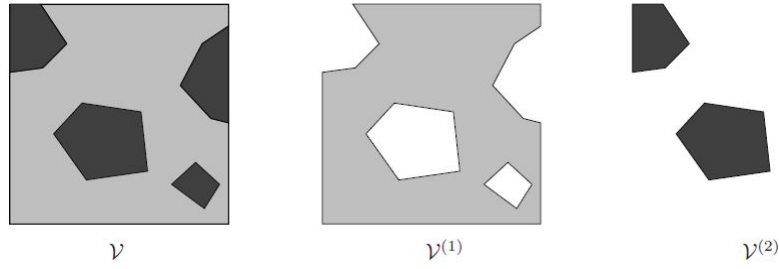


Figura 5.3: Decomposição do domínio \mathcal{V} do REV em duas fases, sendo a interface do material $\partial\mathcal{V}^{(1)} \cap \partial\mathcal{V}^{(2)}$ [29].

Por fim, condições de fronteira (BC¹) específicas têm de ser aplicadas ao REV considerado, de modo a se induzir campos de tensão e de deformação no REV. Para um dado conjunto de BC, as médias proporcionam a resposta do material heterogêneo na macroescala. Uma vez que a tensão e a deformação efetivas correspondem a grandezas de natureza média, define-se a relação constitutiva efetiva como sendo a melhor forma funcional que as relaciona:

$$\boldsymbol{\sigma}^* \xleftrightarrow{\hat{\boldsymbol{\sigma}}^*} \boldsymbol{\epsilon}^* . \quad (5.16)$$

Com estas relações, pode-se então prosseguir para os detalhes do procedimento de determinação de $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^*$. Neste contexto, a consideração de BC adequadas é essencial para o processo de homogeneização. Como foi referido, a determinação da densidade efetiva e da formulação constitutiva efetiva depende dos princípios de conservação de massa e de conservação de energia, respetivamente, que são impostos para se restringir os tipos de BC a serem utilizados. Desde logo se observa que para certas BC o trabalho mecânico total realizado no REV pode ser obtido a partir dos campos de tensão e de deformação microscópicos, como

$$\delta W = \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\epsilon} \, dv . \quad (5.17)$$

Por outro lado, o trabalho mecânico total realizado no REV quando o material heterogêneo original é substituído por um efetivo corresponde a

$$\delta W^* = |\mathcal{V}| \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \delta \boldsymbol{\epsilon}^* . \quad (5.18)$$

Impondo a igualdade dos trabalhos realizados para ambos os tipos de material, obtém-se

$$\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \delta \boldsymbol{\epsilon}^* = \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\epsilon} \rangle . \quad (5.19)$$

Esta expressão corresponde a uma restrição, no sentido em que especifica os tipos de BC que podem ser aplicadas ao REV. No caso de esta restrição ser satisfeita, então também se verifica a relação

$$\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* = \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle , \quad (5.20)$$

que foi introduzida por Hill [1].

De modo a se constatar que o critério energético de Hill não é verificado por qualquer tipo de condições de fronteira, procede-se à decomposição dos campos médios de tensão e

¹Do inglês: *Boundary Conditions*.

de deformação nas suas componentes média e flutuante. A componente flutuante de uma quantidade \mathcal{Q} sobre uma região Ψ corresponde, sendo a sua componente média $\langle \mathcal{Q} \rangle_\Psi$, a

$$\tilde{\mathcal{Q}} = \mathcal{Q} - \langle \mathcal{Q} \rangle_\Psi . \quad (5.21)$$

Deste modo, tem-se

$$\boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \quad , \quad \boldsymbol{\epsilon} = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} , \quad (5.22)$$

resultando do critério energético de Hill em [9]

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \langle (\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot (\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}) \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle + \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle . \end{aligned}$$

Constata-se assim que as BC que verificam o critério energético de Hill são unicamente aquelas para as quais o termo $\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle$ é nulo. Deste modo, com a aplicação de BC que não cumpram este critério não se poderá proceder a um processo de homogeneização fisicamente sustentado.

Assim, o enunciado do problema de homogeneização para o REV corresponde a determinar-se $\mathbf{u}(\mathbf{X})$, de modo que

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \quad \text{em} \quad \mathcal{V} , \quad (5.23)$$

sujeito a condições de fronteira tais que

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle . \quad (5.24)$$

Após a resolução deste problema, considerando que $\boldsymbol{\sigma}^* = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ e $\boldsymbol{\epsilon}^* = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle$, pode proceder-se então à determinação da relação constitutiva efetiva com base na relação entre $\boldsymbol{\sigma}^*$ e $\boldsymbol{\epsilon}^* = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle$.

5.3 Condições de Fronteira para Homogeneização

Em seguida procede-se à abordagem de BC a aplicar no procedimento de homogeneização que satisfaçam o critério energético de Hill. São consideradas BC de três tipos distintos: (i) de tração uniforme (UT²), (ii) de deslocamento linear (LD³) e (iii) periódicas (PR⁴).

Para BC que são controladas pela tensão média, impõe-se

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \boldsymbol{\sigma} , \quad (5.25)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}$ é prescrito. Por outro lado, para BC controladas pela deformação média, impõe-se

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \boldsymbol{\epsilon} , \quad (5.26)$$

em que o gradiente médio dos deslocamentos, $\boldsymbol{\epsilon} \stackrel{def}{=} \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mathcal{H}} + \boldsymbol{\mathcal{H}}^T)$ e $\langle \boldsymbol{H} \rangle = \boldsymbol{\mathcal{H}}$, é prescrito. Qualquer das BC anteriormente mencionadas podem ser impostas, em teoria, com base na aplicação da tensão média ou da deformação média. No entanto, é mais natural impor a deformação

²Do inglês: *Uniform Traction*.

³Do inglês: *Linear Displacement*.

⁴Do inglês: *Periodic*.

média para as condições de fronteira de deslocamento linear e periódicas, e tensão média para condições de fronteira de tração uniforme.

Considerando um material heterogêneo bifásico e atendendo a que a simetria de $\boldsymbol{\sigma}$ implica que $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}$, tem-se, para o critério energético de Hill, que

$$\begin{aligned}
 \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{u} \, dv \\
 &= \int_{\mathcal{V}} (\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{u}) - \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u}) \, dv \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}^{(1)}} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}) \, dv + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}^{(2)}} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{u}) \, dv - \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{u} \, dv \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(1)}} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(2)}} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} (\rho \mathbf{b} - \rho \ddot{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{u} \, dv \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(1)}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(2)}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} (\rho \mathbf{b} - \rho \ddot{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{u} \, dv \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^{(1)} \cap \partial \mathcal{V}^{(2)}} \|\mathbf{u}\| \cdot \mathbf{t} \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} (\rho \mathbf{b} - \rho \ddot{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{u} \, dv,
 \end{aligned}$$

onde, na última linha, \mathbf{t} é a tração em $\partial \mathcal{V}^{(1)}$. Assim, obtém-se o

Teorema de Energia Média: *Em problemas quase-estáticos, a energia média é prescrita em termos de trações e deslocamentos na fronteira do domínio unicamente para materiais heterogêneos que apresentem não só aderência perfeita entre fases ($\|\mathbf{u}\| = 0$) mas também a ausência de forças volúmicas ($\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \, da$).*

Neste contexto, em seguida mostra-se que cada um dos referidos tipos de BC satisfazem o critério energético de Hill.

5.3.1 Condições de Fronteira de Tração Uniforme

As condições de fronteira de tração uniforme (UT-BC) são definidas por

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{n} \quad \text{em } \partial \mathcal{V}, \quad (5.27)$$

em que se exige que $\boldsymbol{\Sigma}$ seja simétrico. Atendendo a que $\int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{n} \, da = |\mathcal{V}| \mathbf{I}$, de acordo com o teorema da tensão média tem-se que

$$\begin{aligned}
 \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{t} \, da \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{n} \, da = \left(\frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{n} \, da \right) \boldsymbol{\sigma}^T = \boldsymbol{\sigma}.
 \end{aligned}$$

Além disso, de acordo com o teorema de energia média, tem-se que a condição

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \, da \\ &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{n} \, da = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{n}) \, da = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle\end{aligned}$$

terá de ser verificada de modo a que o critério energético de Hill seja satisfeito para UT-BC. Neste contexto, como nenhuma restrição de deslocamento é prescrita em $\partial\mathcal{V}$, sendo assim permitido o movimento de corpo rígido, é necessário proceder, aquando da modelação baseada no MEF, à sua supressão com base na imposição de apoios em pontos de $\partial\mathcal{V}$.

5.3.2 Condições de Fronteira de Deslocamento Linear

As condições de fronteira de deslocamento linear (LD-BC) são definidas por

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\mathcal{H}} \mathbf{X} \quad \text{em } \partial\mathcal{V}. \quad (5.28)$$

De acordo com o teorema da deformação média, tem-se que

$$\langle \boldsymbol{\mathcal{H}} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \boldsymbol{\mathcal{H}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{n} \, da = \boldsymbol{\mathcal{H}} \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{X} \otimes \mathbf{n} \, dv = \boldsymbol{\mathcal{H}}, \quad (5.29)$$

pelo que

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mathcal{H}} + \boldsymbol{\mathcal{H}}^T) = \boldsymbol{\epsilon}. \quad (5.30)$$

Considerando este resultado no teorema da energia média, resulta que

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \, da = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}} \mathbf{X} \, da \\ &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} (\mathbf{X} \otimes \mathbf{t}) \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}^T \, da = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}^T = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle,\end{aligned}$$

pelo que o critério energético de Hill é satisfeito para LD-BC.

Na figura 5.4 ilustra-se o efeito de aplicação de UT-BC e LD-BC em em \mathcal{V} , verificando-se que uma UT-BC resulta num deslocamento que não é linearmente distribuído em $\partial\mathcal{V}$, enquanto que uma LD-BC resulta numa distribuição não-uniforme de tração em $\partial\mathcal{V}$.

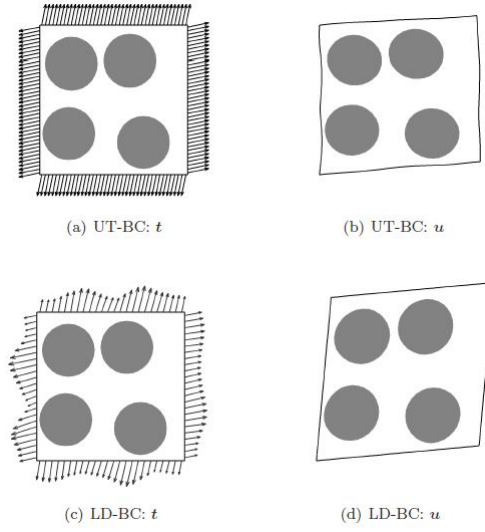


Figura 5.4: Efeito de aplicação de UT-BC e LD-BC [29].

5.3.3 Condições de Fronteira Periódicas

Com o intuito de impor PR-BC, o limite do REV é decomposto em duas partes opostas, $\partial\mathcal{V}^+$ e $\partial\mathcal{V}^-$, tal que $\partial\mathcal{V} = \partial\mathcal{V}^+ \cup \partial\mathcal{V}^-$ e $\partial\mathcal{V}^+ \cap \partial\mathcal{V}^- = \emptyset$. Cada ponto \mathbf{X}^+ de $\partial\mathcal{V}^+$ encontra-se associado a um único ponto \mathbf{X}^- de $\partial\mathcal{V}^-$ e os versores normais externos nestes limites satisfazem $\mathbf{n}^- = -\mathbf{n}^+$. Neste contexto, as PR-BC são definidas por

$$\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = \mathcal{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) \quad \text{e} \quad \mathbf{t}^+ = -\mathbf{t}^-, \quad \text{em} \quad \partial\mathcal{V}. \quad (5.31)$$

Atendendo a que

$$\begin{aligned} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da &= \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathbf{u}^+ \otimes \mathbf{n}^+ \, da + \int_{\partial\mathcal{V}^-} \mathbf{u}^- \otimes \mathbf{n}^- \, da \\ &= \int_{\partial\mathcal{V}^+} (\mathbf{u}^- + \mathcal{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-)) \otimes \mathbf{n}^+ \, da - \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathbf{u}^- \otimes \mathbf{n}^+ \, da \\ &= \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathcal{H}\mathbf{X}^+ \otimes \mathbf{n}^+ \, da - \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathcal{H}\mathbf{X}^- \otimes \mathbf{n}^+ \, da \\ &= \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathcal{H}\mathbf{X}^+ \otimes \mathbf{n}^+ \, da + \int_{\partial\mathcal{V}^-} \mathcal{H}\mathbf{X}^- \otimes \mathbf{n}^- \, da \\ &= \int_{\partial\mathcal{V}} \mathcal{H}\mathbf{X} \otimes \mathbf{n} \, da = \mathcal{H}|\mathcal{V}|, \end{aligned}$$

do teorema da deformação média resulta que

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial\mathcal{V}} \frac{1}{2} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{u}) \, da = \frac{1}{2} (\mathcal{H} + \mathcal{H}^T) = \boldsymbol{\epsilon}, \quad (5.32)$$

pelo que a deformação média para uma PR-BC corresponde a $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \boldsymbol{\epsilon}$. Além disso, utilizando o teorema de energia média, obtém-se

$$\begin{aligned}
 \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \, da \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^+} \mathbf{t}^+ \cdot \mathbf{u}^+ \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^-} \mathbf{t}^- \cdot \mathbf{u}^- \, da \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^+} \mathbf{t}^+ \cdot (\mathbf{u}^- + \mathcal{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-)) \, da - \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^+} \mathbf{t}^+ \cdot \mathbf{u}^- \, da \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^+} \mathbf{t}^+ \cdot \mathcal{H}\mathbf{X}^+ \, da - \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^+} \mathbf{t}^+ \cdot \mathcal{H}\mathbf{X}^- \, da \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^+} \mathbf{t}^+ \cdot \mathcal{H}\mathbf{X}^+ \, da + \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}^-} \mathbf{t}^- \cdot \mathcal{H}\mathbf{X}^- \, da \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{t} \cdot \mathcal{H}\mathbf{X} \, da = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathcal{H}^T = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle,
 \end{aligned}$$

pelo que o critério energético de Hill é também verificado para PR-BC.

Na figura 5.5. são ilustrados os campos de tensão e de deformação resultantes da aplicação de BC. Verifica-se que quando são usadas PR-BC, os REV deformados encaixam-se perfeitamente devido à periodicidade do campo de deslocamentos (ao contrário do que ocorre com as UT-BC). Além disso, o campo de tração satisfaz o princípio da ação-reação devido à sua antiperiodicidade (ao contrário do que ocorre com as LD-BC). Como resultado, se o REV está em equilíbrio, então os vários REV da estrutura periódica também se encontrarão em equilíbrio. Deste modo, os campos de tensão e deformação são também periódicos, bastando analisar uma RUC (como REV) quando PR-BC são utilizadas. Sendo a tensão média e a deformação média a correspondente à de uma RUC, não se verificarão os efeitos do tamanho, podendo a resposta efetiva de uma microestrutura periódica ser extraída com base num único REV correspondente a uma RUC e aplicando-lhe condições de fronteira periódicas (PR-BC).

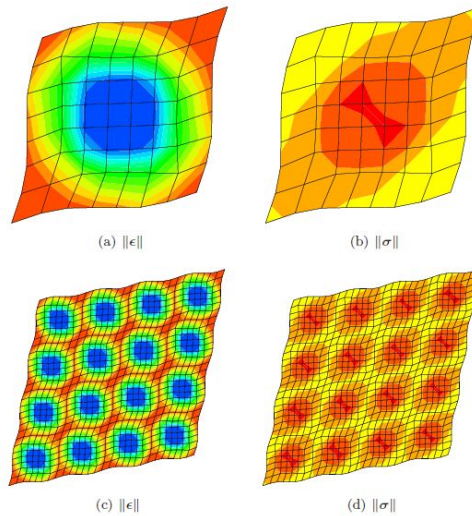


Figura 5.5: Campos de tensão e deformação resultantes da aplicação de PR-BC [29].

5.4 Imposição de Condições de Fronteira

Como foi referido, os três tipos de BC discutidos, nomeadamente LD-BC, UT-BC e PR-BC, podem ser impostos com base na aplicação da tensão média ou da deformação média. Para se indicar que um determinado tipo de BC é controlado pela tensão média ou pela deformação média, vai utilizar-se, no seguimento do texto, o prefixo Σ e \mathcal{E} , respetivamente.

Em simulações com o MEF usualmente impõe-se \mathcal{E} -LD-BC em vez de Σ -LD-BC, já que uma condição de fronteira de deslocamento $\mathbf{u} = \mathcal{H}\mathbf{X}$ pode ser facilmente prescrita num nó de superfície com posição \mathbf{X} , sendo a deformação média na amostra dada automaticamente por $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \boldsymbol{\epsilon}$. Por outro lado, é natural impor-se Σ -UT-BC em vez de \mathcal{E} -UT-BC, já que se pode facilmente impor trações superficiais $\mathbf{t} = \Sigma \mathbf{n}$ num ponto de integração de um elemento superficial com versor normal exterior \mathbf{n} , sendo assim a tensão média dada automaticamente por $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \boldsymbol{\sigma}$. Por fim, PR-BC são também controladas pela deformação média, como se verá no seguimento do texto. Assim, de entre os tipos de BC referidos, apenas o tipo UT-BC é naturalmente controlado pela tensão média.

5.4.1 Condições de Fronteira \mathcal{E} -LD-BC

A formulação variacional para o problema de um REV sujeito a \mathcal{E} -LD-BC corresponde à formulação fraca

$$\delta U = \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv = 0, \quad (5.33)$$

sujeita a $\mathbf{u} = \mathcal{H}\mathbf{X}$ em $\partial\mathcal{V}$. Com o intuito de implementar \mathcal{E} -LD-BC, considera-se o potencial

$$C \stackrel{def}{=} \frac{1}{2} \int_{\partial\mathcal{V}} \mathcal{K}(\mathcal{H}\mathbf{X} - \mathbf{u}) \cdot (\mathcal{H}\mathbf{X} - \mathbf{u}) \, da, \quad (5.34)$$

cuja variação corresponde a

$$\delta C = - \int_{\partial\mathcal{V}} (\mathcal{H}\mathbf{X} - \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} \, dv, \quad (5.35)$$

em que \mathcal{K} é idealmente um valor elevado cuja magnitude depende do problema. Assim, em vez da forma variacional original $\delta U = 0$, resolve-se

$$\delta V = \delta U + \delta C = \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv - \int_{\partial\mathcal{V}} \mathcal{K}(\mathcal{H}\mathbf{X} - \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} \, dv = 0 \quad (5.36)$$

sem a imposição de quaisquer BC adicionais. A solução para $\delta V = 0$ corresponde a uma aproximação para a solução do problema original ($\delta U = 0$) numa formulação baseada na aplicação do método da penalidade, correspondendo \mathcal{K} ao denominado parâmetro de penalidade. Note-se que quando a restrição é exatamente satisfeita ($C = 0$) resulta que $\mathbf{u} = \mathcal{H}\mathbf{X}$ em $\partial\mathcal{V}$, pelo que $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{2}(\mathcal{H} + \mathcal{H}^T) = \boldsymbol{\epsilon}$ é imposto.

Comparando esta formulação variacional constrangida com a forma variacional de um problema com uma BC de tração imposta, que corresponde a

$$\delta U = \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv - \int_{\partial\mathcal{V}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, da = 0, \quad (5.37)$$

pode identificar-se o termo $\mathcal{K}(\mathbf{H}\mathbf{X} - \mathbf{u})$ como sendo a tração que deve ser aplicada na fronteira para se impor LD-BC:

$$\mathcal{K}(\mathbf{H}\mathbf{X} - \mathbf{u}) = \mathbf{t} \quad \text{em } \partial\mathcal{V}. \quad (5.38)$$

5.4.2 Condições de Fronteira \mathcal{E} -PR-BC

A formulação variacional para o problema de um REV sujeito a \mathcal{E} -LD-BC corresponde à formulação fraca

$$\delta U = \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv = 0, \quad (5.39)$$

sujeito a $\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = \mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-)$ e $\mathbf{t}^+ - \mathbf{t}^- = 0$ em $\partial\mathcal{V}$. Estas BC podem ser implementadas definindo o potencial

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathcal{K}[\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] \cdot [\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] \, da, \quad (5.40)$$

cuja variação corresponde a

$$\begin{aligned} \delta C &= \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathcal{K}[\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] \cdot (-\delta \mathbf{u}^+ + \delta \mathbf{u}^-) \, da \\ &= - \int_{\partial\mathcal{V}^+} \mathcal{K}[\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] \cdot \delta \mathbf{u}^+ \, da \\ &\quad + \int_{\partial\mathcal{V}^-} \mathcal{K}[\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] \cdot \delta \mathbf{u}^- \, da, \end{aligned}$$

sendo a formulação variacional constrangida $\delta V = \delta U + \delta C = 0$ usada para se obter uma aproximação do problema original sem a imposição de quaisquer BC adicionais. Note-se que quando a restrição é exatamente satisfeita ($C = 0$) resulta que $\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = \mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-)$ em $\partial\mathcal{V}$.

Comparando esta formulação variacional constrangida com a forma variacional de um problema com uma BC de tração imposta, que corresponde a

$$\delta U = \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv - \int_{\partial\mathcal{V}^+} \bar{\mathbf{t}}^+ \cdot \delta \mathbf{u}^+ \, da - \int_{\partial\mathcal{V}^-} \bar{\mathbf{t}}^- \cdot \delta \mathbf{u}^- \, da = 0, \quad (5.41)$$

verifica-se que as condições

$$\begin{aligned} \mathcal{K}[\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] &= \mathbf{t}^+ \quad \text{em } \partial\mathcal{V}^+ \quad \text{e} \\ -\mathcal{K}[\mathbf{H}(\mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^-) - (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-)] &= \mathbf{t}^- \quad \text{em } \partial\mathcal{V}^- \end{aligned}$$

correspondem a trações superficiais que impõem a periodicidade de u , pelo que a condição de antiperiodicidade $\mathbf{t}^+ = \mathbf{t}^-$ é automaticamente satisfeita.

5.4.3 Condições de Fronteira \mathcal{E} -UT-BC

A formulação variacional para o problema de um REV sujeito a Σ -UT-BC corresponde à formulação fraca

$$\delta U = \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv - \int_{\partial \mathcal{V}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, da = 0, \quad (5.42)$$

em que $\bar{\mathbf{t}} = \Sigma \mathbf{n}$. Uma versão modificação da forma variacional pode ser obtida excluindo as BC de tração, resultando

$$\delta \bar{U} \stackrel{def}{=} \int_{\mathcal{V}} \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dv. \quad (5.43)$$

Então, com o intuito de implementar \mathcal{E} -UT-BC, considera-se o potencial

$$C = \frac{\mathcal{K}}{2} \left(\boldsymbol{\mathcal{H}} - \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da \right) \cdot \left(\boldsymbol{\mathcal{H}} - \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da \right), \quad (5.44)$$

cuja variação corresponde a

$$\delta C = -\Sigma \cdot \int_{\partial \mathcal{V}} \delta \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da, \quad (5.45)$$

sendo

$$\Sigma \stackrel{def}{=} \frac{\mathcal{K}}{|\mathcal{V}|} \left(\boldsymbol{\mathcal{H}} - \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} \, da \right), \quad (5.46)$$

pelo que se obtém

$$\delta C = - \int_{\partial \mathcal{V}} \Sigma \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} \, da. \quad (5.47)$$

Assim, em vez da forma variacional original $\delta U = 0$, resolve-se $\delta V = \delta \bar{U} + \delta C = 0$ para uma aproximação ao problema original sem quaisquer BC adicionais. Quando a restrição é exatamente satisfeita ($C = 0$) resulta que $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mathcal{H}} + \boldsymbol{\mathcal{H}}^T) = \boldsymbol{\epsilon}$, pelo que a deformação média é imposta em \mathcal{V} . Além disso, comparando o problema $\delta V = 0$ com o problema $\delta U = 0$ original com \mathcal{E} -UT-BC, verifica-se que $\mathbf{t} = \Sigma \mathbf{n}$ é imposto em $\partial \mathcal{V}$, sendo Σ definido pela equação 5.46, isto é, as UT-BC são aplicadas com um Σ desconhecido a fim de se impor uma determinada $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \boldsymbol{\epsilon}$.

Por fim, na figura 5.6 apresentam-se os três tipos de BC controladas por $\boldsymbol{\epsilon}$ considerados, para o mesmo \mathcal{H} . Consta-se que para PR-BC (linha vermelha) resulta uma variação periódica dos deslocamentos de fronteira sobrepostos aos resultados para LD-BC (linha preta), sendo os resultados para UT-BC (linha azul) independentes dos anteriores [29].

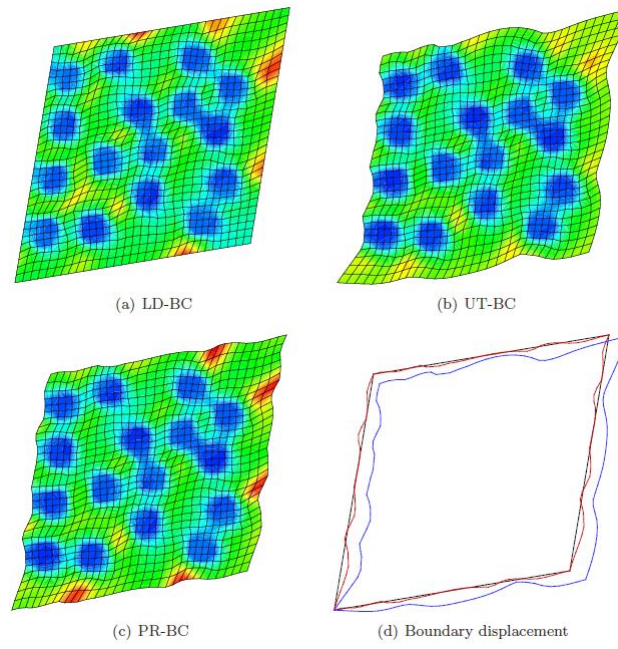


Figura 5.6: Campos de deslocamento resultantes da aplicação de BC controladas por ϵ [29].

Capítulo 6

Ensaio e Resultados Numéricos

6.1 Ensaio Numéricos Efetuados

Neste capítulo apresentam-se todos os resultados relativos aos ensaios de análises efetuados neste trabalho. Exceto o último ensaio, em que são usadas as propriedades específicas de um material para a análise do módulo de Young e do coeficiente de Poisson, todos os outros ensaios foram realizados com as mesmas propriedades. Todos eles usando uma matriz com módulo de compressibilidade $\kappa = 4$ e módulo de corte $\mu = 1$, as propriedades do reforço, não são implementadas, são sim calculadas pelo algoritmo a partir da razão de propriedades, r , que nos ensaios foi de $r = 10$. Assim, em primeiro lugar são apresentados os resultados referentes à geração e à discretização da microestrutura, nomeadamente:

- Variação da fração de volume, com o aumento do número de partículas;
- Comparação do comportamento da microestrutura considerando partículas com interseção e sem interseção com os limites da amostra;
- Análise e comparação de microestruturas aleatórias e periódicas;
- Diferentes morfologias para as partículas que podem ser usadas nas microestruturas.

Em seguida são efetuadas análises relativas às diferentes condições de fronteira consideradas: (i) ϵ -LD-BC (de deslocamento linear), (ii) \mathcal{E} -UT-BC (de tração uniforme) e (iii) ϵ -Pr-BC (periódica), para a homogeneização, sendo analisados os seguintes aspetos:

- Refinamento da malha a usar. Antes de se iniciar qualquer ensaio, determinou-se, quando é que a malha se encontrava refinada, ou seja, quando é que os valores, nomeadamente da tensão e da energia, por mais refinada que estivesse a malha se mantinham constantes;
- Variação da energia média, para diferentes condições de fronteira;
- Variação da tensão normal e da tensão de corte, para diferentes condições de fronteira;
- Análise da variação da energia e da tensão para diferentes razões $r = \frac{E_{\text{reforço}}}{E_{\text{matriz}}}$;
- Variação da fração de volume para inclusões rígidas ($r = 500$) e comparação dos valores com o que o material de matriz por si só demonstra.

Outra análise baseia-se nos coeficientes de Lamé, nomeadamente o módulo de compressibilidade (κ) e o módulo de corte (μ), procedendo-se à:

- Determinação das relações entre os coeficientes e as diferentes condições de fronteira;
- Análise da variação do erro (inconsistência isotrópica). Comparação do erro com o erro médio, erro este que mede o desvio médio de um conjunto de amostras. Comparação do erro médio para partículas com e sem permissão de interseção com os limites da amostra;
- Variação de κ e de μ com o aumento do número de partículas, usando duas condições de fronteira: uma controlada pela deformação (ϵ -LD-BC — deslocamento linear) e outra controlada pela tensão (σ -UT-BC — tração uniforme). Neste ensaio compara-se também a influência do refinamento da malha, para estes coeficientes.

No último capítulo de análise de resultados, aplicam-se métodos numéricos de homogeneização para determinar:

- Propriedades efetivas mecânicas de partículas esféricas. Estes resultados são ainda complementados com os limites superiores e inferiores associados aos modelos micromecânicos de Voigt-Reuss [48, 49] e de Hashin-Shtrikman [50].

Os ensaios foram efetuados com base no código de elementos finitos HETERO2D [29], usando elementos finitos isoparamétricos quadrangulares de 4 nós (isto é, bilineares). Inicialmente, este código permitiu a criação e discretização de uma microestrutura. Nomeadamente, a fração de volume máxima a ser ocupada pelas partículas, a sua morfologia, podendo ser usadas partículas esféricas, quadradas e de várias outras formas, e ainda definir se a microestrutura a ser analisada é periódica ou aleatória. Outro aspeto muito importante é o refinamento da malha, permitindo o código escolher o número de elementos por lado da microestrutura.

Numa fase seguinte, o código permitiu a aplicação de diferentes condições de fronteira: (i) controladas pela deformação: \mathcal{E} -UT-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -PR-BC e (ii) controladas pela tensão: Σ -UT-BC. Como em elasticidade linear se obtêm resultados semelhantes para a aplicação de \mathcal{E} -UT-BC e Σ -UT-BC, apenas foram aplicadas condições de fronteira controladas pela deformação. Nesta fase, as condições de fronteira foram utilizadas para se avaliar a variação da tensão e da energia de deformação, por exemplo, com o aumento do número de partículas.

Após os ensaios relativos à análise do efeito das condições de fronteira, o código permitiu, com um compósito de microestrutura previamente definida, a obtenção da variação do módulo de compressibilidade e do módulo de corte com a condição de fronteira aplicada, tendo sido estes valores depois convertidos no módulo de elasticidade, E , e no coeficiente de Poisson, ν .

No Apêndice A apresenta-se uma breve descrição da constituição deste código e dos parâmetros utilizados nos ensaios numéricos.

6.2 Ensaaios de Geração e Discretização da Microestrutura

Nos ensaios de geração e discretização da microestrutura o utilizador possui 3 graus de liberdade: o número de partículas, a fração volúmica e a definição da malha, a qual poderá ser mais ou menos refinada. A área do quadrado associado à definição da célula microestrutural é dependente do tamanho das partículas, ou seja, ao ser definida a sua área o programa define o tamanho das partículas, ou o inverso.

6.2.1 Análise da variação da fração volúmica com o número de partículas

Nesta análise optou-se por uma microestrutura não-periódica, permitindo-se a interseção das partículas com a fronteira da amostra. Na figura 6.1 apresenta-se dois exemplos da execução do algoritmo. A figura 6.1a apresenta uma célula com 4 partículas e a figura 6.1b uma célula com 1024 partículas. Neste ensaio manteve-se o refinamento da malha igual para todos os casos ($NX = NY = 100$), e cinco valores de fração volúmica de entrada máxima de 0,2, 0,3, 0,4, 0,5 e 0,6 (VOLFRAC). Selecionou-se dez números de partículas diferentes, realizou-se apenas um teste para cada fração volúmica, conforme se apresenta na tabela 6.1, e com o algoritmo chegou-se aos valores apresentados no gráfico da figura 6.2.

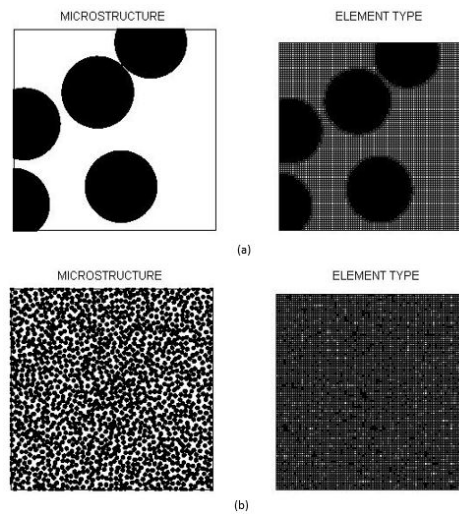


Figura 6.1: Microestruturas geradas com: (a) 4 partículas e (b) 2048 partículas, $NX=NY=100$.

Tabela 6.1: Valores da fração volúmica obtidos em função de VOLFRAC, $NX=NY=100$.

N_p	Volfrac=0,20	Volfrac=0,30	Volfrac=0,40	Volfrac=0,50	Volfrac=0,60
4	0,149	0,216	0,287	0,352	0,454
8	0,177	0,263	0,315	0,407	0,452
16	0,176	0,269	0,344	0,419	0,507
32	0,185	0,271	0,36	0,451	0,498
64	0,188	0,282	0,368	0,456	0,539
128	0,194	0,292	0,382	0,467	0,55
256	0,195	0,291	0,388	0,478	-
512	0,198	0,295	0,392	0,484	-
1024	0,198	0,297	0,395	0,495	-
2048	0,181	0,296	0,397	-	-

De notar que à medida que se aumenta o número de partículas, o valor da fração de volume aumenta acentuadamente no início, até que começa a haver uma saturação. Por outro lado, para valores de VOLFRAC elevados, os testes com um elevado número de partículas não são realizados, ou melhor, o algoritmo não consegue concluir o teste. Isto deve-se ao facto de que por mais que o tamanho da amostra aumente, o algoritmo é incapaz de ocupar o volume com as partículas pretendido.

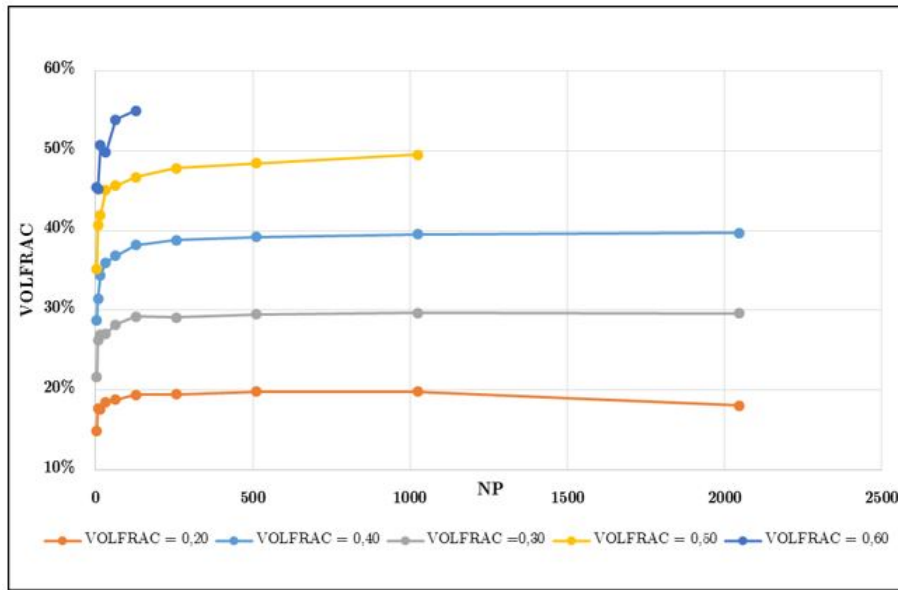


Figura 6.2: Variação do valor de fração de volume (VOLFRAC) obtido com o número de partículas, para a realização de apenas um teste, $NX=NY=100$.

Constata-se ainda que as curvas apresentadas na figura 6.2 apresentam algumas oscilações, o que se pode explicar pelo facto de o algoritmo possui algumas condições de aleatoriedade, nomeadamente o facto de as partículas poderem intersestar a fronteira da amostra. Outro facto a notar é que para valores elevados de VOLFRAC, nomeadamente 0,50 e 0,60, o algoritmo é incapaz de gerar um elevado número de partículas (NP). Assim, procurou-se uma forma de obter um gráfico mais correto. Realizou-se 100 testes para os primeiros seis valores do número de partículas, 10 para os dois seguintes e 5 para os últimos dois valores. Com todos estes testes construiu-se um gráfico de dispersão para cada valor de fração volúmica para se encontrar uma melhor aproximação do algoritmo, gráficos estes que estão apresentados nas figuras 6.3 a 6.7.

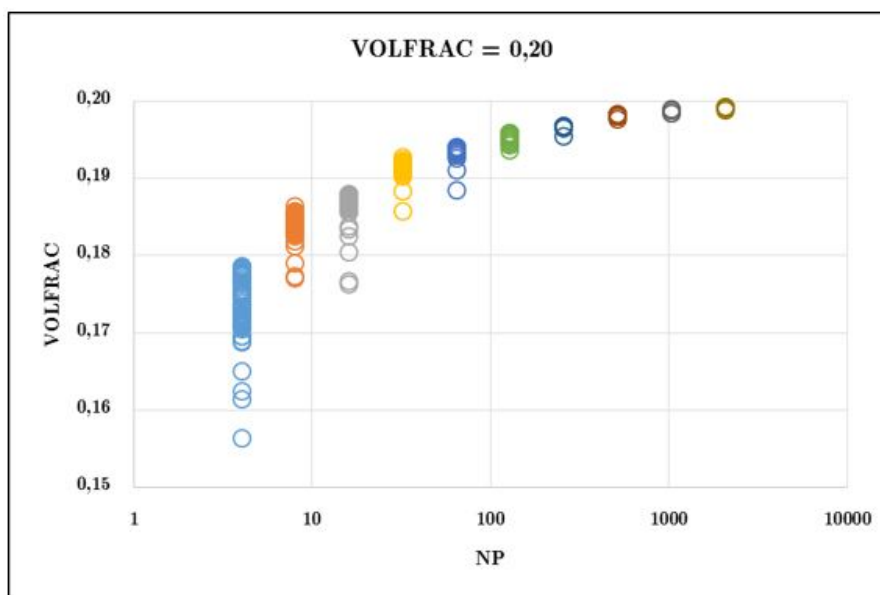


Figura 6.3: Valores obtidos de VOLFRAC = 0,20, para vários valores de NP.

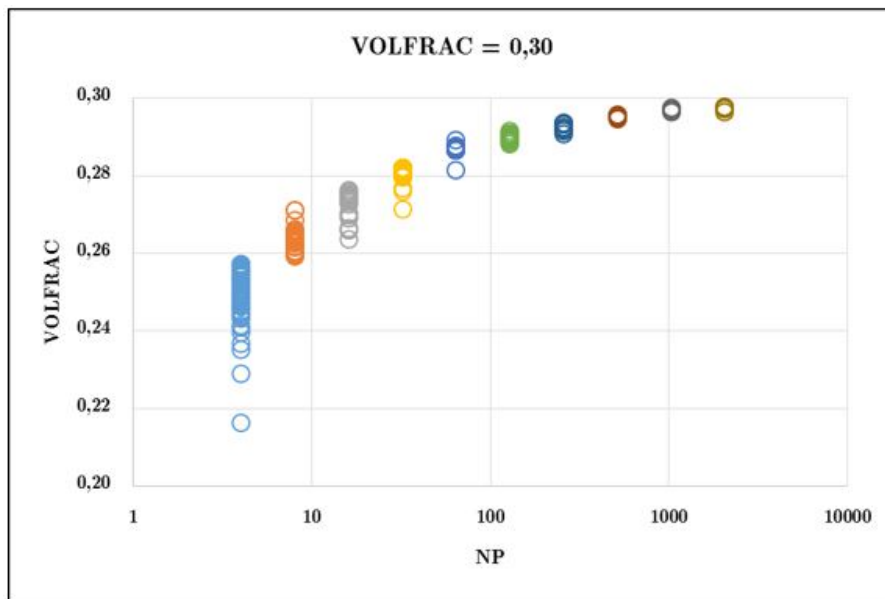


Figura 6.4: Valores obtidos de VOLFRAC = 0,30, para vários valores de NP.

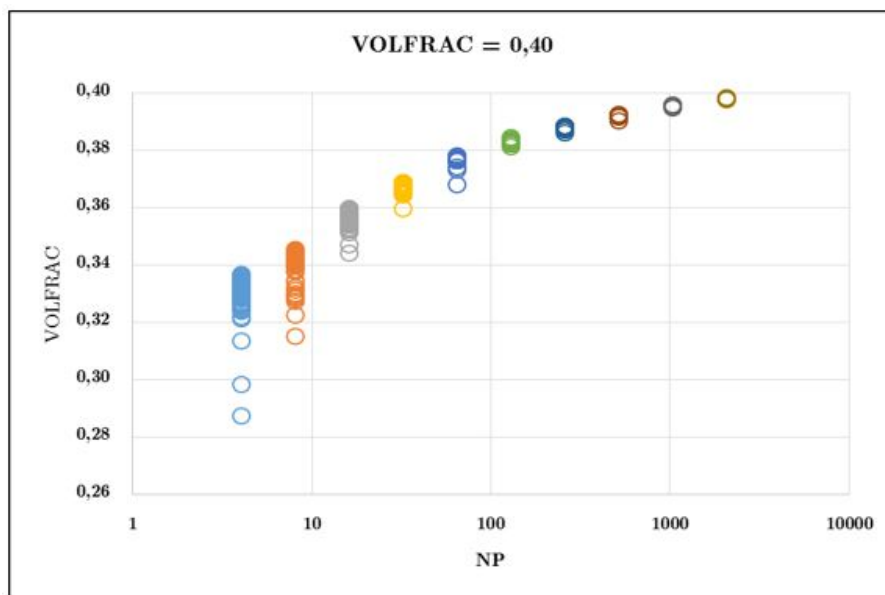


Figura 6.5: Valores obtidos de VOLFRAC = 0,40, para vários valores de NP.

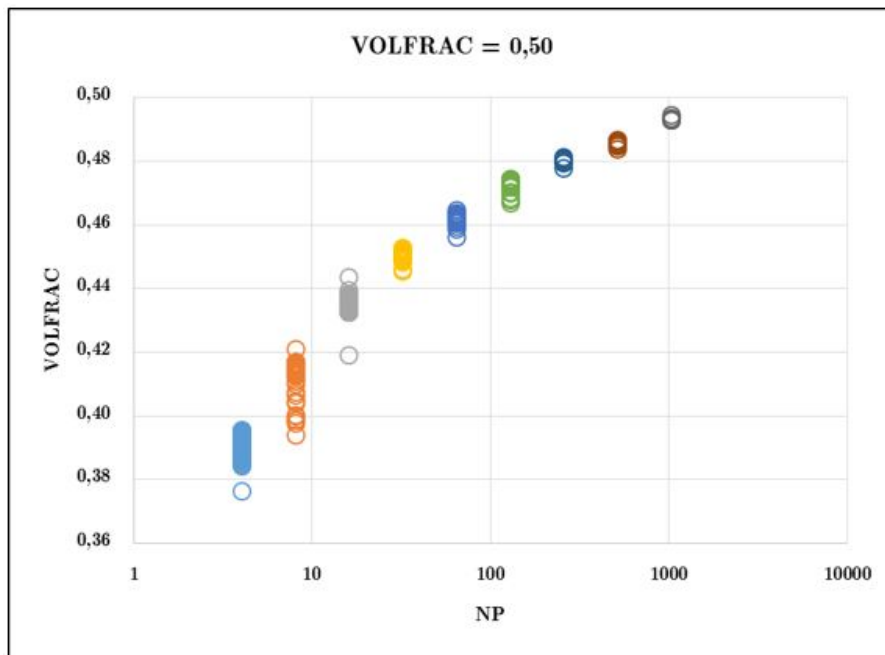


Figura 6.6: Valores obtidos de VOLFRAC = 0,50, para vários valores de NP.

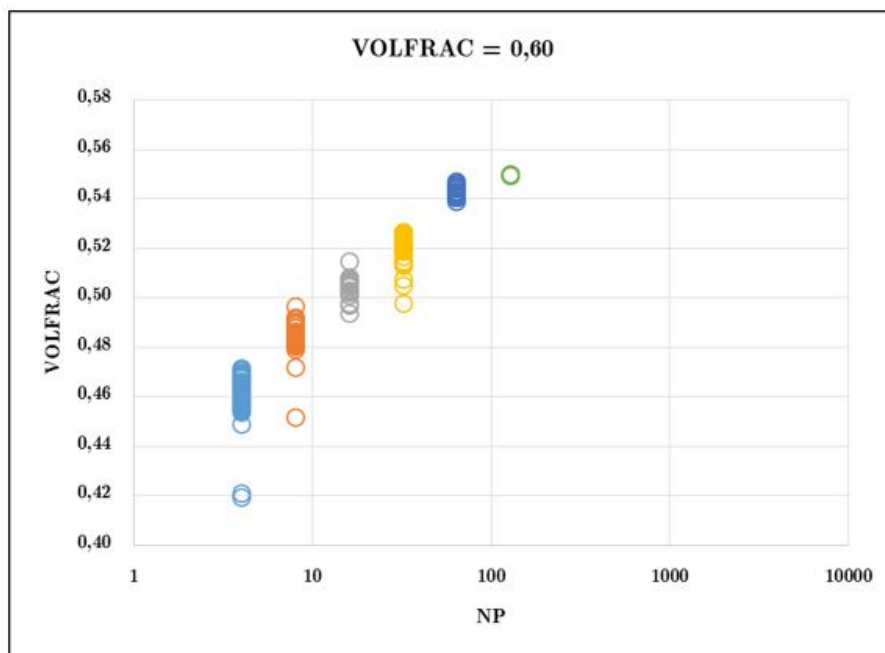


Figura 6.7: Valores obtidos de VOLFRAC = 0,60, para vários valores de NP.

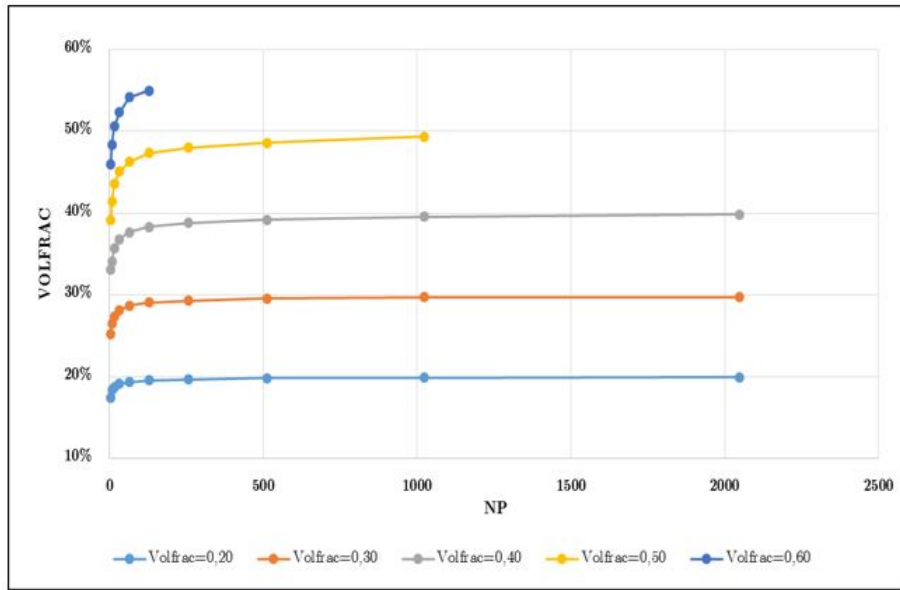


Figura 6.8: Variação do valor de fração de volume (VOLFRAC) obtido, para diferentes números de partículas, usando os valores médios obtidos, para valores de VOLFRAC de 10%, 20%, 30%, 40%, 50% e 60%, $NX=NY=100$.

Verifica-se que à medida que se aumenta o número de partículas, o valor de VOLFRAC se aproxima do valor de entrada predefinido. Por outro lado, quanto maior é o número de partículas, menos dispersão os valores apresentam. Com estes novos valores obteve-se uma média para cada número de partículas, considerando cada fração volúmica, e por conseguinte construiu-se o gráfico apresentado na figura 6.8. Constata-se que a consideração dos valores médios, visto que se trata de um maior número de ensaios para cada valor, as curvas apresentam menores oscilações.

6.2.2 Análise do Efeito da Permissão ou Não de Interseção com a Fronteira

Nesta análise adotou-se uma microestrutura não-periódica para a execução dos testes numéricos, visto que o algoritmo não permite a interseção de partículas com os limites da fronteira da célula no caso de estruturas periódicas. Utilizou-se sempre o mesmo número de elementos finitos ($NX = NY = 100$), bem como o número de partículas ($NP = 25$). No caso de permissão de interseção foi já verificado no teste anterior que, com o aumento do número de partículas se consegue atingir o valor de VOLFRAC desejado. No entanto, caso da não-permissão de interseção, ilustrado na figura 6.9a, obteve-se sempre um valor igual ao valor máximo predefinido (VOLFRAC predefinido = 0,50 e VOLFRAC obtido = 0,50), ao contrário do caso da não-permissão de interseção, ilustrado na figura 6.9b, em que o valor obtido foi sempre inferior ao valor máximo predefinido (VOLFRAC predefinido = 0,50 e VOLFRAC obtido = 0,42). Este facto pode ser explicado pelo algoritmo colocar de forma aleatória as partículas na microestrutura, sendo que quando elas saem fora dos limites, a fração de volume por elas ocupado é menor.

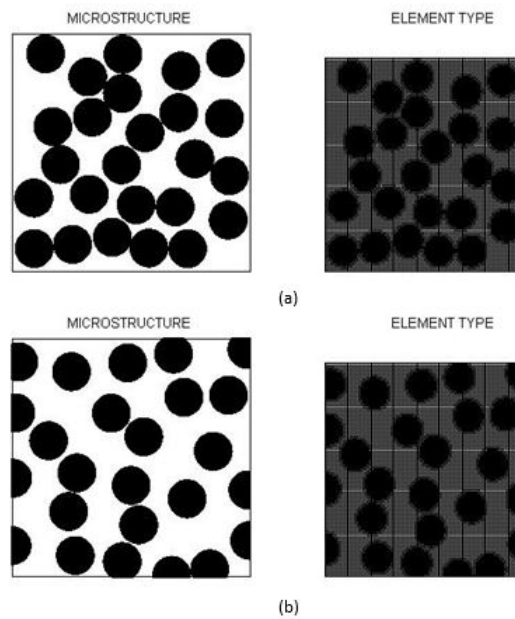


Figura 6.9: Microestrutura com partículas (a) com permissão e (b) sem permissão de interseção da fronteira, com $NP=25$ e $NX=NY=100$.

Atendendo a que para os casos sem permissão de interseção o VOLFRAC de predefinido se revelou sempre igual ao obtido, determinou-se a fração volúmica máxima que o algoritmo consegue atingir para diferentes números de partículas. Os resultados obtidos estão representados na tabela 6.2 e representados graficamente na figura 6.10, onde é possível verificar que à medida que se aumenta o número de partículas, o valor de fração volúmica máxima vai decrescendo.

Tabela 6.2: Valores da fração volúmica máxima obtidos, para partículas sem permissão de interseção.

NP	VOLFRAC
10	0,55
25	0,53
50	0,52
100	0,50
250	0,49
500	0,48

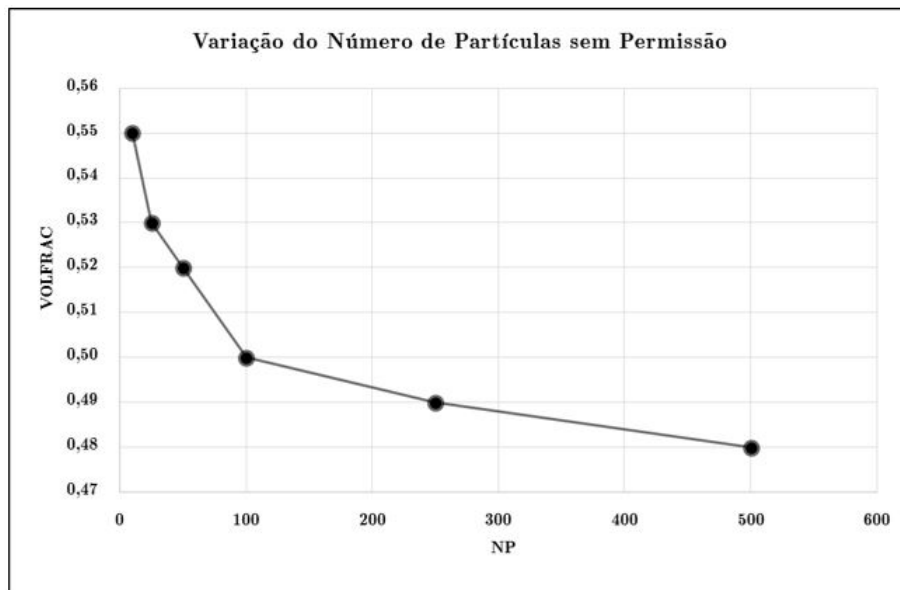


Figura 6.10: Valor máximo de fração de volume obtido, para determinados números de partículas sem permissão de interseção.

6.2.3 Análise da Aleatoriedade ou da Periodicidade Microestrutural

Um método para se classificar uma microestrutura é identificar se ela apresenta aleatoriedade ou periodicidade. Nos testes desta análise utilizou-se o mesmo número de partículas ($NP = 49$) e a mesma malha de elementos finitos ($NX = NY = 100$). Optou-se ainda por partículas esféricas sem permissão de interseção com os limites da célula microestrutural. Na figura 6.11a apresenta-se uma microestrutura periódica e na figura 6.11b uma microestrutura aleatória.

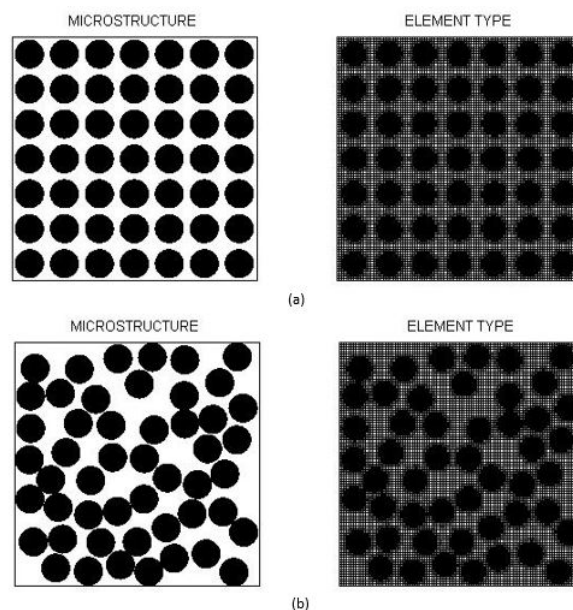


Figura 6.11: Microestruturas (a) periódica e (b) aleatória, ambas com uma malha de $NX=NY=100$ e com $NP=49$.

No primeiro caso, em que a microestrutura apresenta periodicidade, o algoritmo conseguiu atingir um VOLFRAC de 0,50, verificando-se neste caso que o valor de saída é sempre inferior ao de entrada (VOLFRAC predefinido = 0,52 e VOLFRAC obtido = 0,50). Este facto pode ser explicado pelo algoritmo adequar o diâmetro das partículas para que estas respeitem a periodicidade, havendo assim um constrangimento na disposição das partículas. Para o segundo caso, em que existe aleatoriedade, a fração de volume máxima atingida foi de 0,52, e em todos os casos de estudo a fração de volume de entrada foi sempre igual à de saída (VOLFRAC predefinido = 0,52, VOLFRAC obtido = 0,50).

6.2.4 Análise da Influência da Morfologia das Partículas

Na geração de uma microestrutura é possível criar partículas com diferentes morfologias, conforme se ilustra na figura 6.12. Na realização desta análise considerou-se três morfologias diferentes: (i) partículas esféricas, (ii) partículas quadradas e (iii) partículas em cruz. Para as partículas esféricas impondo uma fração volúmica de 0,50, foi possível obter uma microestrutura periódica com esse valor. No entanto, nos outros casos isso não se verificou. Para as partículas quadradas apenas se atingiu uma fração de volume de 0,30, enquanto que no caso das partículas em cruz esse valor não foi além dos 0,10. Isto deve-se ao facto do algoritmo utilizar uma esfera delimitadora para verificar, por exemplo, a penetração entre as partículas ou se as partículas estão dentro ou fora dos limites. Assim, verificou-se que todas as frações volúmicas realizáveis para as morfologias não-esféricas são menores do que para esferas.

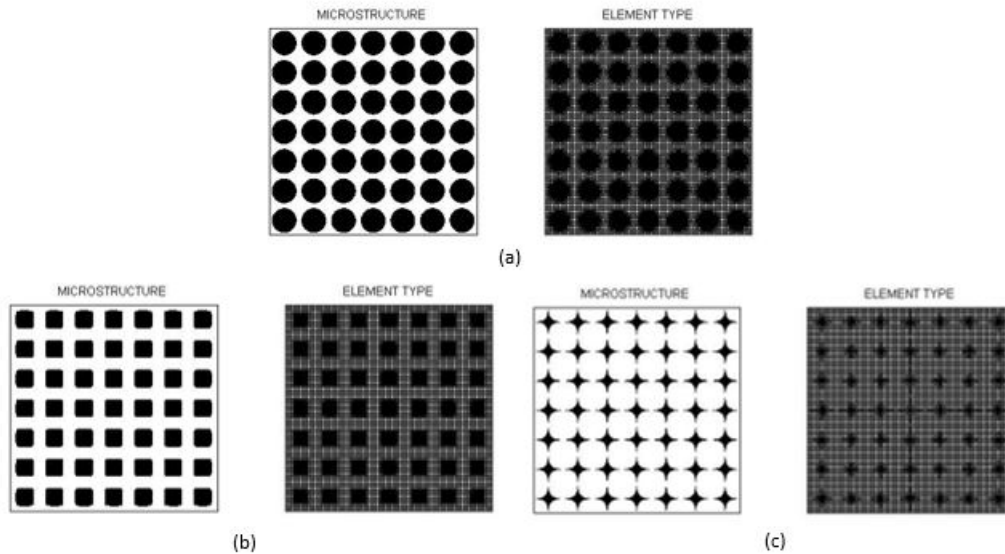


Figura 6.12: Diferentes morfologias para as partículas, para uma microestrutura periódica, NP=49 e VOLFRAC de entrada = 50%.

6.3 Ensaio de Homogeneização

6.3.1 Estudo de convergência: Refinamento da Malha

Para a realização dos testes associados com os ensaios de homogeneização, inicialmente é necessário um estudo de convergência da malha a usar, em particular no que concerne ao refinamento da mesma. Para isso optou-se por uma microestrutura periódica com apenas uma partícula, e variou-se o número de elementos da malha. Escolheu-se ainda a condição de

fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, de modo a excluir a aleatoriedade no estudo. Obteve-se o valor da tensão efetiva ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$) para cada malha até ao ponto em que o seu valor estabilizava, ou seja, por mais refinada que a malha ficasse sucessivamente, os valores em questão mantinham-se praticamente constantes, obtendo-se os valores apresentados na tabela 6.3, cujo comportamento pode ser observado no gráfico da figura 6.13.

Tabela 6.3: Valores obtidos no estudo de convergência.

NX=NY	$(\sigma_{xx}) \times 10^{-3}$
5	2,037
10	1,533
15	1,425
20	1,419
40	1,333
50	1,365
75	1,354
100	1,353
200	1,350

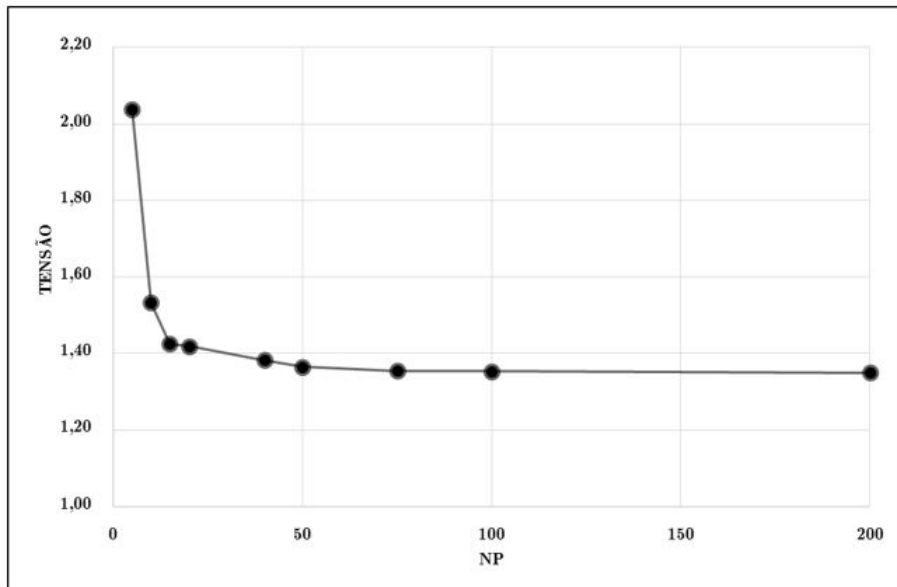


Figura 6.13: Representação gráfica dos valores obtidos no estudo de convergência, para um número de partículas $NP = 1$.

Com base nestes resultados calculou-se o erro relativo e para os valores de $NX = NY = 75$ e $NX = NY = 50$ obteve-se o erro relativo

$$\left| \frac{\sigma_{xx(50)} - \sigma_{xx(75)}}{\sigma_{xx(75)}} \right| \times 100 = 0,8\% , \quad (6.1)$$

pelo que, sendo inferior a 1%, se considerou a malha associada a $NX = NY = 50$ como a malha admissível.

Nas figuras 6.14 e 6.15 é possível ver o efeito de refinamento da malha. Na figura 6.14 apresenta-se uma malha não-refinada composta por apenas 5 elementos, em que o tipo de elemento não se aproxima da morfologia original da partícula, pelo que os resultados não são os corretos. Por outro lado, na figura 6.15 apresenta-se a malha admissível, composta por 50 elementos, muito mais refinada e que nos proporciona resultados mais precisos.

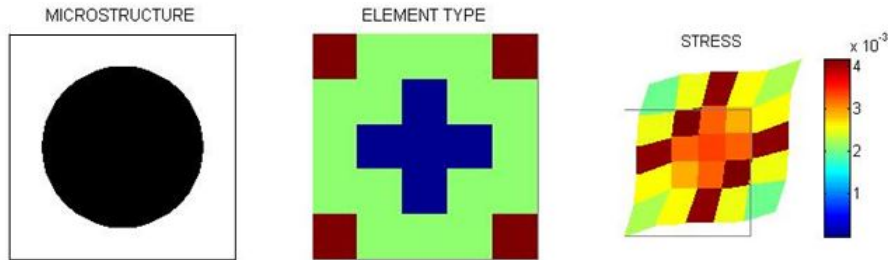


Figura 6.14: Malha não-refinada, composta por $NX = NY = 5$.

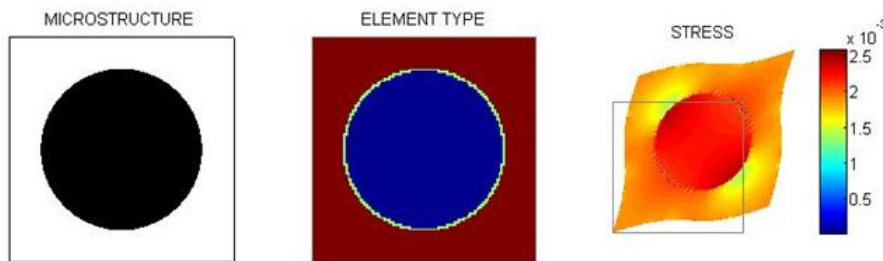


Figura 6.15: Malha admissível, composta por $NX = NY = 50$.

6.3.2 Análise da Energia Média para Diferentes Condições de Fronteira

A fim de analisar a variação da energia para diferentes condições de fronteira, selecionou-se inicialmente uma microestrutura periódica para que não exista nenhum efeito de aleatoriedade. Depois, para comparar, realizou-se um estudo para microestruturas não-periódicas. Assim, usando como base para uma partícula $NX = NY = 50$ elementos para a malha, número encontrado no estudo de convergência da malha, calculou-se a energia para três condições de fronteira: \mathcal{E} -LD-BC, \mathcal{E} -UT-BC e \mathcal{E} -Pr-BC, aumentando sucessivamente o número de partículas. Para que a microestrutura seja sempre periódica, à medida que se aumenta o número de partículas aumentou-se também o número de elementos da malha. Assim, por exemplo, para $NP = 4$ o número de elementos é de $NX = NY = 100$, sendo para $NP = 9$ de $NX = NY = 150$ elementos, e assim sucessivamente até $NP = 36$ com um número de elementos de $NX = NY = 300$, cujos resultados se encontram na figura 6.16. Para o caso aleatório, usou-se o mesmo método, mudando apenas no algoritmo o facto de a microestrutura não ser periódica, encontrando-se os resultados obtidos apresentados na figura 6.17.

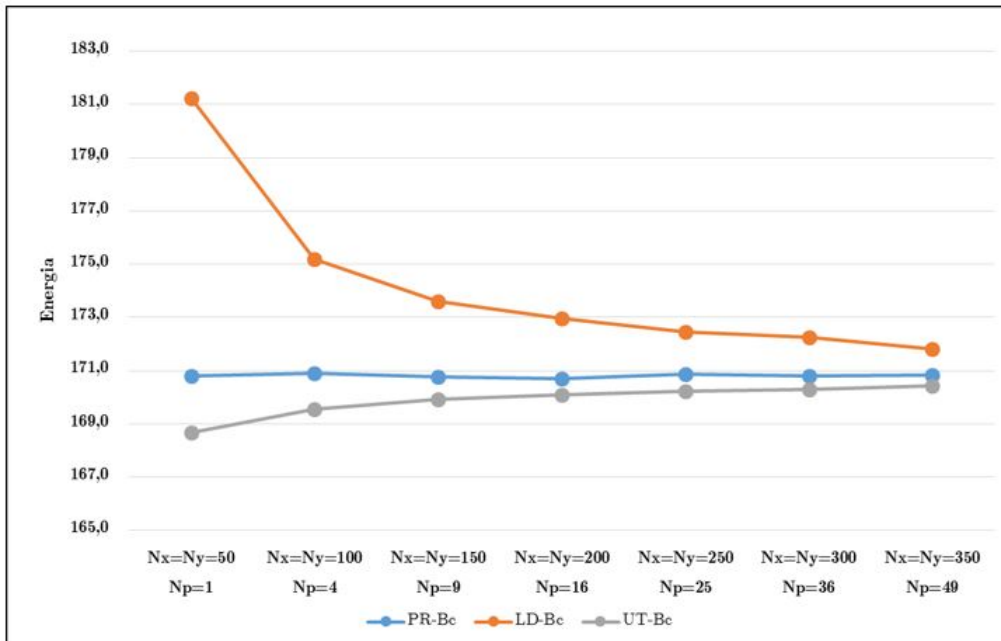


Figura 6.16: Variação da energia média, para uma microestrutura periódica, com o número de partículas.

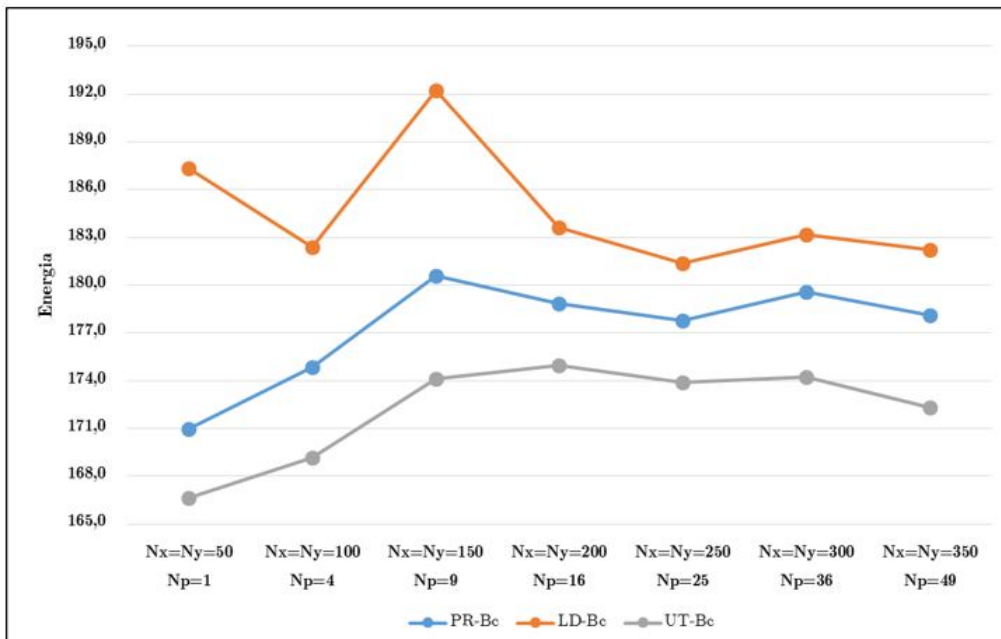


Figura 6.17: Variação da energia média, para uma microestrutura não-periódica, com o número de partículas.

Constata-se que a natureza periódica da microestrutura elimina todos os fenômenos oscilatórios, o que pode ser explicado pela ausência de efeitos de aleatoriedade. No entanto, observa-se claramente que, enquanto \mathcal{E} -Pr-BC dá resultados independentes do tamanho da amostra, \mathcal{E} -LD-BC sobrestima a energia, e, por outro, lado \mathcal{E} -UT-BC subestima a energia para uma dada deformação macroscópica de uma amostra. No entanto, os valores de \mathcal{E} -LD-

-BC e \mathcal{E} -UT-BC aproximam-se do valor de \mathcal{E} -Pr-BC à medida que aumentamos o tamanho da amostra. Isto é expectável, visto que usando BC que satisfazem o critério de energia, todos devem convergir para a mesma energia, porque um material linearmente elástico só pode ter uma energia associada a uma dada deformação macroscópica. Para o caso aleatório, conseguimos retirar as mesmas ilações, existindo apenas oscilações devidas ao facto de o compósito não ser periódico.

Por fim, na figura 6.18 pode ver-se o perfil energético da microestrutura periódica, para condições de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC, sendo também apresentados os resultados para uma célula não-periódica.

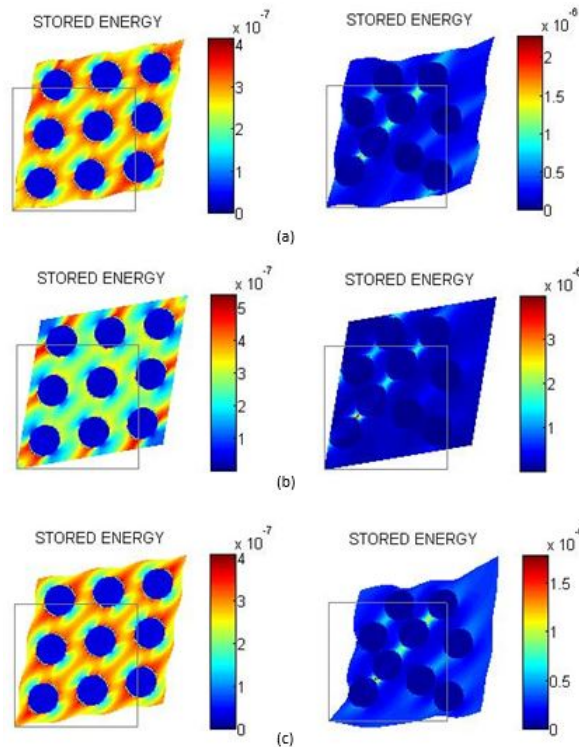


Figura 6.18: Perfis de energia obtidos numa microestrutura periódica (esquerda) e não-periódica (direita), para condições de fronteira (a) \mathcal{E} -Pr-BC, (b) \mathcal{E} -LD-BC e (c) \mathcal{E} -UT-BC. Ambas com NP=9 e NX=NY=150.

Na figura 6.18, é possível observar-se as diferentes deformações, devido à imposição de diferentes condições de fronteira, bem como a diferença entre as duas microestruturas, periódicas e aleatórias. No caso das figuras à esquerda, com periodicidade, as partículas revelam claramente uma distribuição e orientação exatamente iguais, enquanto que no caso à direita, são dispostas de forma completamente aleatória.

6.3.3 Análise da Tensão Média para Diferentes Condições de Fronteira

Na análise da tensão média para diferentes condições de fronteiras, usou-se exatamente o mesmo método que na análise anterior. Selecionou-se como base para NP = 1 o valor de NX = NY = 50, obtido no estudo de convergência da malha, e em seguida foi-se aumentando o número de partículas e o número de elementos da malha como foi efetuado anteriormente. Tal como para a energia, a tensão média para a condição de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC é independente

do tamanho da amostra, como é possível observar-se na figura 6.19.

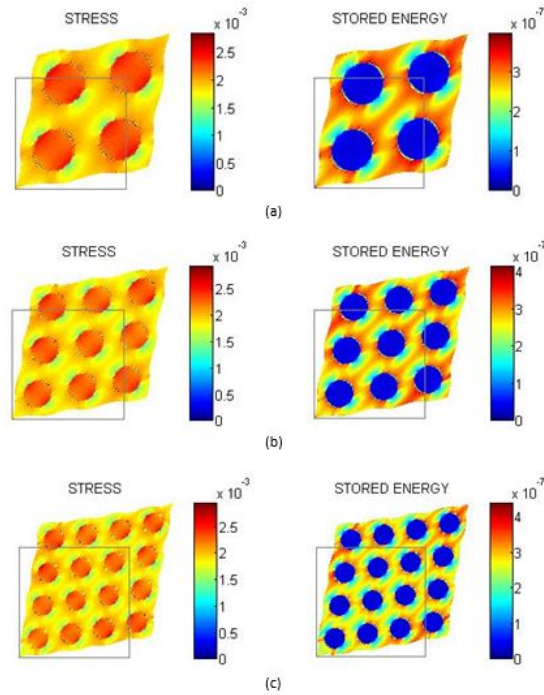


Figura 6.19: Perfis de tensão obtidos numa microestrutura periódica, para a condição de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC. (a) NP=4 e NX=NY=100, (b) NP=9 e NX=NY=150, (c) NP=16 e NX=NY=200.

Na figura 6.19, é possível verificar-se que à medida que se aumenta o número de partículas, o número de elementos por lado na malha, acompanha esse aumento, de modo a que para qualquer número de partículas a malha esteja sempre refinada. E mais uma vez se verifica as diferentes deformações, para as diferentes condições de fronteira aplicadas.

Posteriormente, realizaram-se duas análises, uma referente às tensões $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, cujos resultados são apresentados na figura 6.20, e outro referente às tensões $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, cujos resultados são apresentados na figura 6.21. Tal como ocorre na variação da energia para as diferentes condições de fronteira, também na tensão se observa que quando se aplica a condição de fronteira \mathcal{E} -LD-BC, a tensão diminui com o aumento do tamanho da amostra, e quando se aplica condição de fronteira \mathcal{E} -UT-BC, a tensão aumenta com o aumento do tamanho da amostra.

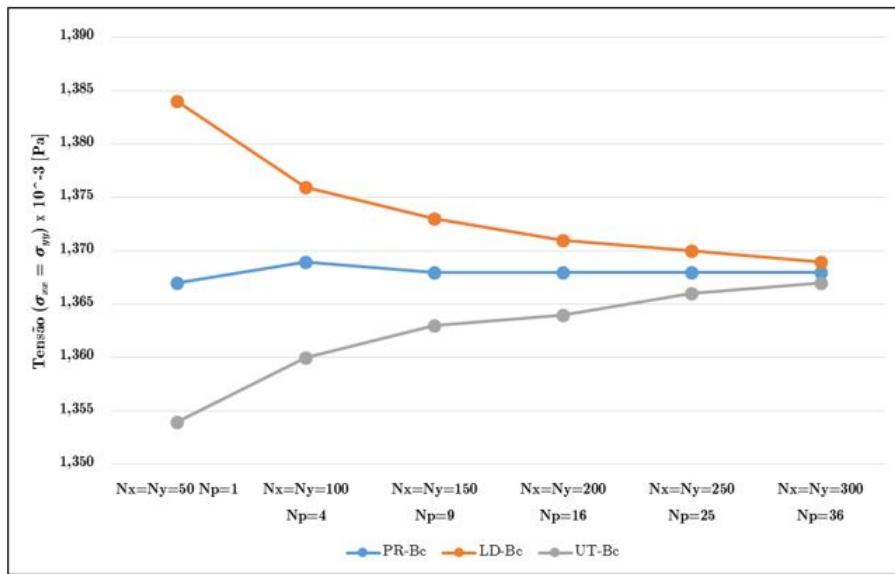


Figura 6.20: Variação da tensão $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, com o número de partículas.

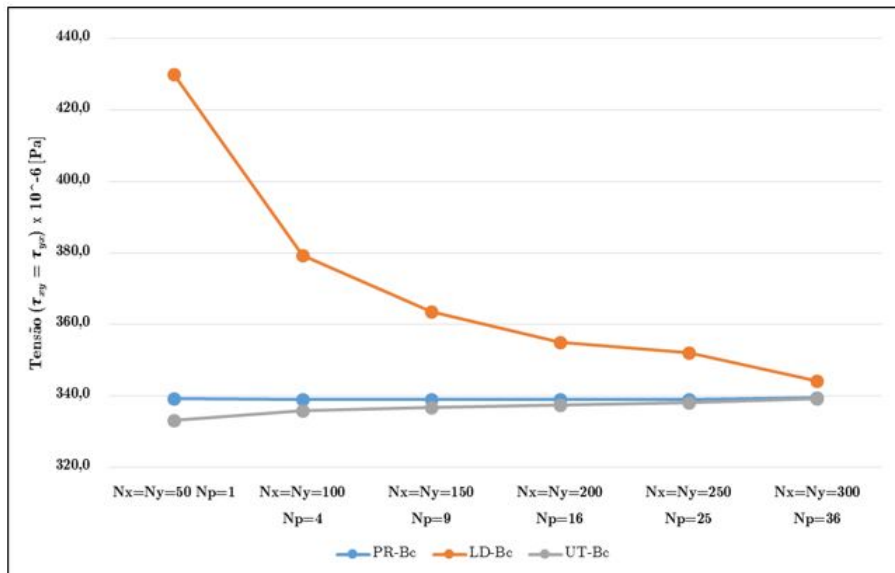


Figura 6.21: Variação da tensão $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, com o número de partículas.

Por fim, na figura 6.22 podem ser observados os perfis de tensão e de energia da microestrutura periódica, para condições de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC.

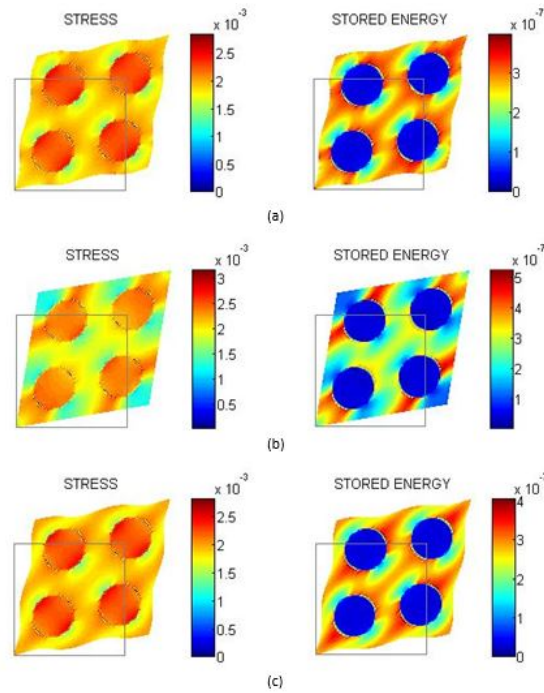


Figura 6.22: Perfis de tensão obtidos para uma amostra com 4 partículas, para condições de fronteira (a) \mathcal{E} -Pr-BC, (b) \mathcal{E} -LD-BC, (c) \mathcal{E} -UT-BC. Ambas com NP=4 e NX=NY=100.

6.3.4 Análise do Efeito da Razão de Propriedades

Na análise do efeito da razão de propriedades considerou-se o quociente dos módulos de Young do reforço e da matriz:

$$r = \frac{E_{\text{reforço}}}{E_{\text{matriz}}}. \quad (6.2)$$

Pretende-se determinar qual a diferença entre situações de grandes e de pequenos valores desta razão, para uma microestrutura periódica. Assim, considera-se uma microestrutura com 16 partículas e uma malha com 200 elementos.

Os resultados obtidos são:

- Para $r = 500$

$$\sigma = \begin{bmatrix} 1,502 \times 10^{-3} & 280,362 \times 10^{-6} \\ 280,362 \times 10^{-6} & 1,502 \times 10^{-3} \end{bmatrix}$$

$$E = 752,208 \times 10^{-9}$$

- Para $r = 1000$

$$\sigma = \begin{bmatrix} 1,459 \times 10^{-3} & 267,709 \times 10^{-6} \\ 267,709 \times 10^{-6} & 1,459 \times 10^{-3} \end{bmatrix}$$

$$E = 757,079 \times 10^{-9}$$

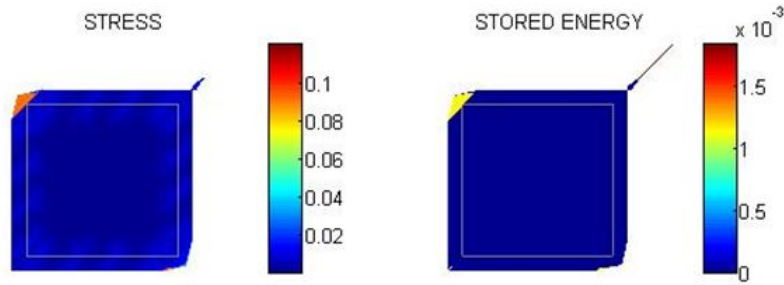


Figura 6.23: Variação da tensão e da energia média, para $r = 500$.

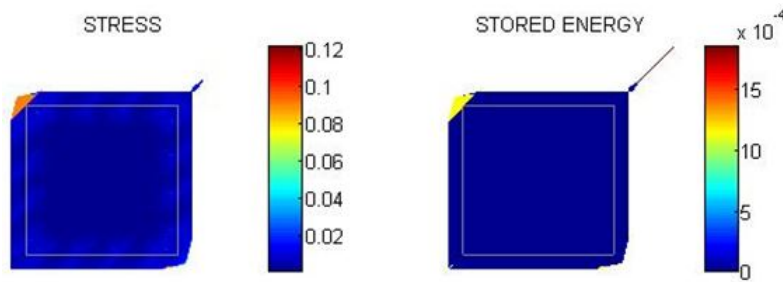


Figura 6.24: Variação da tensão e da energia média, para $r = 1000$.

Atenda-se a que para grandes razões (por exemplo, 1000, como se ilustra na figura 6.24), os resultados médios saturam, ou seja, mesmo que as partículas sejam praticamente rígidas, o compósito exibe elasticidade considerável devido ao comportamento da matriz. Por outro lado, para razões muito pequenas, (por exemplo, 0,05 ou mesmo 0,001, como se ilustra nas figuras 6.25 e 6.26, respetivamente), os resultados convergem para os que seriam os resultados de uma microestrutura porosa, o que equivale a ter-se partículas muito flexíveis embebidas num meio rígido.

- Para $r = 0,05$

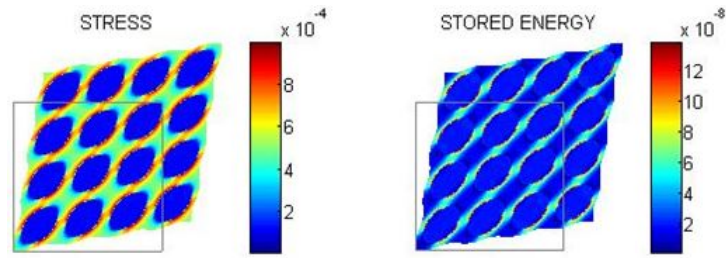
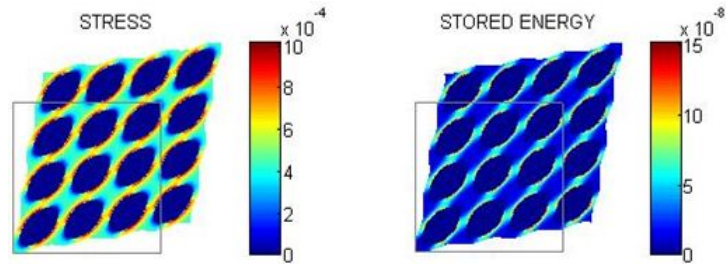
$$\sigma = \begin{bmatrix} 0,241 \times 10^{-3} & 56,510 \times 10^{-6} \\ 56,510 \times 10^{-6} & 0,241 \times 10^{-3} \end{bmatrix}$$

$$E = 29,840 \times 10^{-9}$$

- Para $r = 0,001$

$$\sigma = \begin{bmatrix} 0,182 \times 10^{-3} & 40,388 \times 10^{-6} \\ 40,388 \times 10^{-6} & 0,182 \times 10^{-3} \end{bmatrix}$$

$$E = 22,369 \times 10^{-9}$$

Figura 6.25: Variação da tensão e energia média, para $r = 0,05$.Figura 6.26: Variação da tensão e energia média, para $r = 0,001$.

6.3.5 Análise da Fração Volúmica de Inclusões Rígidas

Neste ensaio procede-se à análise do efeito da fração volúmica de inclusões rígidas em termos da variação de tensão e de energia que os compostos demonstram, e posteriormente compara-se com o que o material de matriz por si só demonstraria. Para isso utiliza-se uma microestrutura periódica e impõe-se a condição de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC. A microestrutura escolhida é constituída por 16 partículas e a malha composta por 200 elementos. Varia-se então a fração volúmica entre 0,20 e 0,60. Nas figuras 6.27 e 6.28 pode observar-se a variação da tensão e da energia, respetivamente, com a fração volúmica do reforço.

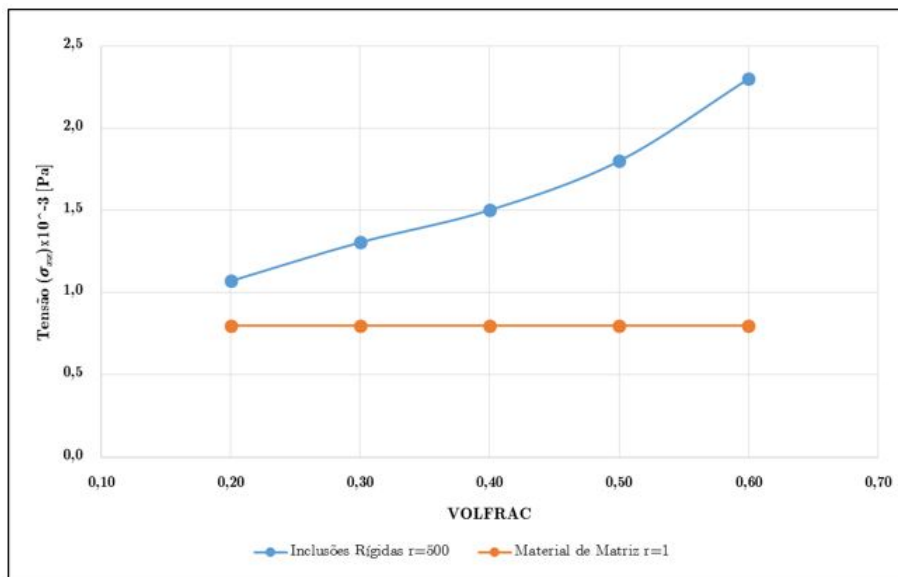


Figura 6.27: Variação da tensão, comparando $r = 1$ (material da matriz) e $r = 500$ (material com inclusões rígidas), com a fração volúmica.

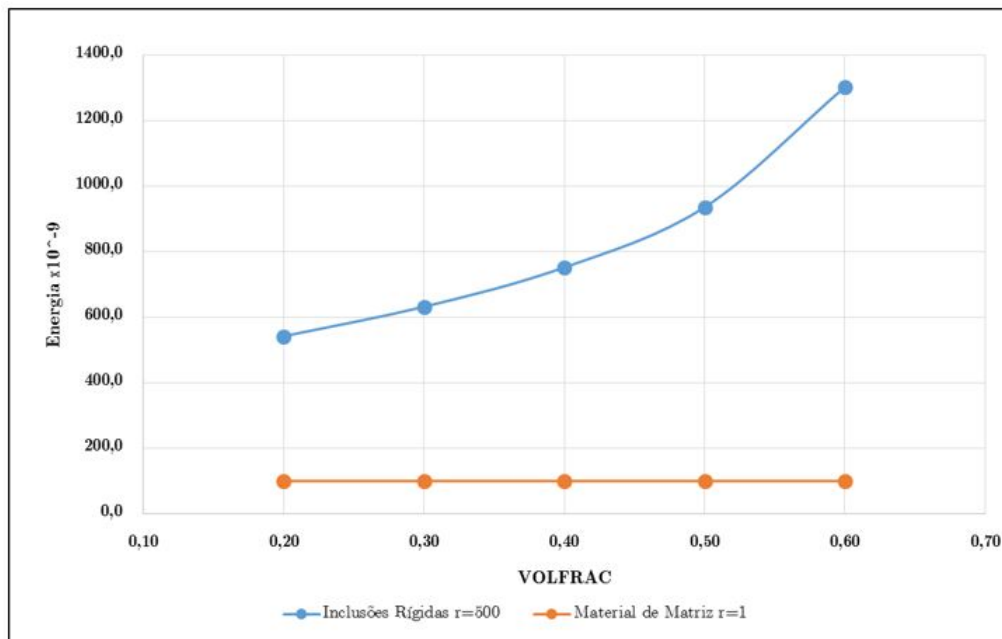


Figura 6.28: Variação da energia, comparando $r = 1$ (material de matriz) e $r = 500$ (material com inclusões rígidas), com a fração volúmica.

Como se pode observar para $r = 1$, visto que se trata do material de matriz por si só, a tensão e a energia são as mesmas para diferentes frações de volume, o que seria de esperar. Por outro lado, para inclusões rígidas, $r = 500$, à medida que se aumenta a fração volúmica, aumentam a tensão e a energia, demonstrando o efeito do reforço no material.

6.3.6 Análise de κ e μ para Diferentes Condições de Fronteira

Neste ensaio, os parâmetros de elasticidade linear macroscópicas de compósitos de partículas de duas fases são calculados, para modelos bidimensionais. Se a microestrutura da amostra exibe isotropia na macroescala, então é suficiente calcular os dois módulos que caracterizam o tensor de elasticidade macroscópica IE , usando os coeficientes de Lamé, o módulo de compressibilidade ($\bar{\kappa}$) e o módulo de corte ($\bar{\mu}$). Procede-se à análise do efeito da aplicação de diferentes condições de fronteira nos valores deste coeficientes. Realiza-se então para cada condição de fronteira um teste por cada número de partículas. Número este que se foi aumentando, para se verificar se as relações se mantêm. Para retirar algum tipo de periodicidade, este teste realizou-se para uma microestrutura aleatória. Os resultados para os módulos de compressibilidade ($\bar{\kappa}$) e de corte ($\bar{\mu}$) são apresentados nas figuras 6.29 e 6.30, respetivamente.

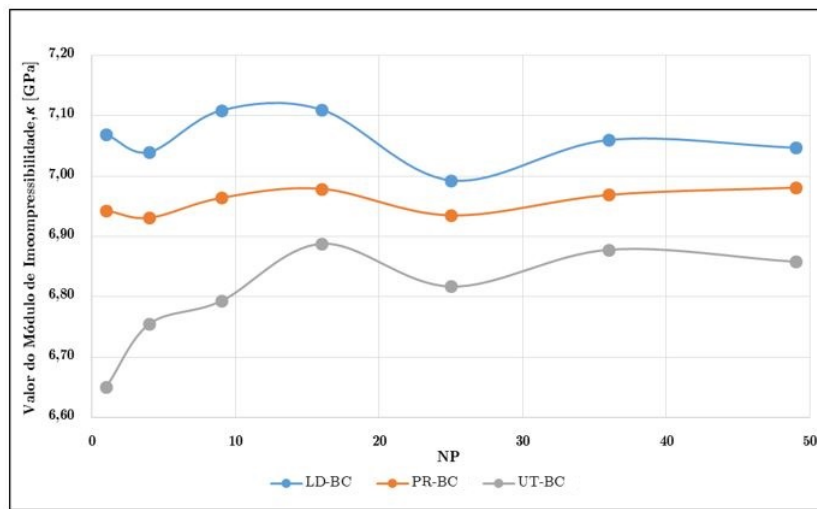


Figura 6.29: Variação do módulo de compressibilidade, κ , com o número de partículas, para condições de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC.

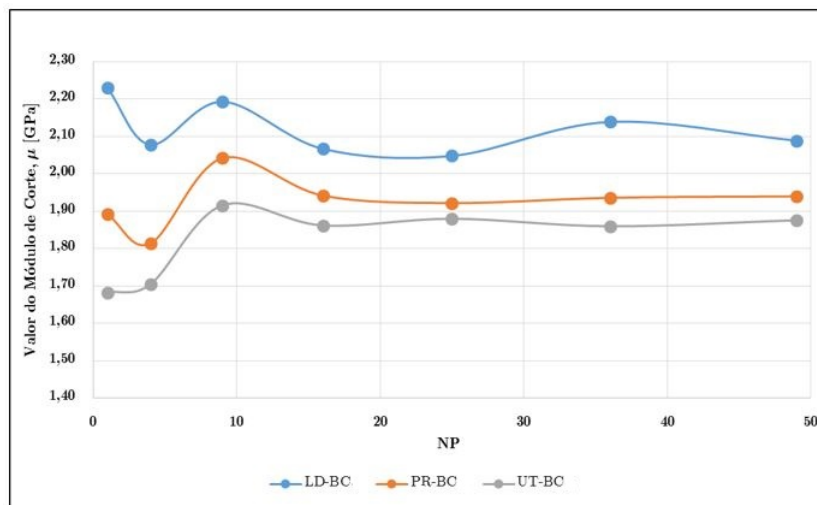


Figura 6.30: Variação do módulo de corte, μ , com o número de partículas, para condições de fronteira \mathcal{E} -Pr-BC, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC.

Na figura 6.29 é possível observar-se os diferentes valores de $\bar{\kappa}$ obtidos para as várias condições de fronteira. O seu comportamento estão de acordo com os resultados previstos, já que $\bar{\kappa}_{UT} \leq \bar{\kappa}_{PR} \leq \bar{\kappa}_{LD}$. Por outro lado, na figura 6.30 também se verifica o mesmo para o $\bar{\mu}$, já que se observa que $\bar{\mu}_{UT} \leq \bar{\mu}_{PR} \leq \bar{\mu}_{LD}$. De notar ainda, que à medida que se aumenta o número de partículas, a diferença dos valores vai sendo cada vez menor. Todavia, existe uma diferença entre o tensor de rigidez macroscópica efetivo e aquele calculado a partir de $\bar{\kappa}$ e $\bar{\mu}$ supondo isotropia macroscópica. Este desfasamento entre o valor efetivo e o calculado, é designado por inconsistência isotrópica. Para medir essa mesma inconsistência, pode-se empregar as seguintes relações:

$$e \stackrel{def}{=} \frac{\|\bar{I}\bar{E}^{iso} - \bar{I}\bar{E}\|}{\|\bar{I}\bar{E}\|} \quad \text{e} \quad \hat{e} \stackrel{def}{=} \frac{\|\langle\langle\bar{I}\bar{E}^{iso} - \bar{I}\bar{E}\rangle\rangle\|}{\|\langle\langle\bar{I}\bar{E}\rangle\rangle\|}. \quad (6.3)$$

O parâmetro e mede a inconsistência isotrópica para o teste de uma amostra, enquanto que o \hat{e} mede o desvio médio de um conjunto de amostras, da aproximação do tensor de rigidez isotrópico ao tensor de rigidez real. Realiza-se então um estudo a partir de uma microestrutura aleatória composta por 4 partículas (ver figura 6.31), procede-se à aplicação da condição de fronteira ϵ -LD-BC, e efetua-se 100 ensaios, cujos resultados se ilustram na figura 6.32.

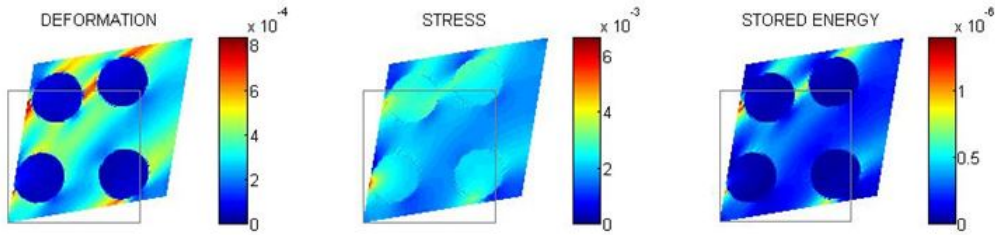


Figura 6.31: Amostra utilizada na medição da inconsistência isotrópica, com 4 partículas.

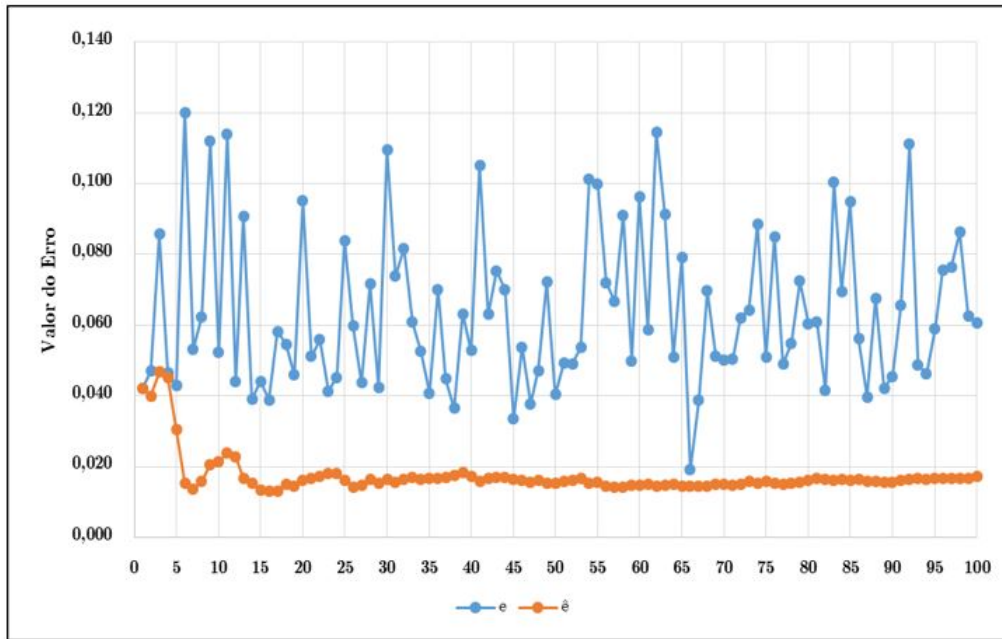


Figura 6.32: Variação do erro, e , e do desvio médio de um conjunto de amostras, \hat{e} , para partículas sem permissão de interseção com a fronteira de microestruturas aleatórias.

6. Ensaio e Resultados Numéricos

Note-se que e , para cada ensaio é mais ou menos da mesma ordem de grandeza, com valores mais elevados ou mais baixos, o erro mantém-se dentro de um intervalo. Por outro lado \hat{e} diminui de forma significativa no início, mantendo-se depois constante, embora nunca atinge o valor zero. Isto sugere que a média do conjunto, alivia as inconsistências isotrópicas, mas não as elimina.

Realizam-se mais testes para se comparar o desvio médio do conjunto, para partículas com permissão e sem permissão de interseção com a fronteira da célula microestrutural da amostra. Os resultados são apresentados na figura 6.33, onde é possível observar-se as diferentes microestruturas usadas, ambas com 4 partículas, para as quais só se verificam diferenças de \hat{e} .

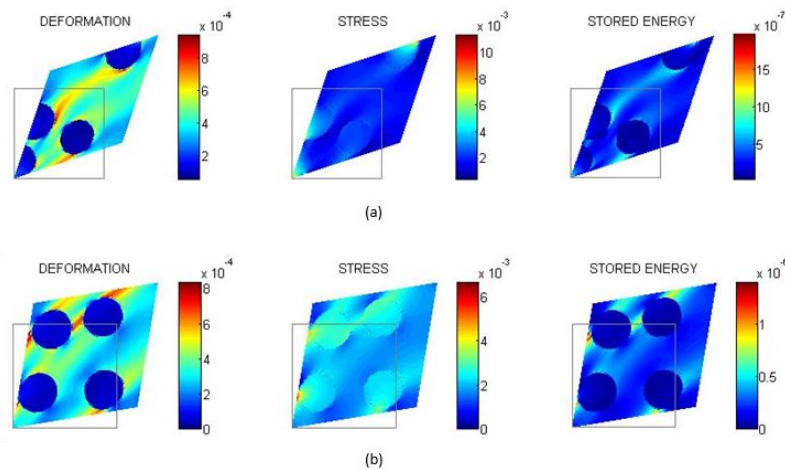


Figura 6.33: Amostras analisadas (a) com permissão e (b) sem permissão de interseção com a fronteira da célula microestrutural.

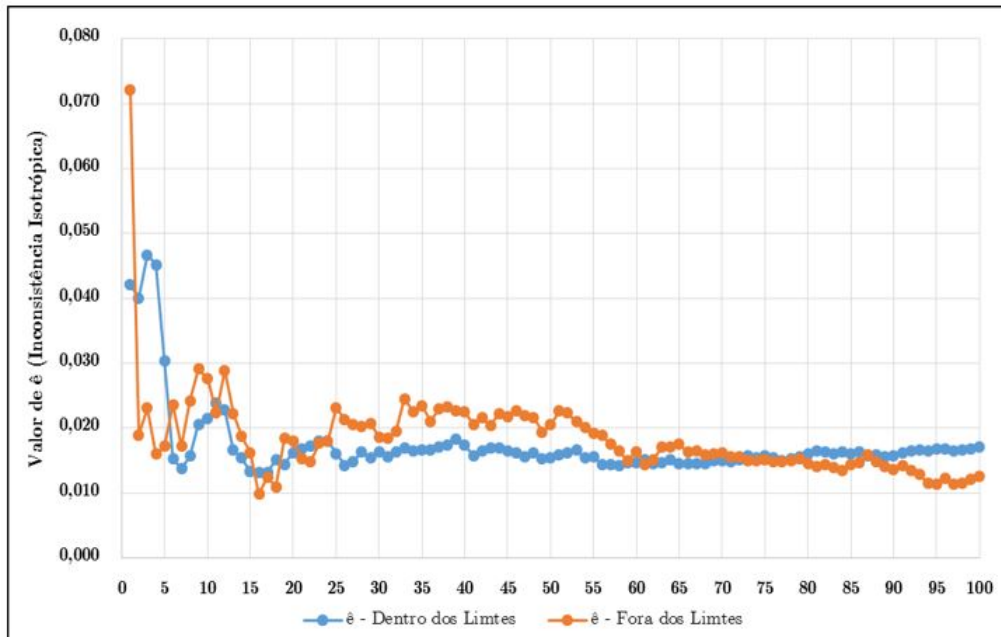


Figura 6.34: Variação do desvio médio de um conjunto de amostras, \hat{e} , para (a) partículas com permissão e (b) partículas sem permissão de interseção com a fronteira da célula microestrutural.

Como se pode verificar, quando as partículas têm permissão de interseção com a fronteira da célula microestrutural o erro, $\hat{\epsilon}$, vai-se aproximando ainda mais de zero. Isto deve-se ao facto de que, como se permite às partículas ocuparem uma posição ainda mais aleatória e real, nomeadamente poderem ficar fora das fronteira, o parâmetros de elasticidade linear obtidos são mais próximos dos valores reais do compósito.

6.3.7 Análise de κ e μ Considerando \mathcal{E} -LD-BC e Σ -UT-BC

Como estamos a tratar de casos em elasticidade linear, as \mathcal{E} -UT-BC e Σ -UT-BC são equivalentes, ou seja, as condições de tração uniforme controladas pela deformação e pela tensão, respetivamente, dão resultados iguais, tanto para a energia como para a tensão. Assim, com o intuito de analisar a aplicação da condição de fronteira controlada pela deformação e pela tensão, procedeu-se a um teste em que para cada uma das aplicações da condição de fronteira se varia o número de partículas, para se verificar a variação do módulo de compressibilidade (κ) e do módulo de corte (μ). De notar também que as condições de fronteira controladas pela deformação são as mais usadas, pois são mais simples de implementar, em termos do sistema de equações no MEF. Nas figuras 6.35 e 6.36 apresentam-se os resultados obtidos.

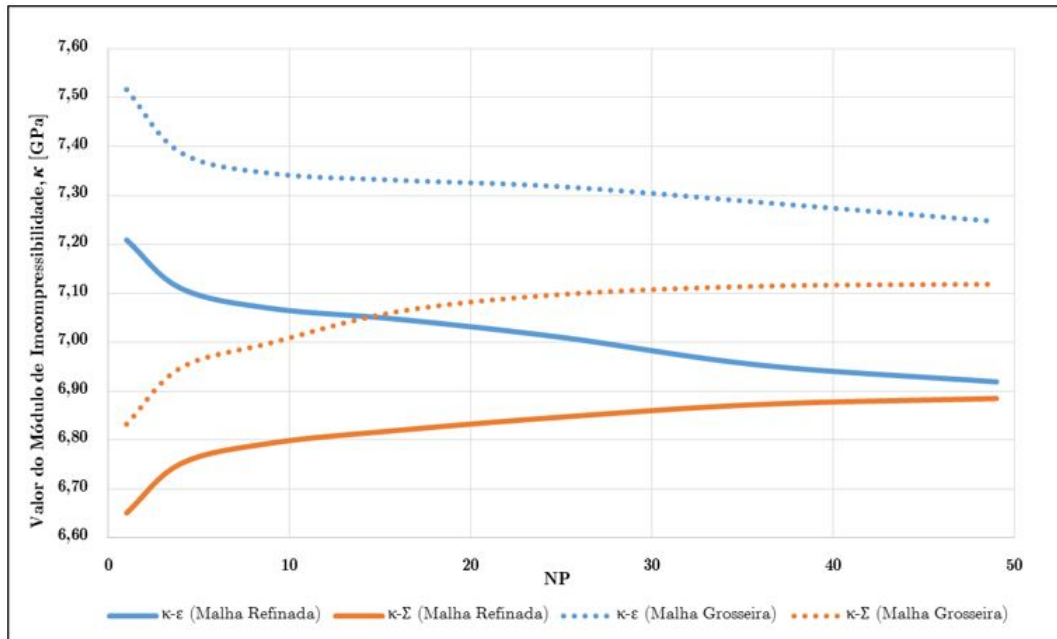


Figura 6.35: Variação do módulo de compressibilidade, κ , com o número de partículas, usando condições de fronteira \mathcal{E} -LD-BC e Σ -UT-BC.

No caso do módulo de compressibilidade, κ , verifica-se que os valores controlados por \mathcal{E} -LD-BC são sempre superiores e decrescem com o aumento do número de partículas, convergindo para um valor que será praticamente igual ao valor controlado por Σ -UT-BC. De notar ainda que para uma malha refinada os valores atingem uma convergência para um número de partículas aproximadamente igual a $NP = 49$, enquanto que para uma malha grosseira os valores para um número de partículas igual ainda se encontram um pouco distantes desse ponto.

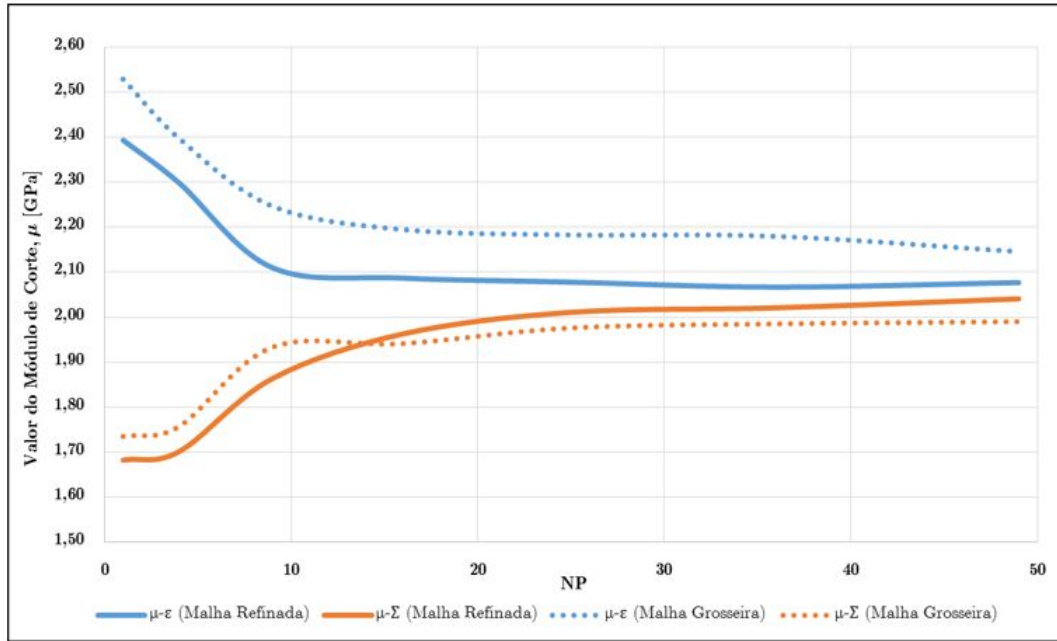


Figura 6.36: Variação do módulo de corte, μ , com o número de partículas, usando condições de fronteira \mathcal{E} -LD-BC e Σ -UT-BC.

No caso do módulo de corte verifica-se o mesmo em termos de condições de fronteira, ou seja, os valores controlados por \mathcal{E} -LD-BC também são sempre superiores. Porém os valores apresentam, para a malha refinada, uma convergência muito mais rápida, sendo para $NP=25$ partículas os valores já relativamente aproximados. E mais uma vez se nota a diferença de comportamento das malhas grosseira e refinada, verificando-se que para a malha refinada os valores encontram um ponto de convergência para $NP=25$, enquanto que para a malha grosseira nem para $NP = 49$ os valores estão próximos.

6.3.8 Análise de Propriedades Mecânicas Homogeneizadas

Por fim, analisa-se a influência da fração de volume de partículas esféricas de reforço na matriz homogeneizada de elasticidade de uma material compósito de matriz metálica [45]. Os materiais da matriz e do reforço do material compósito são o alumínio (liga AlCu4,5Mn) e o carbono de silício (SiC), respetivamente. As suas propriedades mecânicas elásticas encontram-se indicadas na tabela 6.4 (Boller e Seeger [46], Teixeira Dias [47]).

Tabela 6.4: Propriedades mecânicas elásticas dos materiais da matriz (m) e do reforço (r) para o material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carbono de silício.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade do material da matriz, E_m [GPa]	69,1
Coefficiente de Poisson do material da matriz, ν_m [-]	0,33
Módulo de elasticidade do material do reforço, E_r [GPa]	410,0
Coefficiente de Poisson do material do reforço, ν_r [-]	0,24

As propriedades mecânicas elásticas (homogeneizadas) do material compósito são determinadas para frações de volume, VOLRAC, entre 10% e 60%, inclusive. Neste contexto, procede-se à geração de 6 microestruturas não-periódicas, com partículas com permissão de interferência com a fronteira da amostra, uma para cada fração de volume. As amostras encontram-se representadas na figura 6.37. Efetua-se, então, um estudo de convergência dos valores do módulo de compressibilidade, (κ), e do módulo de corte, (μ), para cada uma das frações volúmicas. Aumenta-se então o número de partículas de modo a se obter uma convergência nos valores, para a partir daí selecionar o número de partículas a usar. Nas figuras 6.38 a 6.43 apresentam-se os resultados desses testes de convergência, para κ e μ , usando as duas condições de fronteira não-periódicas apresentadas, para cada uma das frações volúmicas (10% e 60%, inclusive).

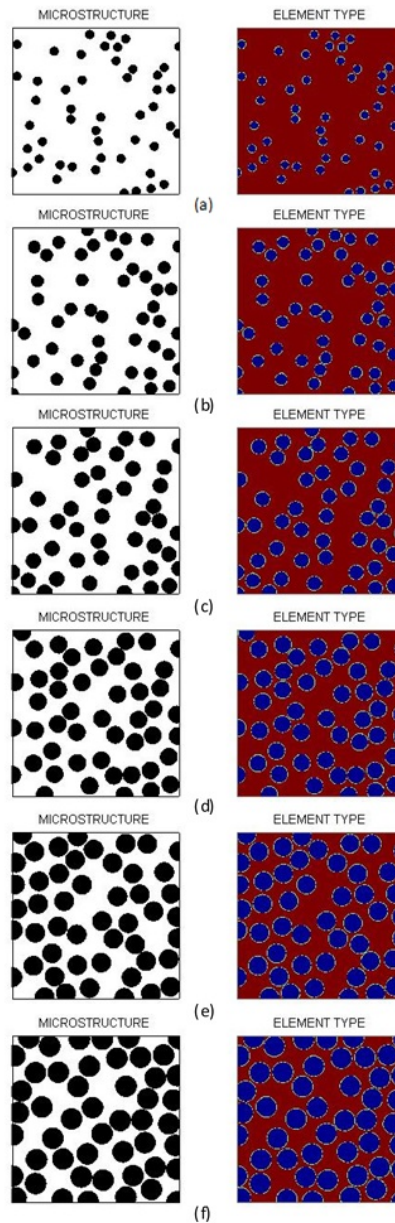
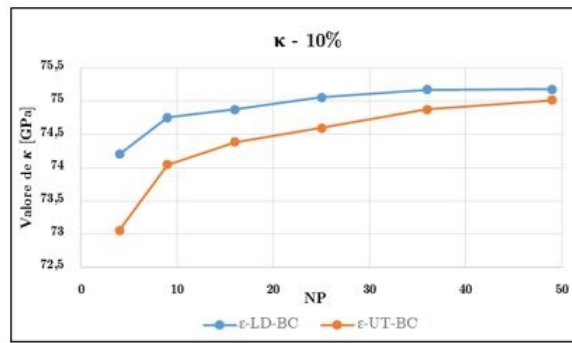
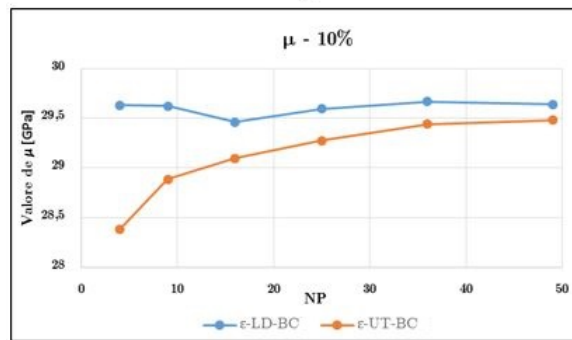


Figura 6.37: Geometrias das amostras geradas com distribuições aleatórias de partículas esféricas, para frações volúmicas de reforço de (a) 10%, (b) 20%, (c) 30%, (d) 40% e (e) 50%.

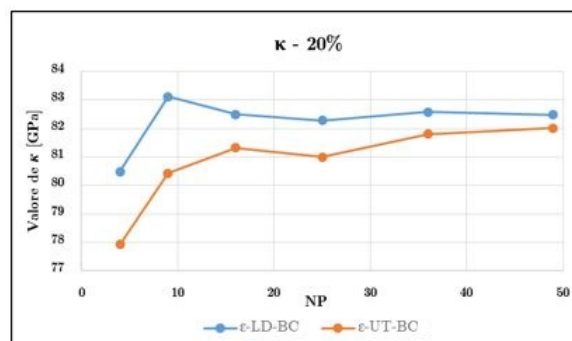


(a)

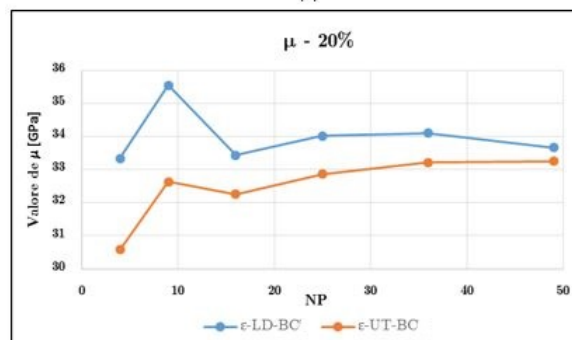


(b)

Figura 6.38: Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 10%, com o número de partículas.

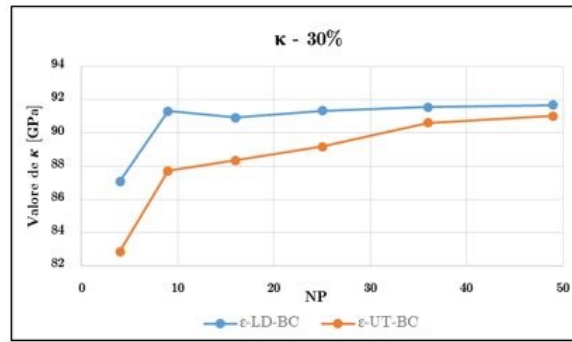


(a)

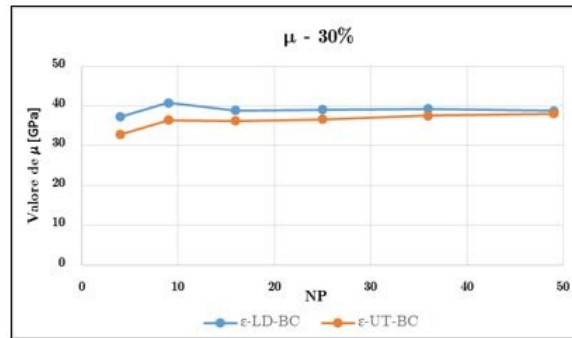


(b)

Figura 6.39: Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 20%, com o número de partículas.

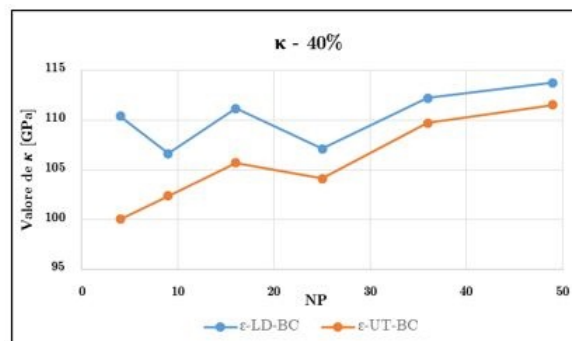


(a)

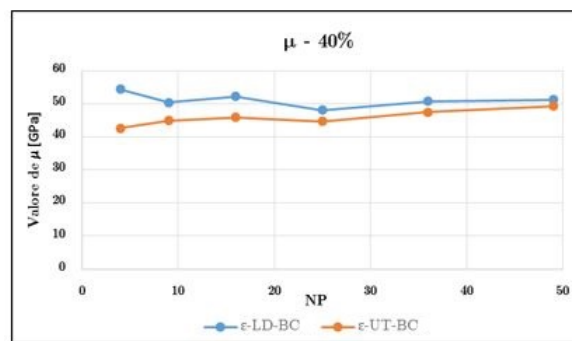


(b)

Figura 6.40: Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 30%, com o número de partículas.

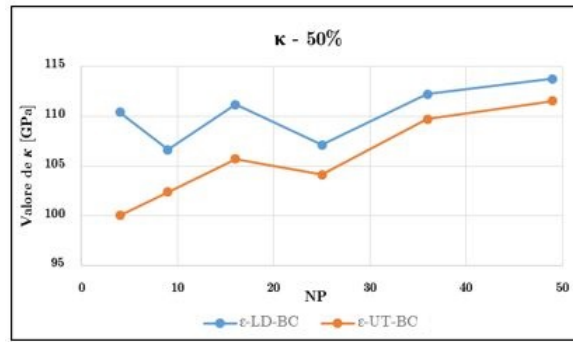


(a)

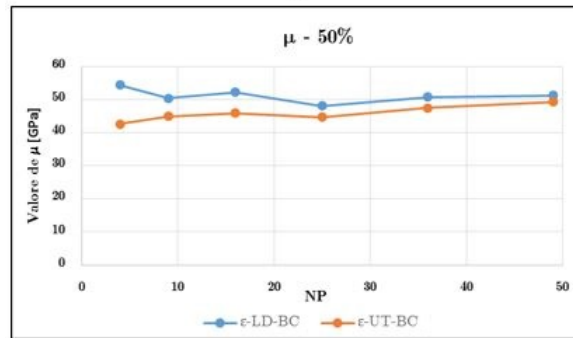


(b)

Figura 6.41: Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 40%, com o número de partículas.

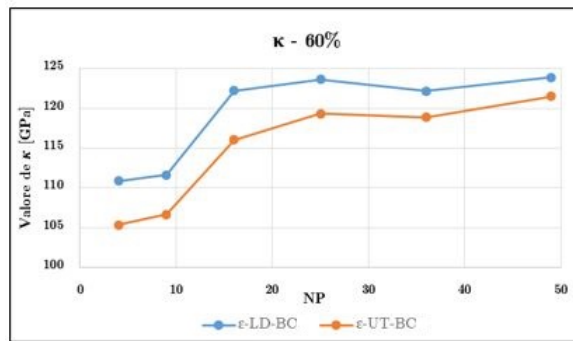


(a)

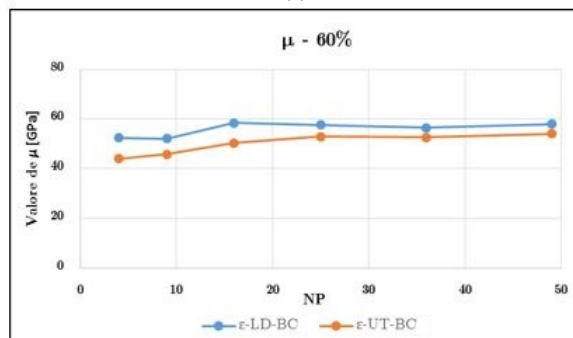


(b)

Figura 6.42: Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 50%, com o número de partículas.



(a)



(b)

Figura 6.43: Variação (a) do módulo de compressibilidade, κ , e (b) do módulo de corte, μ , para uma fração volúmica de 60%, com o número de partículas.

Desde logo é possível verificar-se que para $NP = 49$ partículas o valor de κ e de μ começa a convergir para o mesmo valor atingido pelas duas condições de fronteira não-periódicas. Outra conclusão dessa convergência é o facto de para cada uma das condições de fronteira, em praticamente todos os casos, o erro relativo entre o valor de $NP = 36$ e $NP = 49$ partículas é igual ou inferior a 1%, o que torna o uso de 49 partículas para os testes seguinte admissível.

Atendendo às relações

$$\kappa = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad \text{e} \quad (6.4)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad (6.5)$$

resulta que a previsão analítica do módulo de elasticidade transversal corresponde a

$$E = \frac{9\kappa\mu}{3\kappa + \mu}. \quad (6.6)$$

De modo a complementar os resultados de previsão numérica, são ainda considerados os limites superiores e inferiores para o valor do módulo de elasticidade longitudinal associados aos modelos micromecânicos de Voigt-Reuss [48, 49] e de Hashin-Shtrikman [50]. Na figura 6.44 são representadas, de modo esquemático, células representativas unitárias associadas a estes modelos micromecânicos.

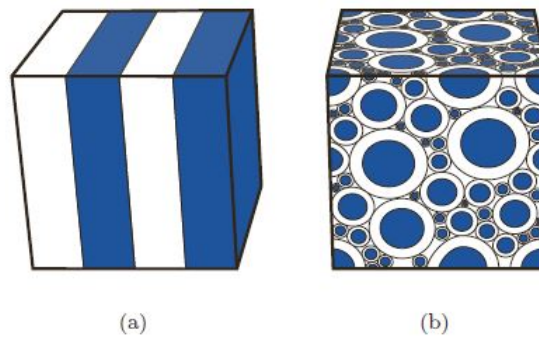


Figura 6.44: Representação esquemática de células representativas unitárias associadas aos modelos micromecânicos (a) de Voigt-Reuss e (b) de Hashin-Shtrikman [45].

Os métodos que fornecem limites para os valores das propriedades mecânicas de materiais compósitos baseiam-se na consideração de campos aproximados de deformação ou de tensão do material compósito. Em termos gerais, assumindo um campo de deformação (tensão) aproximado, procede-se, com base num princípio variacional, à determinação do correspondente campo de tensão (deformação) através da minimização (maximização) de um funcional da deformação (tensão). Embora estes métodos não forneçam estimativas para as propriedades elásticas de um material compósito, permitem a obtenção de minorantes e de majorantes para as referidas propriedades. Neste contexto, a consideração de dois tipos distintos de carregamento mecânico da célula representativa unitária apresentada na figura 6.44a dá origem aos denominados limites de Voigt-Reuss. No modelo de Voigt procede-se à minimização da energia potencial do material compósito assumindo um campo uniforme de deformação para o reforço e a matriz (campo de isodeformação). Atendendo ao facto de a energia potencial do

material compósito apresentar um mínimo absoluto no caso de se verificar o equilíbrio global do material compósito, resulta que a energia potencial associada ao hipotético campo de isodeformação tem obrigatoriamente de ser não-inferior ao valor de equilíbrio, o que resulta na definição de um majorante para a rigidez estrutural do material compósito. Assim, considere-se o estado de isodeformação resultante do carregamento mecânico da célula representativa unitária figura 6.44a na direcção vertical, *i.e.* segundo a direcção que é simultaneamente paralela à interface das lâminas de matriz e reforço, e perpendicular à face superior da referida célula representativa unitária. Nesta situação, verifica-se que o módulo de elasticidade longitudinal para o material compósito definido pela referida célula representativa unitária corresponde, de acordo com Voigt [48], a

$$E^V = E_r f_r + E_m (1 - f_r) . \quad (6.7)$$

Por outro lado, no modelo de Reuss procede-se à maximização da energia potencial complementar do material compósito assumindo um campo uniforme de tensão para o reforço e a matriz (campo de isotensão). Atendendo ao facto de a energia potencial complementar do material compósito apresentar um máximo absoluto no caso de se verificar o equilíbrio global do material compósito, resulta que a energia potencial associada ao hipotético campo de isotensão tem obrigatoriamente de ser não-superior ao valor de equilíbrio, o que, em termos práticos, resulta na definição de um minorante para a rigidez estrutural do material compósito. Assim, considere-se o estado de isotensão associado ao carregamento mecânico da célula representativa unitária 6.44a na direcção horizontal, *i.e.* segundo a direcção perpendicular à interface das lâminas de matriz e reforço. Nesta situação, o módulo de elasticidade longitudinal para o material compósito definido pela referida célula representativa unitária corresponde, de acordo com Reuss [49], a

$$E^R = \frac{E_r E_m}{(1 - f_r) E_r + f_r E_m} . \quad (6.8)$$

As equações 6.7 e 6.8 definem o limite (superior) de Voigt e o limite (inferior) de Reuss, respectivamente, para o valor do módulo de elasticidade longitudinal de um material compósito com uma fracção volúmica de reforço, VOLFRAC. A maior ou menor proximidade dos limites de Voigt e de Reuss ao valor exacto de uma propriedade elástica depende do maior ou menor carácter uniforme dos campos internos de deformação e de tensão, respectivamente. Em geral, verifica-se que, no caso de os valores da rigidez dos materiais da matriz e do reforço diferirem de modo significativo, os limites de Voigt e Reuss definem intervalos excessivamente amplos. Neste contexto, Hashin e Shtrikman procederam ao desenvolvimento de um princípio variacional alternativo para materiais heterogéneos (Hashin e Shtrikman [50]). Com base na consideração de um material de referência, este método requer a utilização de um único princípio variacional, ao contrário do que se verifica para o método de Voigt-Reuss. A selecção de características adequadas para o material de referência resulta, por parte deste princípio variacional, nos limites superior e inferior de Hashin-Shtrikman (HS). De facto, no caso de o material de referência ter uma rigidez não-inferior (não-superior) à de quaisquer das fases constituintes do material compósito obtém-se um valor superior (inferior) para o limite de Hashin-Shtrikman. Em termos do módulo de elasticidade longitudinal, verifica-se que estes limites definem intervalos mais restritos que os de Voigt-Reuss.

De acordo com o método de Hashin e Shtrikman, os limites superiores (sup) e inferiores (inf) para os módulos de compressibilidade, κ , e de corte, μ , de um material compósito constituído por partículas de reforço esféricas embebidas numa matriz contínua (figura 6.44b)

correspondem, no caso de o material do reforço ser mais rígido que o material da matriz, a

$$\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \kappa_r + \frac{1 - f_r}{\frac{1}{\kappa_m - \kappa_r} + \frac{3f_r}{3\kappa_r + 4\mu_r}}, \quad (6.9)$$

$$\mu_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \mu_r + \frac{1 - f_r}{\frac{1}{\mu_m - \mu_r} + \frac{6f_r(\kappa_r + 2\mu_r)}{5\mu_r(3\kappa_r + 4\mu_r)}}, \quad (6.10)$$

$$\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \kappa_m + \frac{f_r}{\frac{1}{\kappa_r - \kappa_m} + \frac{3(1-f_r)}{3\kappa_m + 4\mu_m}} \quad \text{e} \quad (6.11)$$

$$\mu_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \mu_m + \frac{f_r}{\frac{1}{\mu_r - \mu_m} + \frac{6(1-f_r)(\kappa_m + 2\mu_m)}{5\mu_m(3\kappa_m + 4\mu_m)}}. \quad (6.12)$$

O limite superior e o limite inferior de Hashin-Shtrikman para o módulo de elasticidade longitudinal correspondem, em conformidade com as relações 6.4 a 6.6, a

$$E_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \frac{9\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}}\mu_{\text{sup}}^{\text{HS}}}{3\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} + \mu_{\text{sup}}^{\text{HS}}} \quad \text{e} \quad (6.13)$$

$$E_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \frac{9\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}}\mu_{\text{inf}}^{\text{HS}}}{3\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} + \mu_{\text{inf}}^{\text{HS}}}, \quad (6.14)$$

respectivamente.

Os resultados experimentais para o módulo de elasticidade longitudinal são apresentados, em conjunto com os limites superiores e inferiores de Voigt-Reuss e de Hashin-Shtrikman. Com base no código usado, determinaram-se para cada fração de volume os respetivos limites superiores e inferiores bem como o valor do módulo de compressibilidade, κ e do módulo de corte, μ , tendo a equação 6.6 permitido a determinação do módulo de elasticidade, E . Os resultados obtidos encontram-se na figura 6.45.

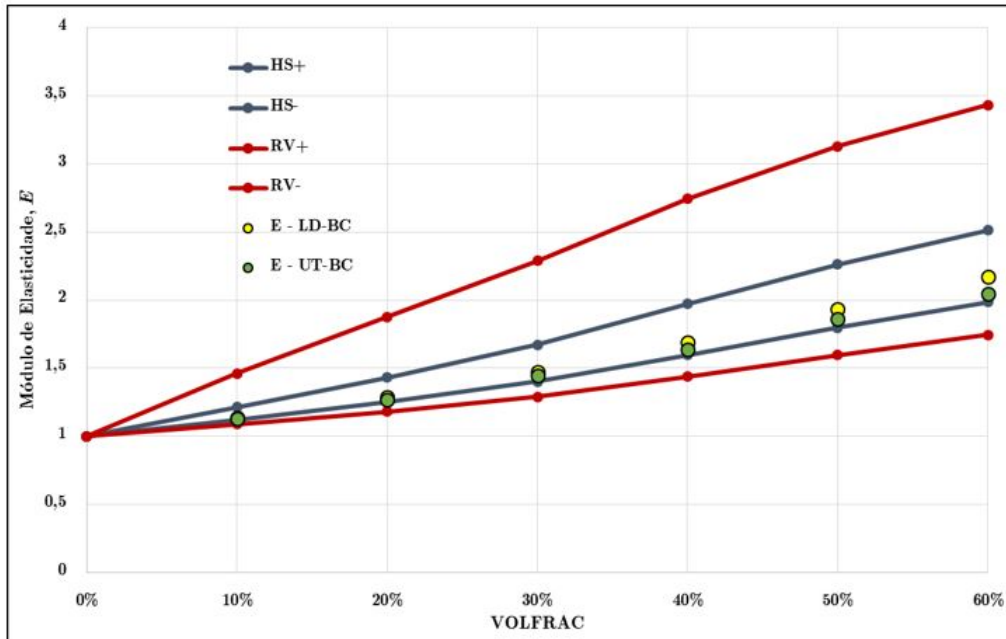


Figura 6.45: Variação do módulo de elasticidade longitudinal com a fração volúmica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de alumínio.

Verifica-se um afastamento considerável entre os limites de Voigt e de Reuss, o que advém, de acordo com as equações 6.7 e 6.8, do facto de os materiais da matriz e do reforço apresentarem módulos de elasticidade significativamente distintos. Na realidade, o modelo micromecânico de Voigt-Reuss considera o material compósito como sendo um laminado de matriz e de reforço (figura 6.44a), o que se traduz numa aproximação não-razoável da microestrutura de materiais compósitos reforçados com partículas esféricas. Por outro lado, nos modelos micromecânicos de Hashin-Shtrikman considera-se a existência de uma matriz contínua a envolver partículas de reforço isoladas (figura 6.44b), o que se traduz na definição, por parte dos correspondentes limites, de intervalos mais estreitos que os de Voigt-Reuss. Neste contexto, verifica-se que, os resultados se encontram entre os limites mais estreitos, entre os limites de Hashin-Shtrikman. Por outro lado, constata-se que os resultados experimentais se aproximam mais do limite inferior de Hashin-Shtrikman que do respectivo limite superior, o que se encontra em conformidade com estudos previamente efetuados [51]. De notar ainda que, à medida que aumentamos a fração volúmica de reforço, os valores experimentais das duas condições de fronteira não-periódicas, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC, se começam a afastar. Sendo que a condição de deslocamento linear é sempre maior do que a condição de tração uniforme.

No que concerne ao coeficiente de Poisson do material compósito de matriz de alumínio reforçado com partículas esféricas de carboneto de silício, o seu valor pode ser obtido, através de equações previamente utilizadas para a determinação do módulo de elasticidade. Assim, o valor do coeficiente de Poisson é estimado, de acordo com as expressões 6.4 e 6.5, por

$$\nu = \frac{3\kappa - 2\mu}{6\kappa + 2\mu}. \quad (6.15)$$

Por outro lado, os limites (analíticos) superiores e inferiores para o valor do coeficiente de Poisson são obtidos com base nos modelos micromecânicos de Hashin-Shtrikman. De acordo com as modificações propostas por Zimmerman [52], o limite superior e o limite inferior de Hashin-Shtrikman para o valor do coeficiente de Poisson correspondem, atendendo às expressões 6.9 a 6.12, a

$$\nu_{\text{sup}}^{\text{HS}} = \frac{3\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} - 2\mu_{\text{inf}}^{\text{HS}}}{6\kappa_{\text{sup}}^{\text{HS}} + 2\mu_{\text{inf}}^{\text{HS}}} \quad \text{e} \quad (6.16)$$

$$\nu_{\text{inf}}^{\text{HS}} = \frac{3\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} - 2\mu_{\text{sup}}^{\text{HS}}}{6\kappa_{\text{inf}}^{\text{HS}} + 2\mu_{\text{sup}}^{\text{HS}}}, \quad (6.17)$$

respetivamente.

Para o coeficiente de Poisson, usou-se o mesmo método anteriormente usado para o módulo de elasticidade. Sendo assim para cada fração volúmica, obtiveram-se os respetivos limites superiores e inferiores, bem como o valor do módulo de compressibilidade, κ e o módulo de corte, μ , tendo a equação 6.15 permitido a determinação do coeficiente de Poisson, ν . Os resultados obtidos encontram-se na figura 6.46.

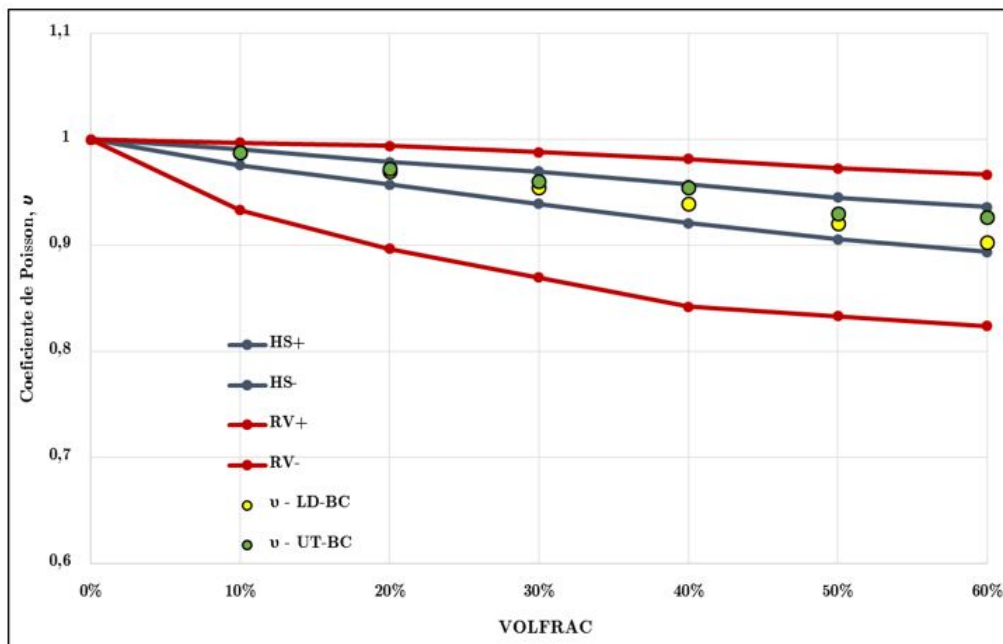


Figura 6.46: Variação do coeficiente de Poisson com a fração volumétrica de reforço de partículas esféricas de carboneto de silício, para um material compósito de matriz de alumínio.

Desde logo, se verifica que também no coeficiente de Poisson, os resultados se encontram dentro dos limites. De igual modo como se passa no módulo de elasticidade, os limites de Hashin-Shtrikman são mais estreitos que os limites de Voigt-Reuss. Os valores de coeficiente de Poisson, para as duas condições de fronteira analisadas, à exceção da fração de volume de 50%, afastam-se com o aumento da percentagem de reforço. Por outro lado, inverte-se a situação em relação ao módulo de elasticidade, visto que, neste caso a condição de fronteira de tração uniforme apresenta valores superiores em relação à condição de fronteira de deslocamento linear.

Capítulo 7

Conclusões Finais

7.1 Conclusões

Neste trabalho, para que fosse possível analisar as propriedades efetivas dos materiais compósitos e a influência das condições de fronteira, foi crucial perceber-se inicialmente as propriedades da microestrutura a analisar. Assim sendo, começou-se por compreender e concluir acerca da geração e da discretização da microestrutura. Considerando-se uma microestrutura aleatória, em que as partículas têm permissão de interseção com a fronteira da amostra, para que não houvesse nenhuma periodicidade, realizou-se um teste para se verificar como variava a fração volúmica (VOLFRAC), com o aumento do número de partículas (NP).

- Usando apenas um ensaio, verificou-se desde logo que à medida que se aumentava o número de partículas, a fração volúmica também aumentava, de uma forma mais acentuada no início, mas a pouco e pouco começava a convergir para a fração volúmica pretendida, colocada no algoritmo.
- Verificou-se também que, para frações de volume elevada, nomeadamente 50% e 60%, não se conseguiram realizar testes para um elevado número de partículas. Isto deve-se ao facto de por mais que o tamanho da amostra aumente, o algoritmo é incapaz de ocupar o volume pretendido com o número de partículas pretendido.
- Neste teste inicial verificou-se que as curvas apresentavam demasiadas oscilações, devido ao facto de se ter obtido resultados através de um único ensaio. Para isso, realizaram-se 100 ensaios para cada número de partículas. Nos gráficos de dispersão para cada fração volúmica, de notar que, à medida que aumentamos o número de partículas, os valores apresentam cada vez menos dispersão. As conclusões obtidas a partir das médias dos ensaios são as mesmas que as obtidas para um ensaio. Nomeadamente, tem-se que à medida que se aumentam o número de partículas a fração volúmica também aumenta. Porém, neste caso as curvas não apresentam nenhuma oscilação, ou seja, são mais corretas.

De seguida, realizou-se outro teste, para se compreender e analisar a diferença entre as microestruturas em que as partículas têm ou não permissão de interseção com a fronteira da célula.

- Para estes resultados, desde logo se observou um aspeto importante no algoritmo para este teste. Quando a microestrutura é periódica, o algoritmo não coloca partículas fora dos limites da amostra, ou seja, o algoritmo evita sempre a situação de ter de cortar uma partícula e compensar noutra para que a periodicidade da microestrutura se mantenha.

- Com as microestruturas aleatórias, verificou-se que as amostras onde as partículas tinham permissão para saírem fora dos limites, os resultados de fração volúmica, com o aumento do número de partículas é que se conseguiu atingir o valor de fração volúmica de entrada desejado (como se verificou para o teste anterior). Por outro lado quando as partículas não têm permissão para saírem fora dos limites da amostra, o valor de fração volúmica obtida é sempre igual ao valor de entrada. Isto deve-se ao facto de o algoritmo, como sabe que não há probabilidade de uma das partículas cair fora dos limites antes de colocar a seguinte, conseguir sempre atingir o valor de entrada.
- Ainda com as partículas sem permissão para saírem fora dos limites da amostra, como o valor da fração volúmica obtido foi sempre igual ao de entrada, descobriu-se qual o valor máximo de fração volúmica obtido para um determinado número de partículas, onde foi possível concluir que à medida que se aumenta o número de partículas, o valor de fração volúmica obtido vai sendo cada vez menor.

Outro estudo realizado, foi relativo à diferença da fração volúmica obtido para microestruturas periódicas (análise de diferentes morfologias) e aleatórias.

- Para microestruturas que apresentam periodicidade, em que as partículas são colocadas com uma posição e orientação específicas, verificou-se que a fração volúmica obtida é sempre inferior ao valor de entrada no algoritmo. Isto deve-se ao facto de o algoritmo, como sabe que as partículas terão orientações e posições específicas, adequar o diâmetro das partículas. Para as microestruturas aleatórias, os resultados foram iguais aos resultados de microestruturas em que as partículas não tinham permissão para sair fora dos limites da amostra, ou seja, o valor obtido foi sempre igual ao de entrada.
- Realizou-se também um teste em que se verificou a diferença da fração volúmica obtido entre três morfologias (esféricas, quadradas e cruz) para microestruturas periódicas. Analisaram-se as três microestruturas e para as esféricas obteve-se o valor de fração volúmica de entrada, para as partículas quadradas um valor menor ao de entrada e para as partículas com a geometria de uma cruz, o valor obtido ainda foi menor. Isto deve-se ao facto de o algoritmo utilizar uma esfera delimitadora para verificar, por exemplo, a penetração entre as partículas ou se as partículas estão dentro ou fora dos limites. Sendo assim, isto resulta no facto de que todas as frações de volume realizáveis (morfologias não esféricas) são menores que as frações de volume para esferas.

Com o estudo da microestrutura completo, em seguida estudaram-se as propriedades efetivas, nomeadamente a tensão e a energia de deformação, como estas são diferentes para cada condição de fronteira implementada e como variam com o aumento do número de partículas. As condições de fronteira utilizadas foram: \mathcal{E} -LD-BC, \mathcal{E} -UT-BC e \mathcal{E} -Pr-BC.

- Para todos estes ensaios, inicialmente analisou-se o refinamento da malha. Verificou-se que para 50 elementos, a malha já se encontrava refinada (erro relativo inferior a 1%), ou seja, por mais elementos que se acrescentasse na malha, os valores das propriedades efetivas eram quase sempre iguais.
- No caso da energia, para uma microestrutura periódica em que se despreza qualquer aspeto de aleatoriedade de modo a analisar apenas o conceito de energia, verificou-se que quando se utiliza a condição de fronteira \mathcal{E} -PR-BC, o valor obtido é sempre igual independentemente do tamanho da amostra. No entanto, a \mathcal{E} -LD-BC sobrestima a energia e, por outro lado, a \mathcal{E} -UT-BC subestima a energia para uma dada deformação macroscópica de uma amostra.

- Verifica-se também que à medida que se aumenta o tamanho da amostra, os valores de \mathcal{E} -LD-BC e de \mathcal{E} -UT-BC convergem para o valor de \mathcal{E} -PR-BC. Isto é expectável, visto que usando BC que satisfazem o critério de energia, todos devem dar a mesma energia, porque um material linearmente elástico só pode ter uma energia associada a uma dada deformação macroscópica.
- No caso da tensão, tanto para $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ como para $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ verifica-se exatamente o mesmo que se verifica na energia, ou seja, \mathcal{E} -PR-BC dá valores independentes do tamanho da amostra, \mathcal{E} -LD-BC sobrestima a energia, \mathcal{E} -UT-BC subestima, e com o aumento do tamanho da amostra estas duas condições de fronteira convergem para o valor de \mathcal{E} -PR-BC.

Numa outra análise, aplicada a uma microestrutura periódica, estudou-se a variação da razão dos valores de $E_{\text{partículas}}$ (reforço) e E_{matriz} . Testou-se para um determinado número de partículas o que acontecia aos valores de tensão e energia, usando razões muito elevadas e muito reduzidas.

- Verificou-se que para grandes razões à medida que se aumenta a razão os valores de tensão e energia também aumentam. Porém, para razões muito elevadas ($r = 1000$), os resultados médios saturam, ou seja, mesmo que as partículas sejam praticamente rígidas, o compósito exhibe elasticidade considerável devido à matriz.
- Considerando-se razões muito pequenas, valores como $r = 0,001$, os resultados, são muito menores, tanto ao nível da tensão como ao nível da energia, e estes resultados, convergem para os que seriam os resultados de uma microestrutura porosa, ou seja, partículas flexíveis inseridas num meio rígido.
- Com o objetivo de visualizar o efeito do reforço em termos de variação de tensão e de energia, fez-se variar a fração volúmica e comparar estes resultados com o que o material de matriz por si só demonstraria. Verificou-se que, visto que se trata do material de matriz por si só, a tensão e a energia são as mesmas para diferentes frações volúmicas, já que não existe reforço. No outro caso, à medida que se aumentou a percentagem de reforço, a tensão e a energia também aumentavam.

Na análise dos parâmetros de elasticidade linear, analisou-se o módulo de compressibilidade (κ) e o módulo de corte (μ). Inicialmente verificou-se as relações entre estes valores para as diferentes condições de fronteira e após isso estudou-se o parâmetro e , erro que mede a inconsistência isotrópica, e o parâmetro \hat{e} , erro que mede o desvio médio de um conjunto de amostras. No final da análise destes parâmetros, analisou-se a diferença entre os valores de κ e de μ , controlados por \mathcal{E} -LD-BC e por Σ -UT-BC, para uma malha refinada e uma malha grosseira.

- Verificou-se, para a relação do módulo de compressibilidade, $\bar{\kappa}$, com as diferentes condições de fronteira, que $\bar{\kappa}_{\text{UT}} \leq \bar{\kappa}_{\text{PR}} \leq \bar{\kappa}_{\text{LD}}$, valores que comprovaram o que era previsto. Notou-se ainda que à medida que se aumentava o número de partículas, a diferença entre os valores ia sendo cada vez menor.
- Por outro lado, para o módulo de corte, $\bar{\mu}$, também se verificaram as mesmas relações, já que $\bar{\mu}_{\text{UT}} \leq \bar{\mu}_{\text{PR}} \leq \bar{\mu}_{\text{LD}}$.
- Nos testes do erro, verificou-se que para uma amostra de 4 partículas sem permissão de interseção na fronteira da microestrutura, os valores de e para cada ensaio são mais

ou menos da mesma ordem de grandeza, enquanto que o valor de $\hat{\epsilon}$ diminuiu de forma significativa no início para valores próximos de zero, onde se manteve, embora nunca o atingisse.

- Considerou-se ainda, para analisar novamente o valor de $\hat{\epsilon}$, duas microestruturas com o mesmo número de partículas, mas com e sem permissão para saírem fora dos limites, e observou-se que para as partículas com permissão, o valor do desvio médio ainda se aproxima mais de zero. Isto deve-se ao facto de que, como se permitiu às partículas ocuparem uma posição ainda mais aleatória e real, poderem ficar fora das fronteira, os parâmetros de elasticidade linear obtidos serem mais próximos dos valores reais do compósito.
- Verificou-se que como se está em elasticidade linear, tração uniforme controlada pela deformação e pela tensão dão, tanto para a energia como para a tensão, resultados iguais. Considerou-se então os parâmetros de elasticidade linear controlados por \mathcal{E} -LD-BC e por Σ -UT-BC, e notou-se que ambos os módulos convergem para um valor, porém com a malha refinada essa convergência dá-se mais cedo e é mais notável.

Por fim, analisou-se a influência da fração volúmica (10% a 60%) de partículas esféricas de reforço nas componentes da matriz homogeneizada de elasticidade de um material compósito de alumínio (liga AlCu_{4,5}Mn) reforçado com carboneto de silício (SiC).

- Inicialmente efetuou-se um estudo de convergência do módulo de compressibilidade e do módulo de corte para cada uma das frações de volume e chegou-se à conclusão de que, para o número de partículas $NP = 49$, os valores para as duas condições de fronteira \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC convergiam. Por outras palavras, o valor do erro relativo entre o valor de $NP = 36$ e $NP = 49$ foi igual ou inferior a 1%, o que torna o valor de $NP = 49$ admissível.
- Procedeu-se à comparação dos resultados obtidos para o módulo de elasticidade linear, E , com os limites superiores e inferiores de Voigt-Reuss e de Hashin-Shtrikman. Verificou-se um afastamento considerável entre os limites de Voigt-Reuss, o que advém do facto de os materiais da matriz e do reforço apresentarem módulos de elasticidade significativamente distintos. Verificou-se também que os resultados se encontram entre os limites mais estreitos, entre os limites de Hashin-Shtrikman. Por outro lado, constatou-se que os resultados experimentais se aproximam mais do limite inferior de Hashin-Shtrikman que do respectivo limite superior. De notar ainda que à medida que se aumentam a fração volúmica de reforço, os valores experimentais das duas condições de fronteira não-periódicas, \mathcal{E} -LD-BC e \mathcal{E} -UT-BC se começam a afastar. Sendo que a condição de deslocamento linear foi sempre maior do que a condição de tração uniforme.
- Da mesma forma, e no que concerne ao coeficiente de Poisson, ν , procedeu-se à comparação dos resultados obtidos, de igual forma com os limites superior e inferior dos modelos micromecânicos, Voigt-Reuss e Hashin-Shtrikman. Verificou-se que o coeficiente de Poisson se encontrava dentro dos limites, constatou-se também que os limites de Hashin-Shtrikman são mais estreitos que os limites de Voigt-Reuss. Os valores de coeficiente de Poisson, para as duas condições de fronteira analisadas, à exceção da fração volúmica de 50%, se afastam com o aumento da percentagem de reforço. Por outro lado, inverte-se a situação em relação ao módulo de elasticidade, visto que neste caso a condição de fronteira de tração uniforme apresenta valores superiores em relação à condição de fronteira de deslocamento linear.

7.2 Propostas de Trabalho Futuro

Propõe-se desenvolvimentos na melhoria de eficiência computacional e na obtenção de outros resultados ao nível da mecânica macroscópica, nomeadamente:

- Coeficiente efetivo de condutividade térmica — com o objetivo de modelar o procedimento de homogeneização aplicado à condução térmica linear;
- Análise das metodologias para homogeneização em deformações finitas;
- Homogeneização em inelasticidade — analisar o processo de homogeneização no contexto de deformações não-elásticas, podendo também ser analisado o caso de dano mecânico;
- Cálculo da tangente macroscópica associada a uma dada deformação macroscópica, podendo ainda ser analisado o efeito da adição de uma tensão aplicada.

Capítulo 8

Simbologia

\mathbf{b} – Vetor de forças volúmicas

\mathbf{B} – Matriz das derivadas das funções de forma

BC – Condição de Fronteira (do inglês *Boundary Condition*)

d – Comprimento das heterogeneidades

D – Comprimento de uma macroestrutura

E – Módulo de Young

\mathbf{f} – Vetor das forças nodais

F – Valor da força

\mathcal{H} – Gradiente médio dos deslocamentos

\mathcal{K} – Parâmetro de penalidade

\mathbf{K} – Matriz de rigidez global

\mathbf{k}^e – Matriz de rigidez elementar

L – Dimensão típica do REV

l – Distância entre partículas

\mathcal{M} – Material da configuração a analisar

MEF – Método dos Elementos Finitos

\mathbf{N}^e – Matriz das funções de forma para o elemento

n – Número de graus de liberdade

PTV – Princípio dos Trabalhos Virtuais

\mathcal{Q} – Quantidade

r – Razão de propriedades

REV – Elemento de Volume Representativo (do inglês *Representative Volume Element*)

RUC – Célula Representativa Unitária (do inglês *Representative Unit Cell*)

\mathcal{R} – Domínio do material heterogéneo

\mathcal{S} – Tipo de microestrutura a analisar

\mathbf{t} – Forças de tração numa superfície

t – Variável de tempo

\mathbf{u} – Vetor de deslocamentos

$\dot{\mathbf{u}}$ – Vetor de velocidades

$\ddot{\mathbf{u}}$ – Vetor de acelerações

v – Fração volúmica

\mathcal{V} – Volume da configuração a analisar

\mathbf{x} – Ponto do domínio macroscópico

\mathbf{X} – Ponto do domínio macroscópico não deformado

Γ_u – Fronteira de deslocamentos prescritos

$\delta\mathbf{a}$ – Campo discretizado de deslocamentos virtuais

$\delta\mathbf{u}$ – Vetor de deslocamentos virtuais

δW_{int} – Trabalho realizado pelas forças internas

δW_{ext} – Trabalho realizado pelas forças externas

$\partial\mathcal{R}$ – Fronteira do material heterogéneo

ε – Deformação

$\langle\varepsilon\rangle$ – Deformação média

$\mathcal{E} - BC$ – Condição de fronteira controlada pela deformação

κ – Módulo de compressibilidade

μ – Módulo de corte

ν – Coeficiente de Poisson

ρ – Densidade

σ – Tensão

$\langle\sigma\rangle$ – Tensão média

$\Sigma - BC$ – Condição de fronteira controlada pela tensão

Ψ – Região

Ω – Domínio

Apêndice A

Programa HETERO2D

A.1 Algoritmo de Geração de Microestruturas de Partículas

Um dos objetivos do programa HETERO2D é o de fornecer um algoritmo de geração de uma microestrutura de partículas (RSA¹). A estrutura deste código é ilustrada na figura A.1. Num nível superior encontra-se o programa `auto.f90`, onde os principais parâmetros da simulação são definidos. De seguida o programa principal chama um programa secundário denominado de `femcore.f90`, associado ao qual se encontram várias sub-rotinas, como se ilustra na figura A.1.

Nesta análise, o processo de geração de uma microestrutura de partículas será usada tal como é fornecida na sub-rotina `ranpack.f90`, e a ordem de integração associada aos elementos da malha será determinada através da sub-rotina `ordint.f90`. Ambas as sub-rotinas estão situadas na pasta *Particle_Generator*, que se encontra dentro das *Subroutines*.

Após a execução do código são gerados dois ficheiros, o `MAT_mesh.m` e o `MAT_particle.m`, ambos criados na pasta *DATA*, estes ficheiros sendo usados para a visualização dos resultados através do ficheiro `hetero.m`, situado na pasta *Plot*. Neste ficheiro são criados dois gráficos, o primeiro referente à Microestrutura e o segundo referente ao Tipo de Elemento.

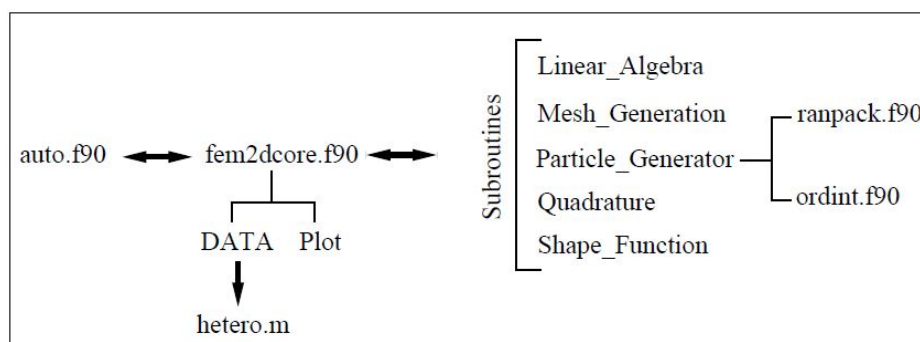


Figura A.1: Estrutura do código HETERO2D para o algoritmo de geração de microestruturas.

A.1.1 Sub-rotina `ranpack.f90`

- TIGHT — Controla o grau de interpenetração de partículas;

¹Do inglês: *Random Sequential Addition*.

- FIT_BOX — Controla se as partículas devem estar totalmente incluídas no interior da célula (=1) ou não (=0);
- MAX_COUNT — Número máximo de tentativas de colocação aleatória dentro da célula, antes de uma amostra incompleta ser descartada;
- MAXTRY — Número máximo de tentativas antes de a geração de partículas ser considerada falhada, pelos parâmetros em questão.

A.1.2 Sub-rotina `ordint.f90`

Nesta sub-rotina é determinada a ordem de integração para a malha dos elementos do MEF, sendo as propriedades do material atribuídas aos pontos de integração dos elementos em conformidade.

- CONFORM — Determina se os elementos da interface devem ser da matriz (=0), do reforço (=1) ou mistas (=2).

A.1.3 Sub-rotina `auto.f90`

- VOLFRAC_MAX — A fração de volume requerida;
- NUMPA — O número de partículas esféricas a ser gerado, que determina o raio RADPA;
- ARX, ARY, EXPX, EXPY — Parâmetros morfológico e de razão de aspeto, e expoentes, nas direções X e Y , para elipsóides generalizados;
- PERIODIC — Interruptor para microestruturas periódicas (=1) ou aleatórias (=0);
- N0 — Número de elementos da malha a ser utilizado na resolução, determinado por $NX = NY = \text{INTEGER} \left(\sqrt{\frac{(N0^2)}{\text{VOLFRAC_MAX}}} \right)$, ver figura A.2;
- NUMIP_HI, NUMIP_LO — Número de pontos de integração num elemento, ver figura A.2.

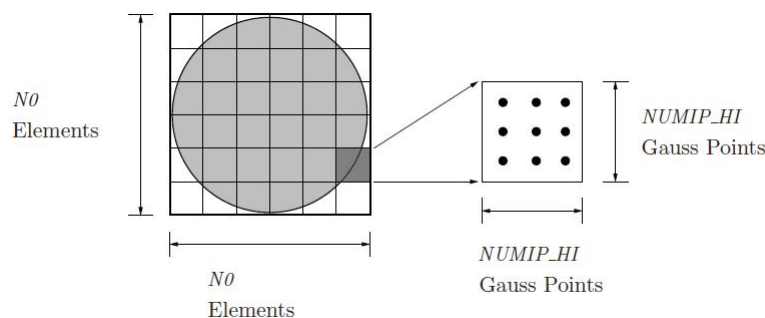


Figura A.2: Representação dos parâmetros N_0 e $NUMIP_HI$.

A.2 Condições de Fronteira Disponíveis

O código permite ainda a seleção de diferentes condições de fronteira para efetuar análises de homogeneização, nomeadamente condições de fronteira UT-BC, LD-BC e PR-BC, que podem ser controladas por deformação, \mathcal{E} , ou por tensão, Σ . Neste contexto, os tipos de BC utilizados são:

- \mathcal{E} -UT-BC — Condições de fronteira com tração uniforme;
- \mathcal{E} -LD-BC — Condições de fronteira com deslocamento linear;
- \mathcal{E} -PR-BC — Condições de fronteira periódicas;
- Σ -UT-BC — Condições de fronteira com tração uniforme.

Neste tipo de análise, após a geração da malha da microestrutura, surgem diferentes sub-rotinas, também chamadas pelo programa principal `auto.f90`, que se encontram resumidas na figura A.2 (ver também figura A.1).

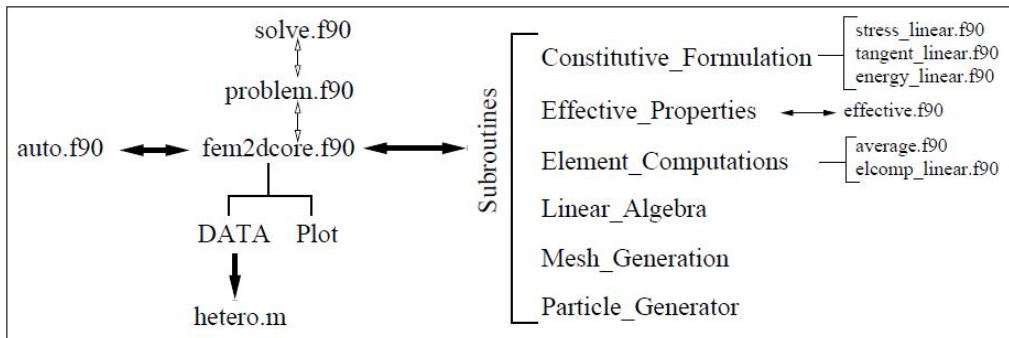


Figura A.3: Estrutura do código HETERO2D para a metodologia de homogeneização.

- `femcore.f90` — Neste programa realiza-se a análise mecânica com base nos ficheiros incluídos no `problem.f90`, que contém o procedimento de carregamento incremental e o de carregamento de adaptabilidade;
- `solve.f90` — Gera o sistema de equações a serem resolvidas e atualiza a solução. As condições de fronteira também são aqui aplicadas;
- *Constitutive_Formulation* — os programas `stress_linear.f90`, `tangent_linear.f90` e `energy_linear.f90` contêm a tensão, a tangente e a energia para um material linear elástico, respetivamente;
- *Effective_Properties* — `effective.f90` contém o cálculo da tensão efetiva, da deformação efetiva e da energia;
- *Element_Computations* — `average.f90` calcula as médias de tensão, deformação e energia, para serem usadas em `effective.f90`, onde se calculam os valores efetivos. `elcomp_linear.f90` gera as matrizes de rigidez e os vetores de força do elemento, para um material linear elástico.

Tal como no programa anterior, os parâmetros em análise são ajustados no ficheiro `auto.f90`, programa principal, nomeadamente o `BC_TYPE`, que define o tipo de condição de fronteira aplicada: \mathcal{E} -LD-BC (=1), Σ -UT-BC (=2), \mathcal{E} -PR-BC (=3) e \mathcal{E} -UT-BC (=4). No final

o programa gera três ficheiros de resultados em formato `.m`, `MAT_mesh.m`, `MAT_particle.m` e `MAT_uniaxial.m`, ficheiros estes que serão utilizados no ficheiros `hetero.m` para a visualização dos resultados.

A.3 Determinação de Propriedades Macroscópicas

Neste tipo de análise, os parâmetros macroscópicos de elasticidade linear dos compósitos bifásicos de partículas são calculados para modelos bidimensionais. Estes modelos bidimensionais podem ser interpretados como de estado plano de tensão ou de estado plano de deformação.

A estrutura do programa é muito idêntica ao anterior, com a exceção de duas novas sub-rotinas, inseridas na pasta *Effective_Properties*, que se encontra dentro da pasta *Subroutines*.

- `compute_tangent.f90` — Os resultados dos testes a partir do `femcore.f90`, são pós-processados para se calcular $\overline{\mathbf{I}\mathbf{E}}$. Em seguida o resultado é armazenado em `EFFTAN(:, :, :)`;
- `effective.f90` — A tensão e a deformação macroscópica são usadas para se calcular $\bar{\kappa}$ e $\bar{\mu}$. O resultado é armazenado na variável `EFFMATPAR(:)`, com `EFFMATPAR(1)= $\bar{\kappa}$` e `EFFMATPAR(2)= $\bar{\mu}$` .

Bibliografia

- [1] R. Hill. Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **11**:357–372, 1963.
- [2] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*, Springer, 2002.
- [3] T.I. Zohdi, P. Wriggers. *Introduction to Computational Micromechanics*, Springer, 2005.
- [4] S.J. Hollister, N. Kikuchi. A Comparison of Homogenization and Standard Mechanics Analysis for Periodic Porous Composites, *Computational Mechanics* **10**:73–95, 1992.
- [5] S. Hazanov, C. Huet. Order Relationships for Boundary Conditions Effect in Heterogeneous Bodies Smaller than the Representative Volume, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **42**(12):1995–2011, 1994.
- [6] C. Miehe, A. Koch. Derivation of the In-Plane Elastic Characteristics of Masonry Through Homogenization Theory, *International Journal of Solids and Structures* **32**:137–163, 1995.
- [7] S. Nemat-Nasser, M. Hori. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, 2.^a edição, North-Holland, 1999.
- [8] A. Anthoine. Computational Micro-to-Macro Transitions of Discretized Microstructures Undergoing Small Strains, *Archive of Applied Mechanics* **72**:300–317, 2002.
- [9] R. Hill. On Constitutive Macro-Variables for Heterogeneous Solids at Finite Strain, *Proceedings of the Royal Society of London A* **326**(1565):131–147, 1972.
- [10] S. Nemat-Nasser. *Plasticity: A Treatise on Finite Deformation of Heterogeneous Inelastic Materials*, Cambridge University Press, 2004.
- [11] J. Aboudi. *Mechanics of Composite Materials: A Unified Micromechanical Approach*, Elsevier, 1991.
- [12] R.M. Christensen. *Mechanics of Composite Materials*, Krieger Publishing Company, 1995.
- [13] M.M. Kaminski. *Computational Mechanics of Composite Materials: Sensitivity, Randomness and Multiscale Behavior*, Springer, 2002.
- [14] L.F. Nielsen. *Composite Materials: Properties as Influenced by Phase Geometry*, Springer, 2005.
- [15] D. Cioranescu, P. Donato. *An Introduction to Homogenization*, Oxford University Press, 1998.

-
- [16] N. Bakhvalov, G. Panasenko. *Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media*, Kluwer Academic Publishers, 1989.
- [17] C. Huet. Application of Variational Concepts to Size Effects in Elastic Heterogeneous Bodies, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **38**(6):813–841, 1990.
- [18] T.I. Zohdi, P. Wriggers, C. Huet. A method of Substructuring Large-Scale Computational Micromechanical Problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **190**:5636–5656, 2001.
- [19] I. Temizer. *Homogenization in Linear and Non-Linear Elasticity*, Dissertação de Tese de Doutorado, Universidade da Califórnia, Berkeley, Califórnia, 2005.
- [20] S. Hazanov, M. Amieur. On overall Properties of Elastic Heterogeneous Bodies Smaller than the Representative Volume. *Internation Journal of Engineering Science* **33**(9):1289–1301, 1995.
- [21] R. Hill, J.R. Rice. Elastic Potentials and the Structure of Inelastic Constitutive Laws. *SIAM Journal on Applied Mathematics* **25**(3):448–461, 1973.
- [22] R.W. Ogden. On the Overall Moduli of Non-Linear Elastic Composite Materials, *Journal of the Mechancs and Physics of Solids* **22**:541–553, 1974.
- [23] F. Devries. Homogenization of Elastomer Matrix Composites: Method and Validation, *Composites Part B* **29B**:753–762, 1998.
- [24] F. Feyel, J.-L. Chaboche. FE² Multiscale Approach for Modelling the Elastoviscoplastic Behavior of Long Fibre SiC/Ti Composite Materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **183**:309–330, 2000.
- [25] Z. Hashin. Analysis of Composite Materials, *Journal of Applied Mechanics* **50**:481–505, 1983.
- [26] J. Guedes, N. Kikuchi. Preprocessing and Postprocessing for Materials Based on the Homogenization Method with Adaptive Finite Element Methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **83**:143–198, 1990.
- [27] A.J.C. Molina. *Computational Homogenization for Multi Scale Finite Element Simulation*, Dissertação de Tese de Doutorado, Universidade de Gales, Swansea, 2007.
- [28] I.A.R. Lopes. *Análise do Dano Dúctil Baseada em Modelos Multiescala*, Dissertação do Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto, 2013.
- [29] I. Termizer. *Micromechanics: Analysis of Heterogeneous Materials*, Lecture Notes in Micromechanics, Bilkent University, Ankara, Turquia, 2012.
- [30] E. Sanchez-Palencia. *Non-homogeneous Media and Vibration Theory*, Lecture Notes in Physics, vol. 127, Springer-Verlag, 1980.
- [31] S.D. Poisson. Second Mémoire sur la Théorie du Magnétisme, *Académie Royale des Sciences de l’Institut de France* **5**:488–533, 1824.
- [32] J.C. Maxwell. *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, 1873.
-

BIBLIOGRAFIA

- [33] J.W. Rayleigh. On the Influence of Obstacles Arranged in Rectangular Order upon the Properties of a Medium, *Philosophical Magazine* **34**(5):481–502, 1892.
- [34] S. Spanolo. Sulla Convergenza di Soluzioni di Equazioni Paraboliche ed Ellittiche, *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa* **22**(3):571–597, 1968.
- [35] E. Sanchez-Palencia. Solutions Périodiques par Rapport aux Variables d’Espace et Applications, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences — Série A–B* **271**:A1129–A1132, 1970.
- [36] E. De Giorgi, S. Spagnolo. Sulla Convergenza degli Integrali dell’Energia per Operatori Ellittici del Secondo Ordine, *Bollettino della Unione Matematica Italiana* **8**(4):391–411, 1973.
- [37] A. Bensoussan, J.-L. Lions, G. Papanicolaou. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland Publishing Co., 1978.
- [38] J.-L. Lions. *Some Methods in the Mathematical Analysis of Systems and their Control*, Gordon & Breach Science Publishers, 1981.
- [39] A. Drago, M. Pindera. Micro-macromechanical Analysis of Heterogeneous Materials: Macroscopically Homogeneous vs Periodic Microstructures, *Composites Science and Technology* **67**(2007):1243–1263, 2006.
- [40] J. M. R. S. Tavares. *Introdução ao Método dos Elementos Finitos*, Instituto de Engenharia Biomédica, 1998.
- [41] R. F. Roberta. *Caracterização de Desempenho de uma Aplicação Paralela do Método dos Elementos Finitos em Ambientes Heterogêneos de PCs*, Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, Brasil, 2006.
- [42] F. Teixeira-Dias, J. Pinho-da-Cruz, R.A. Fontes Valente, R. J. Alves de Sousa. *Método dos Elementos Finitos — Técnicas de Simulação Numérica em Engenharia*, ETEP, 2010.
- [43] J. A. D. Oliveira. *Modelação Micromecânica do Comportamento de Materiais Compósitos de Matriz de Alumínio*, Dissertação do Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica, Universidade de Aveiro, Portugal, 2006.
- [44] O. Zienkiewicz, R. Taylor. *The Finite Element Method*, 5.^a edição, Butterworth Heineemann, 2000.
- [45] J. Pinho-da-Cruz. *Caracterização Termomecânica de Materiais Multifásicos Utilizando Procedimentos de Homogeneização*, Dissertação em Tese de Doutoramento, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 2007
- [46] C. Boller, T. Seeger. *Materials Data for Cyclic Loading, Part D: Aluminium and Titanium Alloys*, Materials Science Monographs, Elsevier, 1987.
- [47] F. Teixeira-Dias. *Tensões Residuais de Origem Térmica em Materiais Compósitos de Matriz Metálica — Modelação Matemática e Estudos Numéricos*, Dissertação de Tese de Doutoramento, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 1999.
- [48] W. Voigt. Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper, *Annalen der Physik und Chemie (Leipzig)* **38**:573–587, 1889.

- [49] A. Reuss. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **9**:49–58, 1929.
- [50] Z. Hashin, S. Shtrikman. A Variational Approach to the Theory of the Elastic Behaviour of Multiphase Materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **11**(2):127–140, 1963.
- [51] R.J. Moon, M. Tilbrook, M. Hoffman, A. Neubrand. Al-Al₂O₃ Composites with Interpenetrating Network Structures: Composite Modulus Estimation, *Journal of the American Ceramic Society* **88**(3):666–674, 2005.
- [52] R.W. Zimmerman. Hashin-Shtrikman Bounds on the Poisson Ratio of a Composite Material, *Mechanics Research Communications* **19**(6):563–569, 1992.